



**HAL**  
open science

# Simulation 3D éléments finis des macroségrégations en peau induites par déformations thermomécaniques lors de la solidification d'alliages métalliques

Benjamin Rivaux

► **To cite this version:**

Benjamin Rivaux. Simulation 3D éléments finis des macroségrégations en peau induites par déformations thermomécaniques lors de la solidification d'alliages métalliques. Matériaux. École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2011. Français. NNT : 2011ENMP0028 . pastel-00637168

**HAL Id: pastel-00637168**

**<https://pastel.hal.science/pastel-00637168>**

Submitted on 3 Nov 2011

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

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

École doctorale n°364 :  
Sciences fondamentales et appliquées

**Doctorat ParisTech**

**T H È S E**

pour obtenir le grade de docteur délivré par

**l'École nationale supérieure des mines de Paris**

**Spécialité « Mécanique numérique »**

*présentée et soutenue publiquement par*

**Benjamin RIVAUX**

le 8 juillet 2011

**Simulation 3D éléments finis des macroségrégations en peau  
induites par déformations thermomécaniques lors de la  
solidification d'alliages métalliques**

~ ~ ~

**3D finite element simulation of skin macrosegregations induced  
by thermomechanical deformations during metallic alloys  
solidification**

Directeurs de thèse : **Michel Bellet**  
**Charles-André Gandin**

**Jury**

**Dr. Mohammed M'HAMDI**, Professeur NTNU, SINTEF, Trondheim, No

**Dr. Jacqueline ETAY**, Directrice de recherche CNRS, SIMaP, Grenoble, F

**Dr. Gérard LESOULT**, Professeur émérite INPL, IJL, Nancy, F

**Dr. Manuel BOBADILLA**, ArcelorMittal, Maizières-lès-Metz, F

**Dr. Michel BELLET**, Professeur MINES ParisTech, CEMEF, Sophia Antipolis, F

**Dr. Charles-André GANDIN**, Directeur de recherche CNRS, CEMEF, Sophia Antipolis, F

Rapporteur

Rapporteur

Président

Examineur

Directeur de thèse

Directeur de thèse

**T  
H  
È  
S  
E**

**MINES ParisTech**

**Centre de mise en forme des matériaux - UMR CNRS 7635**

Rue Claude Daunesse B.P. 207, 06904 Sophia Antipolis Cedex, France



# Remerciements

Les premières lignes de ce manuscrit s'adressent en premier lieu à mes deux directeurs de thèse, Michel Bellet et Charles-André Gandin. Je tiens à les remercier pour la confiance qu'ils m'ont accordée tout au long de ces trois années ainsi que pour le temps qu'ils m'ont consacré pour répondre à mes nombreuses interrogations sur la solidification des métaux et les méthodes numériques. Les discussions que nous avons eues ont été enrichissantes tant professionnellement que personnellement.

Je tiens également à remercier les membres du jury : Mohammed M'Hamdi et Jacqueline Etay pour avoir lu attentivement le présent manuscrit, Gérard Lesoult pour avoir accepté d'être le président du jury ainsi que Manuel Bobadilla pour avoir examiné ce travail. Je les remercie tous aussi pour leurs remarques et questions ouvrant de nouvelles perspectives à ce travail.

Je remercie également les partenaires du projet européen dans lequel s'est inscrit cette thèse : Manuel Bobadilla et Nicolas Bontemps du centre de recherche ArcelorMittal de Maizières-lès-Metz pour leurs conseils et leurs encouragements lors de nos réunions ou visio-conférences ainsi que Thomas Volkmann du centre aérospatial allemand de Cologne pour les précisions qu'il m'a fournies sur la partie expérimentale du projet.

Mes remerciements vont aussi à ceux qui au Cemef et à Transvalor ont contribué de près ou de loin à cette thèse : Hugues Digonnet et Elie Hachem pour leur connaissance de CimLib<sup>®</sup>, Carole Torrin et Jean-Marc Tanzi pour avoir résolu les problèmes d'installation et de compilation du logiciel Thercast<sup>®</sup>, Patrick Coels pour m'avoir facilité mes démarches administratives, Marie-Françoise et Sylvie Ma. pour leur bonne humeur, les bibliothécaires Brigitte et Sylvie pour leur réactivité et disponibilité, Frédéric Costes et Olivier Jaouen pour m'avoir donné de leur temps pour répondre à mes questions sur les aspects numériques de Thercast<sup>®</sup> et Christel Pequet pour avoir répondu à mes questions sur le solveur thermique `_p1_enthalpique_inc` dans CimLib<sup>®</sup>.

Enfin une thèse ne peut se faire sans le soutien de ses proches. Merci à mes parents et à ma sœur pour leur appui. Merci à mes amis : Anne-Solène, Cécile, Guillaume F., Johann, Laetitia, Gaëlle, Greg, Guillaume D., Mathilde, Raphaëlle, Ridha, Sylvain, Sandrine, Séverine, Sylvie, Stéphanie et Tommy pour les bons moments passés ensemble, à la plage, à la salsa, en randonnée ou encore en soirée.





# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>1</b>
<b>I Introduction à la solidification des métaux et aux macroségrégations</b>	<b>7</b>
I.1 Mise en œuvre industrielle . . . . .	11
I.1.1 Les technologies utilisées . . . . .	11
I.1.2 Les défauts observés . . . . .	13
I.2 Phénomènes associés à la solidification des métaux . . . . .	16
I.2.1 Germination, croissance des structures et zone pâteuse . . . . .	16
I.2.2 Microségrégation . . . . .	18
I.3 Macroségrégation . . . . .	22
I.3.1 Une combinaison de phénomènes . . . . .	22
I.3.2 Effet des mouvements de convection et du retrait à la solidification	25
I.3.3 Effet de la déformation de la zone pâteuse . . . . .	26
I.4 Objectif, raison, cadre et plan de l'étude . . . . .	26
<b>II Modélisation des macroségrégations</b>	<b>31</b>
II.1 Problématique . . . . .	35
II.2 Equations de conservation à résoudre . . . . .	35
II.2.1 Volume Elémentaire Représentatif . . . . .	36
II.2.2 Méthode de la prise de moyenne volumique . . . . .	36
II.2.3 Hypothèses et équations finales . . . . .	39
II.3 Modèle de microségrégation . . . . .	41
<b>III Stratégie suivie et méthodes numériques de résolution</b>	<b>45</b>
III.1 Stratégie de résolution . . . . .	49
III.1.1 Résolution individuelle des équations . . . . .	49
III.1.2 Résolution couplée des équations . . . . .	50
III.1.3 Stratégie de simulation et de validation . . . . .	50
III.1.4 Moyens utilisés . . . . .	51
III.2 Résolution de la mécanique des fluides . . . . .	51
III.2.1 Formulation forte . . . . .	51
III.2.2 Formulation faible . . . . .	53
III.2.3 Discrétisation . . . . .	55
III.2.4 Cas de validation . . . . .	56
III.3 Résolution de la conservation de l'énergie . . . . .	60
III.3.1 Formulation forte . . . . .	60

III.3.2	Formulation faible . . . . .	60
III.3.3	Discrétisation . . . . .	62
III.3.4	Cas de validation . . . . .	65
III.4	Résolution de la conservation des espèces chimiques . . . . .	71
III.4.1	Formulation forte . . . . .	71
III.4.2	Formulation faible . . . . .	72
III.4.3	Discrétisation . . . . .	73
III.4.4	Cas de validation . . . . .	73
III.5	Résolution de la mécanique du solide . . . . .	73
III.5.1	Loi de comportement des aciers . . . . .	74
III.5.2	Résolution thermomécanique . . . . .	76
III.5.3	Cas de validation . . . . .	79
<b>IV</b>	<b>Expériences pour comparaison avec les simulations numériques</b>	<b>81</b>
IV.1	Expérience pour la simulation des macroségrégations sans déformation du solide . . . . .	85
IV.2	Expérience pour la simulation de la déformation du premier voile solide . . . . .	87
IV.3	Expériences pour la simulation des macroségrégations avec déformation du solide . . . . .	97
<b>V</b>	<b>Simulation numérique des macroségrégations en peau à solide déformable</b>	<b>105</b>
V.1	Etat de l'art des simulations . . . . .	109
V.2	Macroségrégation à solide fixe et rigide . . . . .	110
V.2.1	Equations à résoudre . . . . .	110
V.2.2	Schéma de résolution . . . . .	112
V.2.3	Confrontation simulation-expérience . . . . .	112
V.3	Déformation du premier voile solidifié . . . . .	120
V.3.1	Thercast® . . . . .	120
V.3.2	Confrontation simulation - expérience . . . . .	122
V.4	Macroségrégation en peau à solide déformable . . . . .	131
V.4.1	Rappel des équations à résoudre . . . . .	131
V.4.2	Schéma de résolution . . . . .	132
V.4.3	Application à l'expérience TEXUS . . . . .	134
V.4.4	Application à l'expérience de El-Bealy . . . . .	140
V.5	Cas de solidification d'un alliage ternaire . . . . .	147
V.5.1	Rappel des équations à résoudre . . . . .	147
V.5.2	Mise en donnée numérique . . . . .	148
V.5.3	Résultats . . . . .	148
	<b>Conclusion</b>	<b>153</b>

---

<b>Annexes</b>	<b>159</b>
Annexe A Equivalence des équations de conservation des espèces chimiques	161
Annexe B Réécriture des équations de conservation avec solide déformable	169
Annexe C Résolution du modèle de microségrégation	173
C.1 Alliage binaire . . . . .	174
C.2 Alliage multiconstitué . . . . .	174
Annexe D Solution analytique de la solidification d'une barre semi-infinie	179
Annexe E Données thermophysiques et thermomécaniques de l'alliage b1	183
Annexe F Données thermophysiques et thermomécaniques de l'alliage Fe-0.105%pdsC	191
Annexe G Données thermophysiques et thermomécaniques de l'alliage Fe-0.53%pdsC	197
Bibliographie	203



# Notations

## Lettres latines

Symbole	Signification	Unités
$a$	diffusivité thermique	$m^2.s^{-1}$
$c_p$	chaleur massique à pression constante	$J.kg^{-1}.K^{-1}$
$C^0(\Omega)$	espace des fonctions continues sur $\Omega$	—
$D$	coefficient de diffusion chimique	$m^2.s^{-1}$
$e$	épaisseur	$m$
$E$	module d'Young	$N.m^{-2}$
$\mathbb{E}$	tenseur d'élasticité d'ordre 4	$N.m^{-2}$
$\mathcal{E}$	ensemble des éléments finis du domaine $\Omega$ ( $\mathcal{E} \subset \mathbb{N}$ )	—
erf	fonction « erreur » définie par $\text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-u^2} du$	—
$f$	fraction massique de phase	—
$Fo$	nombre de Fourier	—
$g$	fraction volumique de phase	—
$\mathbf{g}$	vecteur gravité	$m.s^{-2}$
$h$	hauteur	$m$
$h$	enthalpie massique	$J.kg^{-1}$
$h_c$	coefficient de transfert convectif	$W.m^{-2}.K^{-1}$
$h_{mai}$	taille de maille	$m$
$H$	enthalpie volumique	$J.m^{-3}$
$H^1(\Omega)$	espace des fonctions appartenant à $L^2(\Omega)$ ainsi que leurs dérivées premières	— —
$\mathbb{I}$	tenseur identité	—
$\mathbf{j}$	vecteur flux de soluté	$\%pds.m^{-2}$
$J$	échange d'espèces chimiques entre phases	$\%pds.s^{-1}$
$k$	coefficient de partage	—
$K$	consistance visqueuse	$N.m^{-2}.s^m$
$K_{perm}$	perméabilité (scalaire)	$m^2$
$\mathbb{K}$	tenseur de perméabilité	$m^2$
$l$	longueur	$m$
$L$	chaleur latente de fusion	$J.kg^{-1}$
$L^2(\Omega)$	espace des fonctions de carré sommable sur $\Omega$	—
$m$	masse du domaine	$kg$
$m_{sol}$	pente du solidus	$K.(\%pds)^{-1}$
$m_{liq}$	pente du liquidus	$K.(\%pds)^{-1}$
$\mathbf{M}$	vecteur échange de quantité de mouvement entre phases	$kg.m^{-2}.s^{-2}$

<b>Symbole</b>	<b>Signification</b>	<b>Unités</b>
$(M)$	matrice M	—
$\mathbf{n}$	normale extérieure à un domaine	—
$N$	position des noeuds	—
$N_i$	position du noeud $i$	—
$p$	pression	$N.m^{-2}$
$\mathbb{P}_1$	espace des polynômes de degré inférieur ou égal à 1	—
$\mathbf{q}$	vecteur flux de chaleur	$W.m^{-2}$
$Q$	échange d'énergie entre phases	$W.m^{-3}$
$Ra$	nombre de Rayleigh	—
$Re$	nombre de Reynolds	—
$\mathbf{s}$	déviateur du tenseur des contraintes de Cauchy	$N.m^{-2}$
$t$	temps	$s$
$t_s$	temps de solidification	$s$
$T$	température	$K$
$T_c$	température de transition EVP/VP	$K$
$T_f$	température de fusion (pour un métal pur)	$K$
$\mathbf{T}$	vecteur contrainte de Cauchy	$N.m^{-2}$
Tr	trace d'un tenseur	—
$\mathbf{v}$	vecteur vitesse	$m.s^{-1}$
$\mathbf{v}_{mai}$	vecteur vitesse de maillage	$m.s^{-1}$
$v_T$	projection de $\mathbf{v}$ dans la direction du gradient thermique	$m.s^{-1}$
$V$	volume du domaine	$m^3$
$w$	concentration massique	$\%pds$
$w_i$	concentration massique de l'élément $i$	$\%pds$
$\langle\langle x \rangle\rangle$	fonction qui à un scalaire $x$ renvoie $x$ si $x > 0$ , 0 sinon	—

## Lettres grecques

<b>Symbole</b>	<b>Signification</b>	<b>Unités</b>
$\beta_T$	coefficient de dilatation thermique	$K^{-1}$
$\beta_w$	coefficient de dilatation solutale	$(\%pds)^{-1}$
$\chi$	coefficient de compressibilité	$N.m^{-2}$
$\delta$	désigne la ferrite	—
$\Delta t$	pas de temps	$s$
$\Delta \varepsilon^{tr}$	taux de retrait à la solidification	—
$\Delta T_{germ}$	surfusion de germination	$K$
$\varepsilon_r$	émissivité thermique	—
$\bar{\varepsilon}$	déformation plastique équivalente	—
$\dot{\bar{\varepsilon}}$	vitesse de déformation plastique équivalente	$s^{-1}$
$\dot{\varepsilon}$	tenseur vitesse de déformation totale	$s^{-1}$
$\dot{\varepsilon}^{el}$	tenseur vitesse de déformation élastique	$s^{-1}$
$\dot{\varepsilon}^{vp}$	tenseur vitesse de déformation viscoplastique	$s^{-1}$

Symbole	Signification	Unités
$\dot{\epsilon}^{th}$	tenseur vitesse de déformation thermique	$s^{-1}$
$\phi$	grandeur physique quelconque	—
$\phi_h$	approximation de $\phi$ sur $\mathcal{E}$	—
$\phi_{centre}$	valeur de $\phi$ au centre d'un élément fini	—
$\{\phi\}$	vecteur nodal $\phi$	—
$\hat{\phi}$	fluctuation de $\phi$ par rapport à sa moyenne intrinsèque	—
$\dot{\phi}$	dérivée lagrangienne de $\phi$	—
$d\phi/dt$	dérivée lagrangienne de $\phi$	—
$\partial\phi/\partial t$	dérivée eulérienne de $\phi$	—
$\partial_{mai}\phi/\partial t$	dérivée de grille de $\phi$	—
$\ \phi\ $	norme de $\phi$	—
$\langle\phi\rangle$	valeur moyenne d'une quantité volumique $\phi$ sur un VER	—
$\langle\phi\rangle_m$	valeur moyenne d'une quantité massique $\phi$ sur un VER	—
$\langle\phi^\alpha\rangle$	valeur moyenne de $\phi$ sur un VER pour la phase $\alpha$	—
$\langle\phi^\alpha\rangle^\alpha$	moyenne intrinsèque de $\phi$ sur le volume de la phase $\alpha$	—
$\varphi_i$	fonction d'interpolation associée au nœud $i$	—
$\gamma$	désigne l'austénite	—
$\Gamma$	échange de masse entre phases	$kg.m^{-3}.s^{-1}$
$\kappa$	conductivité thermique	$W.m^{-1}.K^{-1}$
$\lambda$	multiplicateur plastique	$m.s.kg^{-1}$
$\lambda_1$	espace interdendritique primaire	$m$
$\lambda_2$	espace interdendritique secondaire	$m$
$\mu$	viscosité dynamique	$N.s.m^{-2}$
$\nu$	coefficient de Poisson	—
$\Omega$	domaine physique ( $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ )	—
$\partial\Omega$	frontière du domaine physique	—
$\rho$	masse volumique	$kg.m^{-3}$
$\sigma$	tenseur des contraintes de Cauchy	$N.m^{-2}$
$\sigma_{eq}$	contrainte équivalente de von Mises	$N.m^{-2}$
$\tau$	paramètre de stabilisation	—
$\xi$	fonction de phase	—
$\nabla$	gradient	—
${}^T\nabla$	transposée du gradient	—
$\nabla\cdot$	divergence	—
$\times$	produit vectoriel	—

## Exposant

Symbole	Signification
$\alpha$	désigne une phase quelconque
$d$	dimension de l'espace ( $d = 2, 3$ )
$l$	désigne la phase liquide
$l - s$	désigne une valeur dans le liquide relative à celle dans le solide



<b>Symbole</b>	<b>Signification</b>
$m$	sensibilité à la vitesse de déformation
$n$	coefficient d'écroûissage
$(n)$	$n^{\text{ième}}$ itération de Newton-Raphson
$s$	désigne la phase solide
$s/l$	désigne l'interface solide/liquide
*	relatif aux fonctions-test

## Indice

<b>Symbole</b>	<b>Signification</b>
$e$	relatif à un élément fini ( $e \in \mathcal{E}$ )
$eut$	relatif à l'eutectique
$ext$	relatif à l'extérieur du domaine $\Omega$
$d$	relatif à la partie déviatoire d'un tenseur
$imp$	relatif à une valeur imposée
$init$	relatif à la valeur à l'instant initial
$liq$	relatif au liquidus
$p$	relatif à la partie sphérique d'un tenseur
$sol$	relatif au solidus
$x$	relatif à la première composante de l'espace
$y$	relatif à la deuxième composante de l'espace

## Abréviation

<b>Symbole</b>	<b>Signification</b>
ALE	<u>A</u> rbitrairement <u>l</u> agrangien <u>e</u> ulérien
CCEMLCC	<u>C</u> hill <u>C</u> ooling for the <u>E</u> lectro <u>M</u> agnetic <u>L</u> evitator in relation with <u>C</u> ontinuous <u>C</u> asting of steel
CEMEF	<u>C</u> entre de <u>M</u> ise en <u>F</u> orme des matériaux
CNRS	<u>C</u> entre <u>N</u> ational de <u>R</u> echerche <u>S</u> cientifique
ESA	Agence spatiale européenne ( <u>E</u> uropean <u>S</u> pace <u>A</u> gency)
EVP	<u>E</u> lasto- <u>v</u> iscoplastique
INPL	<u>I</u> nstitut <u>N</u> ational <u>P</u> olytechnique de <u>L</u> orraine
LSIC	<u>L</u> east <u>S</u> quare on <u>I</u> ncompressibility <u>C</u> onstraint
PSPG	<u>P</u> ressure- <u>S</u> tabilizing <u>P</u> etrov <u>G</u> alerkin
SIMaP	<u>S</u> cience et <u>I</u> ngénierie des <u>M</u> atériaux et <u>P</u> rocédés
SUPG	<u>S</u> reamline- <u>U</u> pwind <u>P</u> etrov <u>G</u> alerkin
UMR	<u>U</u> nité <u>M</u> ixte de <u>R</u> echerche
VER	<u>V</u> olume <u>E</u> lémentaire <u>R</u> éprésentatif
VP	<u>V</u> iscoplastique





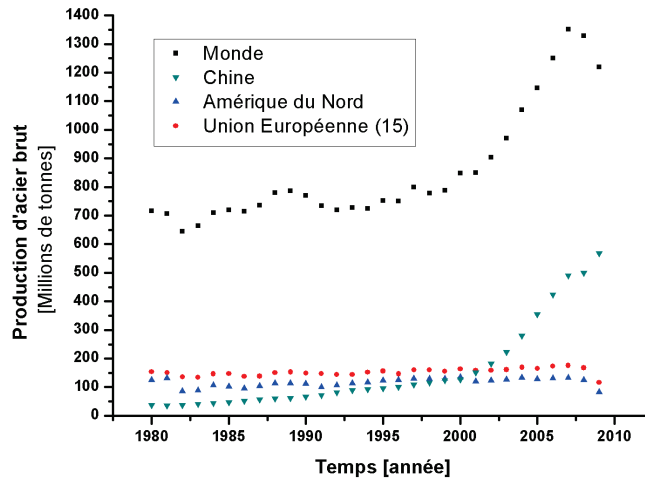
# Introduction générale

La ségrégation correspond à une répartition non uniforme des espèces chimiques au sein d'un matériau. Quand elle a lieu à l'échelle microscopique (typiquement  $10^{-6} m - 10^{-4} m$ ), on parle de microségrégation. Dans le cas où la ségrégation se développe à l'échelle macroscopique (typiquement  $10^{-4} m - 1 m$ ), elle est désignée par le terme de macroségrégation. Les macroségrégations apparaissent au moment de la solidification du métal et on les observe soit à cœur (centre de la pièce) soit en peau (premiers centimètres sous la surface). Avant de décrire plus en détail le phénomène de macroségrégation (types, causes...) apparaissant au cours de la solidification des métaux et d'aborder la simulation numérique des macroségrégations en peau, objet de notre étude, nous revenons brièvement sur le contexte global dans lequel ce travail s'inscrit, à savoir le domaine de la sidérurgie. Quelques chiffres clés sur le secteur sidérurgique ainsi qu'une description rapide de son activité principale, la production d'acier, seront donnés pour finir avec une présentation des enjeux de l'étude des macroségrégations ainsi que l'organisation du texte de ce manuscrit.

## L'industrie sidérurgique

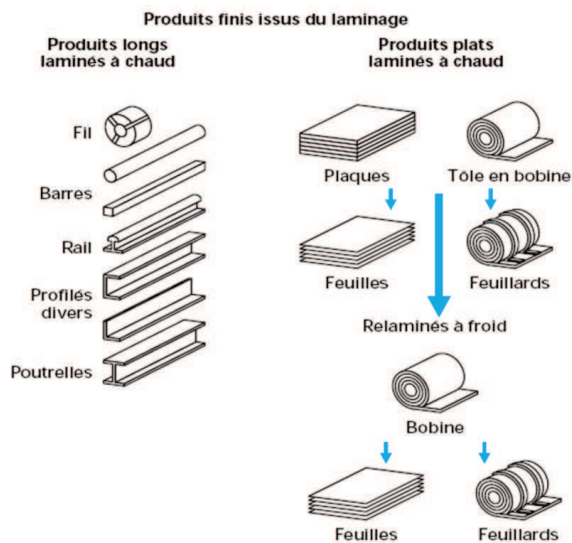
La sidérurgie (du grec sidérougion "atelier du forgeron", lui-même formé à partir de sidéros "fer" et de ergon "travail") désigne l'art de la fabrication et de l'élaboration des alliages de fer. Elle est une des branches de la métallurgie (travail des métaux). Le début de la sidérurgie remonte aux environs de 1000 av. J.-C. correspondant au début de la période préhistorique de l'âge du fer. Depuis lors, la sidérurgie a considérablement évolué et s'est principalement développée autour des aciers, alliages de fer contenant au maximum 2% de carbone. Aujourd'hui, l'industrie sidérurgique produit aux alentours de 1200 millions de tonnes d'acier brut par an comme montré figure 1. Au cours des dix dernières années, la production a considérablement augmenté, passant de 800 millions en 2000 à 1200 millions

en 2009. Cette progression est largement due à l'émergence économique d'un certain nombre de pays à forte population, notamment la Chine, mais aussi plus récemment l'Inde et le Brésil.



**Fig. 1:** Evolution de la production d'acier [WSA, WorldSteel Association]

L'acier est produit sous différentes formes illustrées figure 2 : tôles minces, barres rondes... Ces produits sont destinés à diverses industries (aéronautique, automobile, nucléaire...) qui les transformeront à nouveau en vue de leur application finale. On peut citer par exemple l'armature des véhicules ou les cannettes de soda obtenues par emboutissage de tôles.

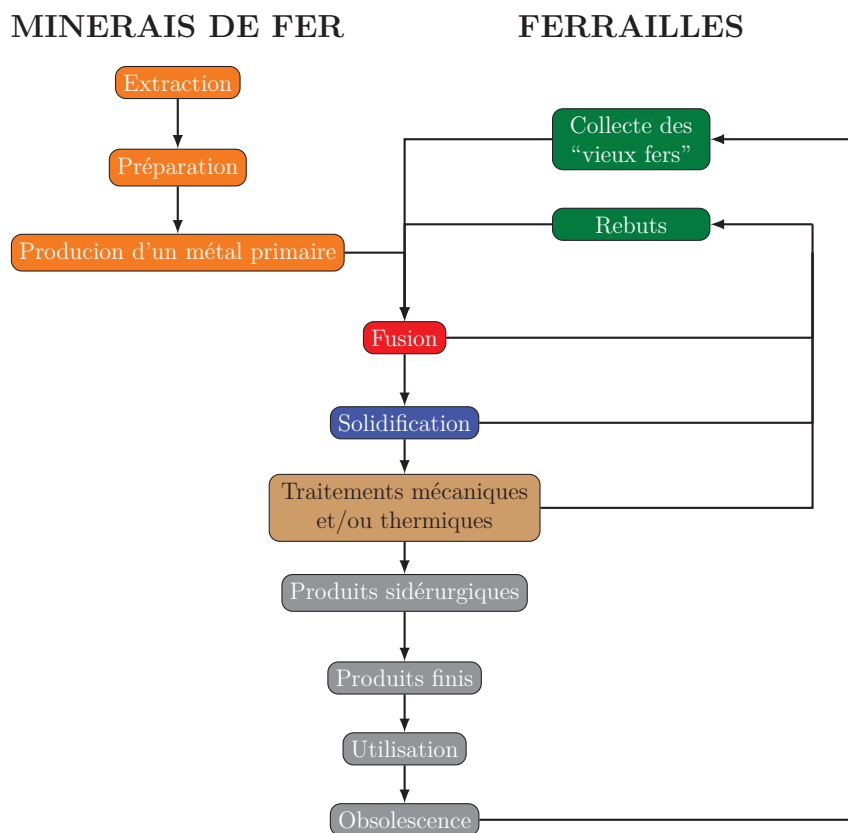


**Fig. 2:** Exemples de produits sidérurgiques [Cho04]

L'industrie sidérurgique est un élément clé dans le paysage industriel. En amont, de par les quantités produites, elle génère de nombreuses activités liées à l'approvisionnement et au transport de ses matières premières mais aussi pour la fabrication de ses machines. En aval, la qualité et les caractéristiques de ses produits sont déterminantes pour les performances des pièces utilisées dans les autres industries (nucléaire, aéronautique, automobile, naval, pétrochimie...) et conditionnent en cela leurs développements.

### Cycle de l'acier

Les produits sidérurgiques sont obtenus grâce à une multitude d'opérations dont seules quelques unes sont représentées schématiquement à la figure 3. Pour plus de détails, on pourra se reporter à [Ast00], [Blo04] et [Gro07].



**Fig. 3:** Schéma simplifié du cycle actuel de l'acier (inspiré de [Ast00])

Le cycle de production débute par l'extraction de la matière première : le minerai de fer. N'existant à l'état natif qu'en très petite quantité à la surface de la Terre, le fer extrait se présente majoritairement sous forme d'oxydes. Le minerai de fer extrait subit ensuite des opérations mécaniques visant à obtenir des morceaux calibrés. Ayant la dimension désirée, le minerai est chauffé et débarrassé de ces éléments indésirables. D'autres éléments sont ajoutés afin d'obtenir un métal liquide ayant la composition chimique souhaitée. Ce métal liquide est ensuite solidifié. A l'état solide, ses caractéristiques peuvent être encore amé-

liorées et sa géométrie modifiée par différents traitements thermiques et/ou mécaniques pour aboutir au produit final. Après utilisation, les produits en fin de vie sont collectés et triés afin de servir de matières premières. Cette filière de recyclage apporte un gain en coût et en délais de production par rapport à la filière classique issue du minerai de fer.

### **Enjeux de l'étude des macroségrégations**

Les macroségrégations sont un des défauts qui affectent la qualité des produits sidérurgiques. Elles conduisent à des propriétés non homogènes du demi-produit ou de la pièce, ce qui peut s'avérer catastrophique pour la transformation ultérieure ou la tenue en service. Les macroségrégations apparaissent lors de l'étape de solidification. Elles ne peuvent généralement pas être corrigées du fait des trop faibles coefficients de diffusion dans le métal solide. Limiter les macroségrégations dès leur apparition entraînerait des gains en temps et en argent pour les sidérurgistes. L'étude des macroségrégations représente donc un intérêt majeur. On peut voir un aperçu des recherches portant sur les macroségrégations dans les références [Bec02] ou [Les05].

### **Organisation du texte**

Notre étude porte sur la simulation numérique des macroségrégations en peau. Dans le chapitre I, seront abordés les aspects généraux de la solidification. Nous nous intéresserons aux différents phénomènes liés à la solidification avec une attention particulière portée sur le phénomène de macroségrégation. Après cette description, le modèle de macroségrégation à résoudre sera établi au chapitre II. La stratégie pour aboutir à la simulation des macroségrégations en peau sera évoquée au chapitre III ainsi que les méthodes numériques de résolution du modèle. La stratégie mise en place se fait par étapes. Chaque étape s'appuie sur des expériences dont les résultats pourront être comparés avec ceux issus de la simulation numérique. Ces expériences seront décrites au chapitre IV, les simulations correspondantes et la comparaison des résultats seront abordées au chapitre V. Les simulations se feront pour des alliages binaires. Un cas de solidification d'un alliage ternaire est donné au chapitre V.







# **Introduction à la solidification des métaux et aux macroségrégations**

La solidification est le passage de la matière d'un état liquide à un état solide. Ce changement d'état se constate facilement, notamment avec l'eau : la neige en hiver ou le glaçon dans le congélateur. Mais, en ce qui concerne les métaux, derrière ce réarrangement de la matière se cache une multitude de phénomènes. Afin de mieux appréhender ces divers phénomènes, nous revenons dans ce chapitre sur les notions générales concernant la solidification des alliages métalliques ainsi que sur le vocabulaire qui sera utilisé dans la suite du manuscrit. Dans un premier temps, la mise en œuvre industrielle de la solidification sera présentée puis, dans un deuxième temps, un aperçu des phénomènes liés à la formation des macroségrégations sera donné. Enfin, le cadre et les objectifs de notre étude seront précisément définis.



## Sommaire

---

I.1	Mise en œuvre industrielle . . . . .	<b>11</b>
I.1.1	Les technologies utilisées . . . . .	11
I.1.2	Les défauts observés . . . . .	13
I.2	Phénomènes associés à la solidification des métaux . . . . .	<b>16</b>
I.2.1	Germination, croissance des structures et zone pâteuse . . . . .	16
I.2.2	Microségrégation . . . . .	18
I.3	Macroségrégation . . . . .	<b>22</b>
I.3.1	Une combinaison de phénomènes . . . . .	22
I.3.2	Effet des mouvements de convection et du retrait à la solidification . . . . .	25
I.3.3	Effet de la déformation de la zone pâteuse . . . . .	26
I.4	Objectif, raison, cadre et plan de l'étude . . . . .	<b>26</b>

---



## I.1 Mise en œuvre industrielle

### I.1.1 Les technologies utilisées

Comme évoquée dans l'introduction, la solidification est une étape cruciale dans l'élaboration de l'acier. Elle détermine en partie les futures propriétés du matériau. Les défauts survenant au cours de cette étape ne sont réversibles que dans une certaine mesure grâce à la déformation mécanique et aux traitements thermiques. Industriellement, trois principaux procédés permettent la solidification de l'acier liquide : la coulée continue, la coulée en lingot et la coulée de fonderie. Ces trois techniques sont détaillées ci-après.

#### I.1.1.1 La coulée continue

L'idée du procédé de coulée continue d'acier remonte au XIX<sup>ème</sup> siècle. Cependant sa mise en œuvre industrielle n'a été réussie qu'à partir des années 1940 - 1950. Des améliorations ont été apportées au fil des années. Ces progressions ont permis au procédé d'atteindre le caractère achevé qu'il a acquis aujourd'hui [Far89]. Une machine de coulée continue est schématisée à la figure I.1. Elle peut être courbe (cintrée) ou complètement droite.

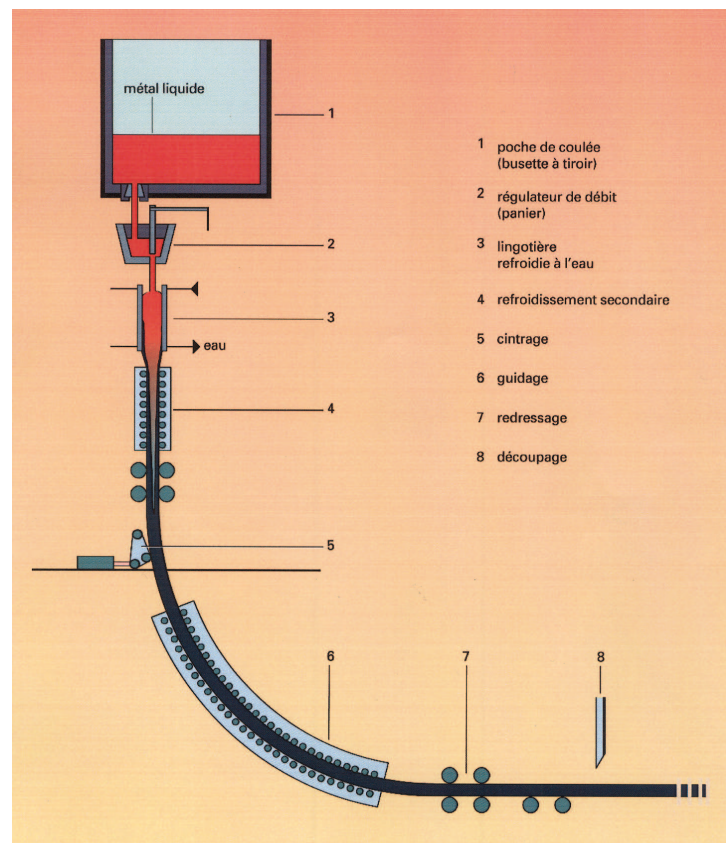


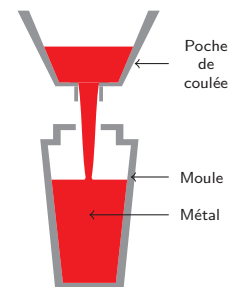
Fig. I.1: Représentation schématique d'une machine de coulée continue avec cintrage [Duf04]

Le procédé consiste à faire couler du métal en fusion dans un moule sans fond (appelé lingotière) maintenu à relativement basse température par un système de refroidissement. A son contact, une mince couche de solide se forme. A la sortie de la lingotière, l'épaisseur de ce premier voile solide est de l'ordre de la dizaine de millimètres. Capable de soutenir des efforts, cette carapace solide est entraînée dans la machine par des rouleaux extracteurs. Le métal continue de se refroidir à l'air libre ou par pulvérisation d'eau (refroidissement secondaire). L'acier liquide tend ainsi à disparaître. En fin de procédé, on obtient des demi-produits (blooms, brames ou billettes) entièrement solidifiés qui sont laminés afin d'obtenir des produits longs ou plats (figure 2, page 2). Ce procédé représente actuellement 92.8% de la production totale d'acier brut [WSA]. Davantage de détails sur la coulée continue sont accessibles aux références [Cho04] et [Bir00].

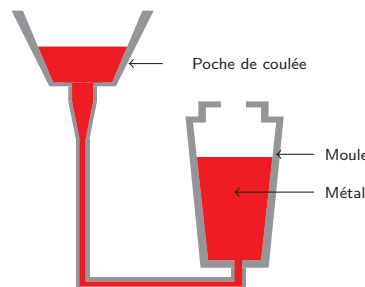
### I.1.1.2 La coulée en lingot

La coulée en lingot était le moyen le plus utilisé mais ne représente plus aujourd'hui que 6.7% de la production totale d'acier brut [WSA]. Elle a été supplantée par la coulée continue, plus rapide et rentable. Moins complexe à mettre en œuvre, la coulée en lingot consiste à remplir un moule (appelé lingotière) de métal liquide et à le laisser refroidir. Le remplissage du lingot peut se faire soit par le haut du lingot (coulée "en chute" comme schématisée à la figure I.2(a)), soit par le bas du lingot (coulée "en source" (figure I.2(b))). Les lingots solides sont ensuite laminés pour obtenir des demi-produits comme ceux de la coulée continue. En règle générale, les lingots font plus d'un mètre de haut et plusieurs tonnes. Cette voie lingot peut s'avérer nécessaire dans certains cas :

1. couler de gros lingots de forge, destinés à être mis en forme :
  - par forgeage libre : mécanique lourde, nucléaire (figure I.2(c))
  - par laminage : tôles fortes (naval)
2. couler des nuances spécifiques, difficiles à couler en continu.



(a) Schéma de la coulée en lingot en chute



(b) Schéma de la coulée en lingot en source

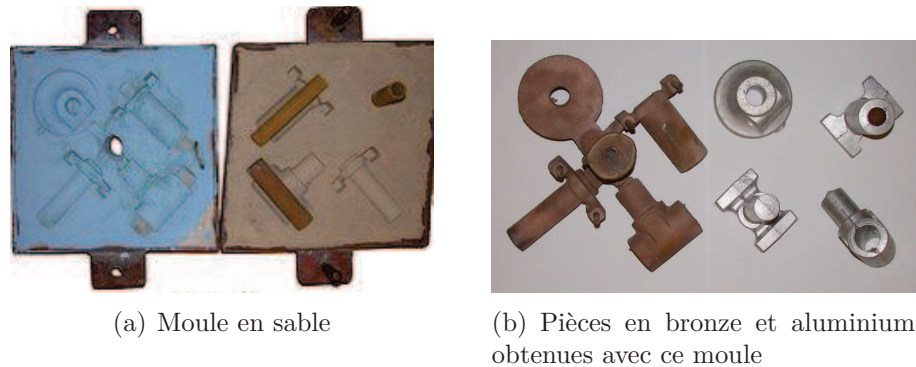


(c) Lingot de 600 tonnes destiné à produire des pièces maîtresses de réacteurs nucléaires [FrM09]

**Fig. I.2:** La voie lingot

### I.1.1.3 La coulée de fonderie

La coulée de fonderie ne représentait en 2008 que 0.3% de la production totale d'acier brut [WSA]. Elle consiste à faire couler et se solidifier le métal liquide dans un moule afin d'obtenir des pièces en limitant autant que possible les travaux ultérieurs de finition. Les dimensions des pièces peuvent être très variables. Plusieurs techniques sont possibles (en sable, à cire perdue, *lost foam*...). La figure I.3 illustre les pièces obtenues par la fonderie en sable ainsi que le moule correspondant.

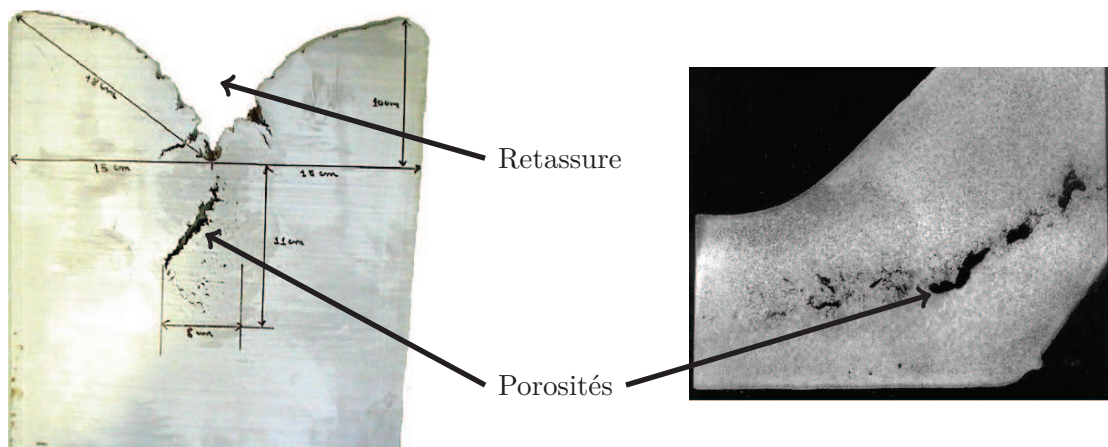


**Fig. I.3:** Moule et pièces de fonderie en sable [Wik10]

### I.1.2 Les défauts observés

On constate sur les demi-produits coulés des défauts dont on présente ici les principaux :

- Retassure et porosités (figure I.4) : la retassure est une dépression à la surface d'une pièce. Elle est due au retrait de solidification. Les porosités sont des espaces vides créés suite au retrait de solidification et/ou à l'emprisonnement des gaz, éventuellement dissous dans le liquide, et libérés au cours de la solidification.



**Fig. I.4:** Retassure et porosités dans des pièces d'acier [Bel09a]



- les criques (figure I.5) : rupture de la pièce pouvant survenir à chaud ou à froid.



Fig. I.5: Cricque sur un lingot méplat [Cer07]

- les macroségrégations : répartition non homogène des espèces chimiques au sein d'un volume dont les dimensions caractéristiques sont supérieures à celles de la structure de solidification. La macroségrégation peut être positive ou négative suivant la valeur de la concentration de l'élément d'alliage  $w$  par rapport à sa valeur initiale  $w_{init}$  dans l'acier liquide. Si  $w > w_{init}$ , on parle de macroségrégation positive et dans le cas contraire ( $w < w_{init}$ ) de macroségrégation négative. La macroségrégation se présente sous différentes formes : en A, en V, bandes. Elle peut être localisée :
  - soit au centre de la pièce (à cœur), comme illustré figures I.6 et I.7
  - soit à sa surface (en peau), comme illustré figure I.8.

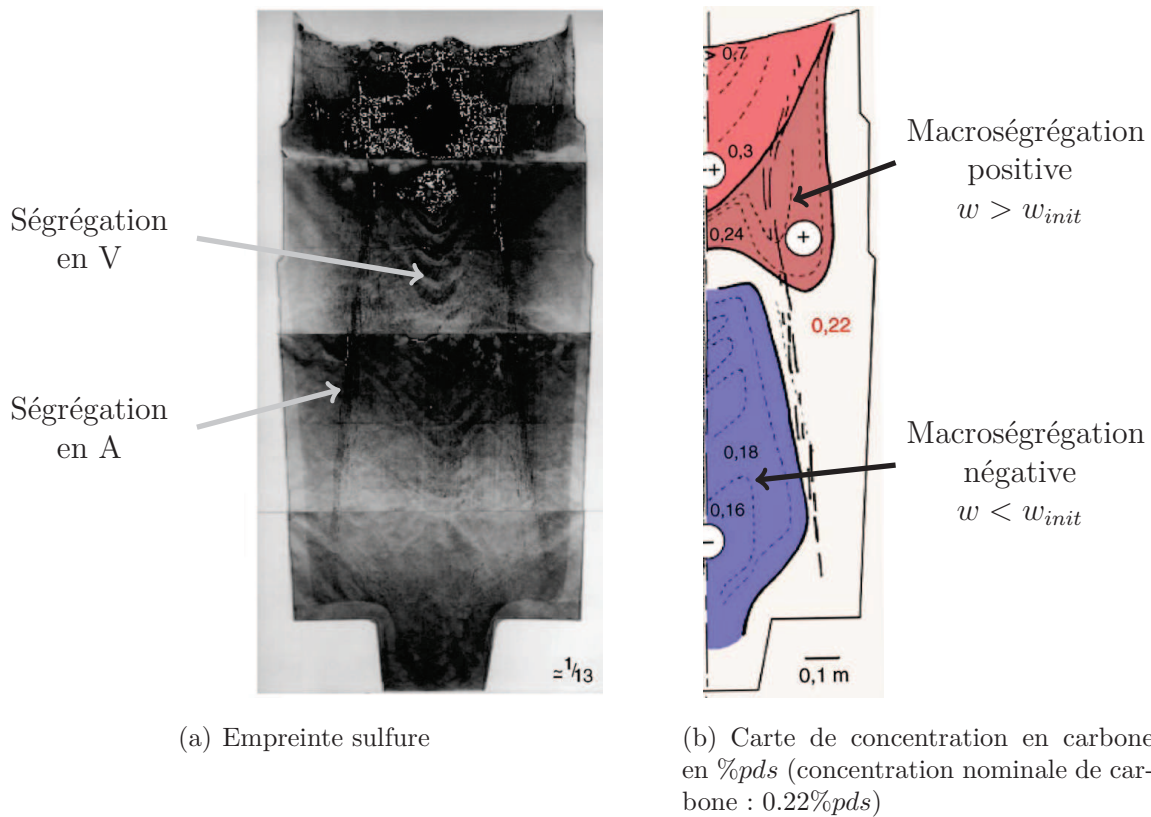
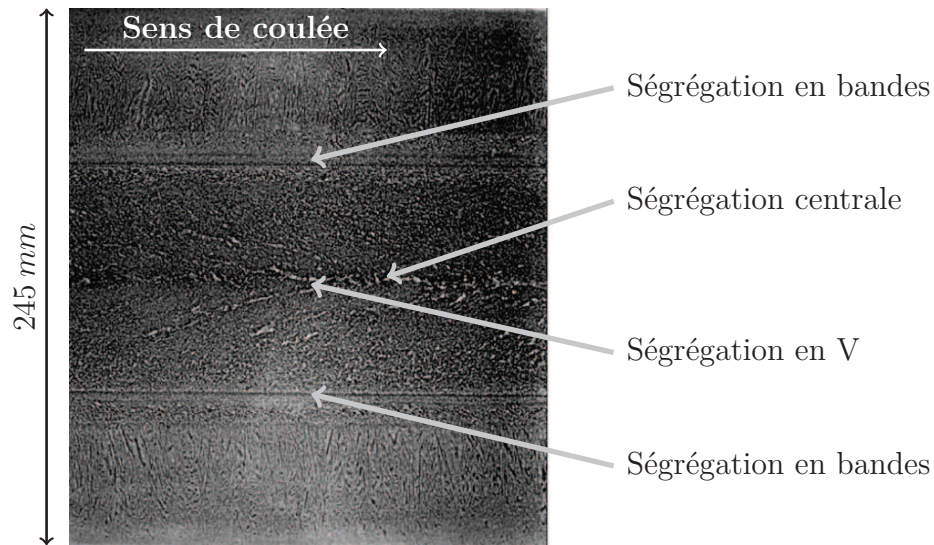
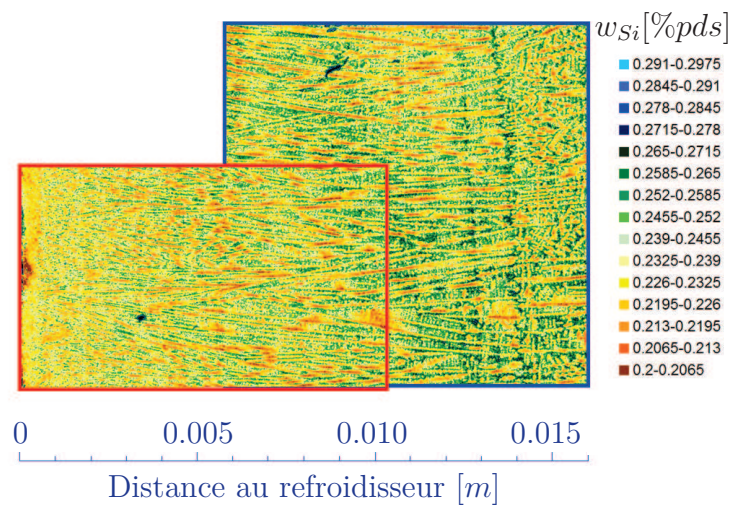


Fig. I.6: Coupe longitudinale d'un lingot de 65 tonnes [Les05]



**Fig. I.7:** Coupe longitudinale d'une brame de coulée continue [Les05]



**Fig. I.8:** Distribution spatiale de Si dans un acier solidifié au contact d'un refroidisseur en cuivre (analyse microsonde, concentration nominale de Si : 0.208%*pds*). La surface de contact est à gauche de l'image. Les variations de couleur représentent la variation de concentration du Si. [Nia04]

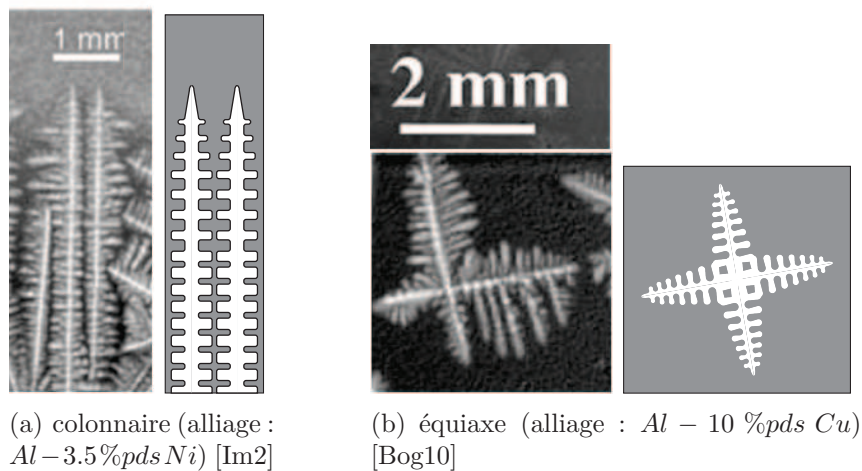
La macroségrégation, comme les autres défauts observés sur les demi-produits de coulée, prend naissance au cours de la solidification d'alliages métalliques. Pour comprendre les mécanismes à l'origine de la macroségrégation, il est essentiel d'étudier les phénomènes qui ont lieu lors de cette étape. Ceci est l'objet de la prochaine section.

## I.2 Phénomènes associés à la solidification des métaux

Dans ce paragraphe, seuls quelques-uns des phénomènes se produisant lors de la solidification sont donnés. Plus d'informations sont disponibles dans [Les86], [Les89], [Kur90] et [Dan09].

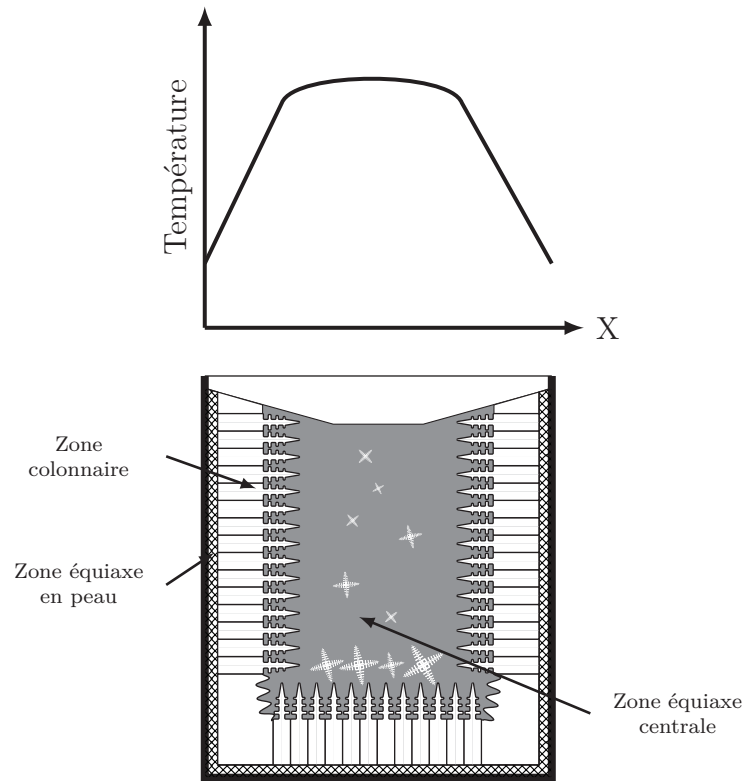
### I.2.1 Germination, croissance des structures et zone pâteuse

La solidification débute par l'apparition d'un germe solide dans le liquide. Ce germe solide peut se créer spontanément (germination homogène) ou, et c'est le cas dans la pratique, à partir d'une surface hétérogène, comme des impuretés présentes dans le liquide ou au contact avec un substrat (germination hétérogène). Une fois germée, la structure solide croît sous forme particulière : la dendrite. Elle peut être équiaxe ou colonnaire comme illustrée figure I.9.



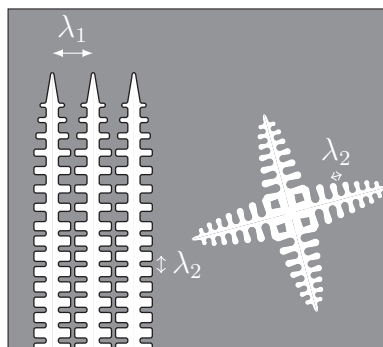
**Fig. I.9:** Types de dendrites et représentation schématique

L'évolution du germe solide en dendrite équiaxe ou colonnaire dépend du gradient thermique local. Pour la dendrite colonnaire, le gradient thermique avait localement une direction privilégiée alors que pour la dendrite équiaxe le gradient était négligeable. Les conditions de gradient faible se retrouvent au centre des pièces en cours de solidification alors que le gradient fort se trouve à proximité d'un moule, sa direction étant opposée à celle du flux de chaleur extrait. Cette situation est schématisée à la figure I.10 pour un lingot en cours de solidification. Une zone équiaxe de faible épaisseur est présente en paroi. Ceci vient du fait qu'un très grand nombre de cristaux se forment simultanément au contact de la paroi et entrent en compétition. Ensuite apparaît la zone colonnaire qui se propage jusqu'à rencontrer soit une zone de dendrites équiaxes soit une autre zone colonnaire. L'existence et la taille de la zone équiaxe centrale varient en fonction du refroidissement, c'est-à-dire du gradient thermique et de la surchauffe.



**Fig. I.10:** Représentation schématique d'une coupe longitudinale d'un lingot en cours de solidification et de son profil de température

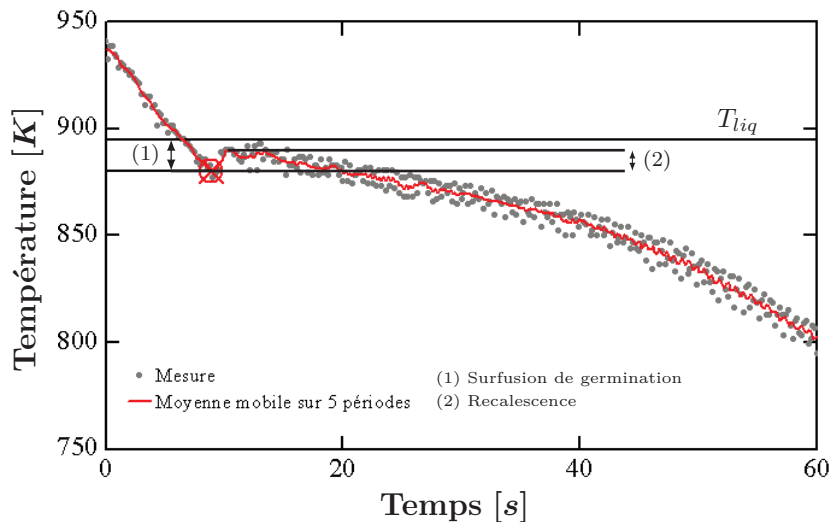
La croissance de ces structures au cours de la solidification engendre un réseau dendritique. Ce réseau est une zone où cohabitent des phases solide et liquide. Il est aussi appelé zone pâteuse. La taille de cette zone dépend du procédé et des conditions de refroidissement et peut atteindre plusieurs mètres de longueur, notamment en coulée continue. Le réseau dendritique est caractérisé par les espacements interdendritiques primaire  $\lambda_1$  et secondaire  $\lambda_2$ . Ces grandeurs sont représentées à la figure I.11.



**Fig. I.11:** Grandeurs caractéristiques du réseau dendritique : espacements interdendritiques primaire  $\lambda_1$  et secondaire  $\lambda_2$

La température à laquelle apparaît le premier solide peut être déterminée théoriquement à l'aide des diagrammes de phases en supposant l'équilibre thermodynamique. Un exemple de diagramme de phases pour les alliages plomb - étain est schématisé à la figure I.13. Le premier germe solide apparaît à la température du liquidus  $T_{liq}$ . Toutefois, ce premier germe solide n'est stable que s'il a atteint une taille minimale. Pour cela, la température doit encore diminuer. La température à laquelle commence la solidification est donc inférieure à  $T_{liq}$ . On appelle surfusion de germination cette différence de température  $\Delta T_{germ}$ .

Lorsque les premiers germes solides se forment, la chaleur latente de fusion est libérée. Cette énergie n'est pas instantanément évacuée par le refroidissement et provoque une remontée provisoire de la température, appelée recalescence, comme représentée à la figure I.12. La température ne diminue donc pas continuellement au cours de la solidification.



**Fig. I.12:** Surfusion et recalescence lors de la solidification d'un alliage  $Al - 14\%pds Cu$  [Mos08]

## I.2.2 Microségrégation

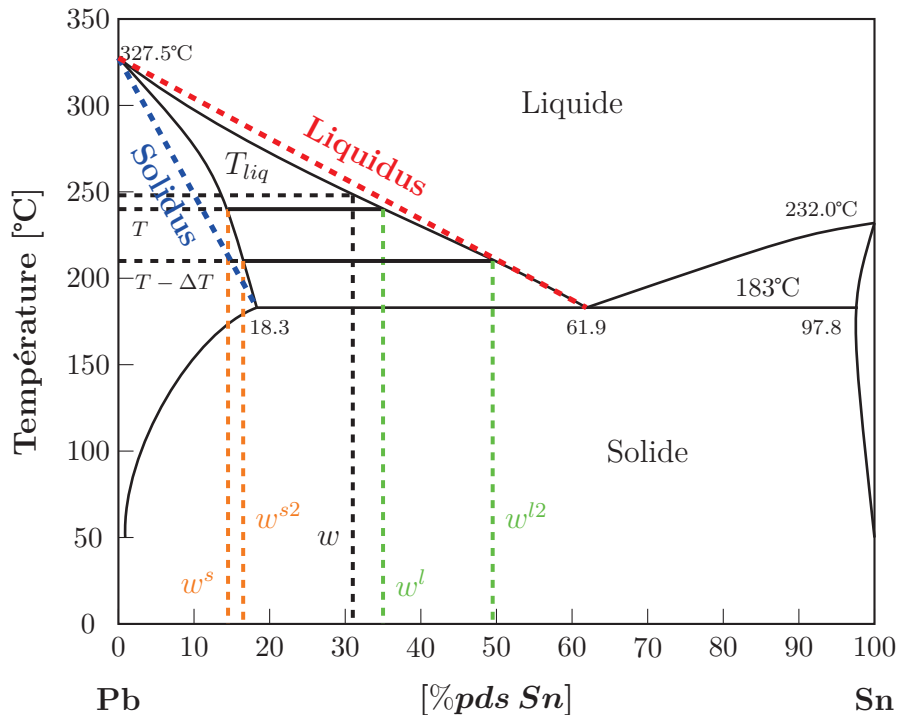
Après avoir décrit la formation de la macrostructure (ou structure de grains), le phénomène de microségrégation est maintenant abordé. La microségrégation est une distribution non uniforme des espèces chimiques à l'échelle de la microstructure de solidification. Cette échelle a pour longueur caractéristique le demi-espacement interdendritique secondaire  $\lambda_2/2$ . Typiquement cette distance  $\lambda_2/2$  varie de la dizaine à la centaine de microns.

Microségrégation et apparition du solide sont liées. En effet, la formation du solide entraîne une répartition inégale des éléments chimiques entre la phase solide formée et la phase liquide restante. À l'équilibre, comme montré sur le diagramme de phase plomb-étain à la figure I.13, pour une température  $T$  et une concentration massique  $w$  données, le solide formé a une composition  $w^s$  et le liquide  $w^l$ . Le rapport entre  $w^s$  et  $w^l$  est appelé

coefficient de partage et est noté  $k$  :

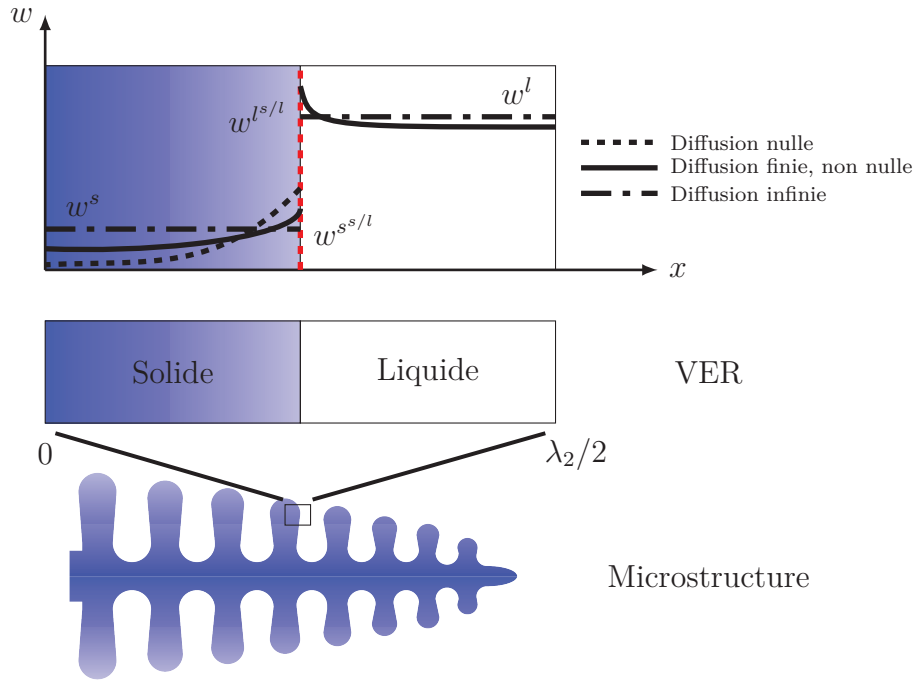
$$k = \left. \frac{w^s}{w^l} \right|_{T,p} \quad (\text{I.2.1})$$

Pour les métaux, généralement  $k < 1$ , c'est-à-dire  $w^l > w^s$ . Cette différence de solubilité est à l'origine de la microségrégation. Au cours du refroidissement, le solide qui se forme successivement a une composition qui augmente. Ceci s'identifie bien grâce aux diagrammes d'équilibre. Pour une composition  $w$ , le premier solide se forme à  $T_{liq}$  avec une composition  $w^s$ . Après une décroissance de la température de  $\Delta T$ , le solide qui se forme a une composition  $w^{s2}$  avec  $w^{s2} > w^s$ . Il en est de même pour le liquide. Des gradients solutaux s'établissent ainsi au niveau des dendrites et contribuent à la microségrégation. Le profil de la concentration dans le solide et le liquide au niveau microscopique sont représentés schématiquement à la figure I.14. L'égalité  $w^s = kw^l$  n'est valable qu'à l'interface solide-liquide où l'hypothèse d'équilibre thermodynamique est acceptable. La relation précédente s'écrit donc rigoureusement :  $w^{s^s/l} = kw^{l^s/l}$ .



**Fig. I.13:** Représentation schématique du diagramme de phase pour les mélanges binaires plomb-étain





**Fig. I.14:** Profil de composition à l'échelle microscopique

Le profil de concentration dans les phases solide et liquide est décrit par le modèle de microségrégation. Le modèle de microségrégation est obtenu en effectuant un bilan énergétique et des espèces chimiques dans le solide et le liquide sur un volume élémentaire représentatif (VER) dont la taille caractéristique est le demi-espacement interdendritique secondaire  $\lambda_2/2$  comme illustré figure I.14. Ces bilans de conservation, une fois adimensionnalisés, font apparaître le nombre de Fourier [Dan09]. Le nombre adimensionnel de Fourier est le rapport entre le temps de solidification et le temps de diffusion associé à la longueur du VER  $l_{VER}$ . Il est défini, comme suit, pour la diffusion thermique  $Fo_T$  et solutale pour le solide  $Fo_{ws}$  et le liquide  $Fo_{wl}$  :

$$Fo_T = \frac{a t_s}{l_{VER}^2}; \quad Fo_{ws} = \frac{D^s t_s}{l_{VER}^2}; \quad Fo_{wl} = \frac{D^l t_s}{l_{VER}^2}$$

avec  $a$  le coefficient de diffusivité thermique,  $t_s$  le temps de solidification et  $l_{VER}$  la longueur caractéristique du VER, ici prise comme le demi-espacement interdendritique secondaire  $\lambda_2/2$ .

En solidification,  $Fo_T \gg 1$  et  $Fo_{wl} \gg 1$ . La température et la concentration dans le liquide sont alors uniformes dans le VER. L'hypothèse de l'équilibre thermodynamique à l'interface permet de relier ces grandeurs à l'aide du diagramme de phase. Dans notre cas, le diagramme de phase est linéarisé : les lignes de solidus et du liquidus sont approximées par des droites. Par conséquent  $T$  et  $w^l$  sont liées par l'égalité suivante :

$$T = T_f + m_{liq} w^l$$

où  $m_{liq}$  est la pente du liquidus.

Plusieurs modèles de microségrégation pourront être alors établis pour la diffusion des espèces chimiques dans le solide :

1. Diffusion infinie  $Fo_{ws} \gg 1$

Il s'agit du modèle de la loi des leviers. On montre que dans ce cas, la fraction solide s'exprime directement à partir de la température (sous réserve de considérer le VER comme "fermé", c'est-à-dire à concentration moyenne constante) :

$$f^s = \frac{w^l - w_{VER}}{(1-k)w^l} = \frac{T - T_{liq}}{T - T_f} \frac{1}{1-k} \quad (\text{I.2.2})$$

avec  $f^s$  la fraction massique de solide et  $w_{VER}$  la concentration initiale du VER.

Dans ce cas  $w^s = w^{s/l} = kw^{l/s/l} = kw^l$ . C'est le modèle le plus simple à utiliser mais il n'est en général pas représentatif de la migration des espèces chimiques à l'échelle microscopique. En effet les éléments chimiques ne diffusent pas instantanément dans le solide.

2. Diffusion nulle dans le solide  $Fo_{ws} = 0 (\ll 1)$

Ce modèle est dit de Gulliver-Scheil. Dans ce cas, toujours sous l'hypothèse de système fermé, il est possible d'établir une autre relation entre  $f_s$  et  $T$  :

$$f^s = 1 - \left( \frac{w^l}{w_{VER}} \right)^{\frac{1}{k-1}} = 1 - \left( \frac{T - T_f}{T - T_{liq}} \right)^{\frac{1}{k-1}} \quad (\text{I.2.3})$$

On a, dans cette configuration,  $w^s \neq w^{s/l} = kw^{l/s/l} = kw^l$ . Le modèle de Gulliver-Scheil est une approximation acceptable car la diffusion dans le solide pour la plupart des éléments d'alliage est relativement faible et peut en général être considérée comme négligeable (sauf pour le carbone et l'azote dans le fer par exemple). Toutefois, ce modèle a tendance à surestimer la ségrégation. En effet, pour que la fraction solide atteigne 1, la concentration doit devenir infinie.

3. Diffusion finie (non nulle) dans le solide

Plusieurs modèles existent pour traiter ce cas intermédiaire par rapport aux deux cas limites précédents. Des adaptations ont été apportées au modèle de Gulliver-Scheil pour considérer une diffusion finie dans le solide par Brody-Flemings ou Clyne-Kurz. Une description de ces modèles est fournie dans [Dan09].

Tous ces modèles analytiques (loi des leviers, de Gulliver-Scheil et ses dérivés) ont l'inconvénient d'être des modèles unidimensionnels. Ceci s'avère très limitant pour prendre en compte des géométries dendritiques et certains phénomènes nécessitant de connaître la concentration du liquide extérieur à la zone pâteuse comme dans le cas du retrait à la solidification. Une approche plus générale a donc été adoptée pour lever ces difficultés. Il s'agit des modèles semi-analytiques de Wang-Beckermann [Wan93] [Wan96] qu'on ne détaillera pas ici.

Quelques-uns des phénomènes ayant lieu lors de la solidification ont été abordés ainsi que la microségrégation en système fermé. Lorsque que le système devient ouvert, des échanges de matière sont possibles aux frontières de celui-ci. D'autres phénomènes apparaissent alors, notamment la macroségrégation.



## I.3 Macroségrégation

### I.3.1 Une combinaison de phénomènes

La macroségrégation est une répartition non homogène des espèces chimiques dans un volume dont la dimension caractéristique varie entre le millimètre et le dixième de mètre (échelle macroscopique). Des exemples de macroségrégation dans des pièces de coulée ont été présentés aux figures I.6 et I.8.

La macroségrégation résulte de la combinaison de la microségrégation et des échanges de matière. La ségrégation à l'échelle microscopique engendre une différence de répartition des espèces chimiques entre solide et liquide. Cette différence se développe à l'échelle macroscopique suite aux échanges de matière provoqués par des mouvements relatifs d'une phase par rapport à l'autre. Quatre types de macroségrégation peuvent être distingués suivant les causes de ces mouvements relatifs, schématisés à la figure I.15 :

1. **la contraction thermique et le retrait de solidification** : Au cours de la solidification, contrairement à la masse, le volume de la pièce n'est pas conservé. En effet, la pièce occupe moins d'espace à l'état solide qu'à l'état liquide. Deux phénomènes expliquant cette variation sont à dissocier :

- (a) *la contraction thermique* : la masse volumique d'un acier, à l'état solide ou liquide, augmente lorsque la température diminue. Le métal se contracte au cours du refroidissement d'un facteur  $\beta_T$ . Pour les aciers,  $\beta_T \approx 10^{-5} K^{-1}$ , ce qui correspond à une variation de 0.1% de la masse volumique pour une variation de 100°C.
- (b) *le retrait à la solidification* : le passage de l'état liquide à l'état solide implique un arrangement de la matière. Cette organisation entraîne une variation de la masse volumique indépendamment de la contraction thermique. Cette variation est de l'ordre de 5% pour les aciers. Ce phénomène est prépondérant par rapport à la contraction thermique et cause une variation de volume significative.

Du fait du retrait à la solidification et de la contraction thermique, une porosité est susceptible de se former. Elle est compensée, tant que cela est possible, par un mouvement du liquide vers la zone pâteuse. (figure I.15(a)).

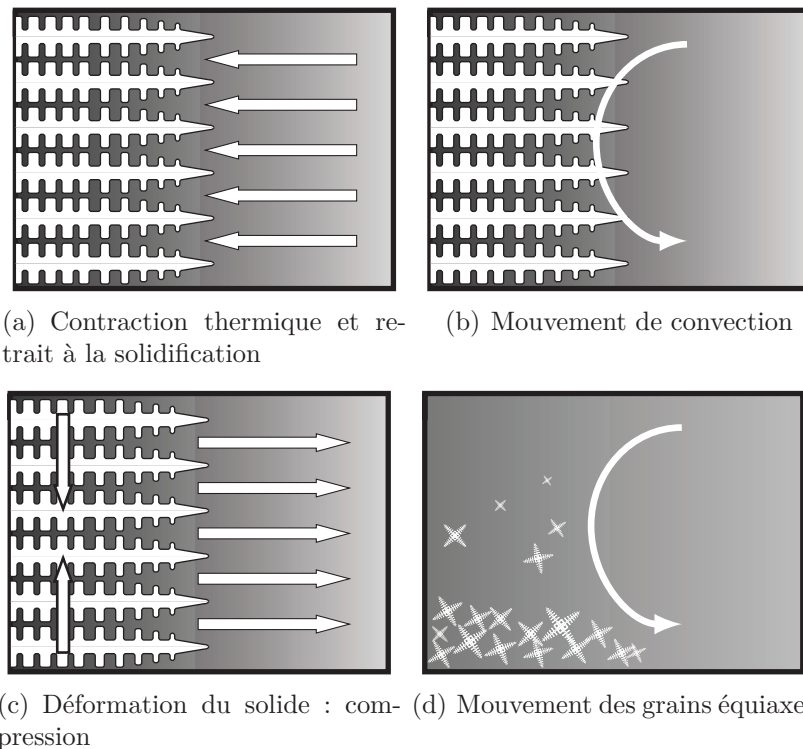
2. **les mouvements de convection** : Les mouvements de convection qui agitent la zone liquide et pâteuse sont de deux types qui se différencient par leurs origines :

- (a) *Convection naturelle* : la convection naturelle a pour origine un gradient de masse volumique au sein du liquide. La masse volumique du liquide varie avec la température et avec la concentration en espèces chimiques ( $\beta_w \approx 10^{-2} (\%pds)^{-1}$ ). Or elles ne sont pas uniformes au sein de la pièce en refroidissement. Une distribution spatiale non uniforme de la masse volumique s'établit, ce qui provoque les mouvements de convection. On parle de convection thermo-solutale.
- (b) *Convection forcée* : la convection forcée est la convection qu'on impose au liquide lors de la solidification des pièces. Elle peut venir du procédé en lui-même comme le jet d'acier liquide généralement distribué par une busette en

haut de la lingotière de coulée continue. Elle peut aussi être mise en place volontairement pour limiter l'apparition des défauts, comme le brassage électromagnétique en coulée continue d'acier.

Qu'elle soit forcée ou naturelle, la convection met en mouvement le liquide. Ainsi, les espèces chimiques, fortement ségréguées dans le liquide de la zone pâteuse du fait de la microségrégation, sont transportées (figure I.15(b)).

3. **la déformation de la zone pâteuse** : la zone pâteuse que l'on peut se représenter comme une sorte d'éponge, peut être mise en traction en ou compression par des forces extérieures lors de la solidification. Le liquide chargé en soluté peut ainsi être chassé ou attiré (figure I.15(c)).
4. **le mouvement des grains équiaxes** : les grains équiaxes qui peuvent se former au cœur de la pièce (paragraphe I.2.1) en début de solidification sont pauvres en éléments chimiques en général (paragraphe I.2.2). Ces grains sont emportés par des mouvements de liquide et viennent sédimenter à certains endroits de la pièce créant dans ces zones un appauvrissement en soluté (figure I.15(d)). C'est le cas du cône de sédimentation au pied du lingot de la figure I.6.



**Fig. I.15:** Origines des mouvements macroscopiques induisant les macroségrégations [Dan09]

Un facteur supplémentaire agissant sur les macroségrégations est la diffusion chimique. Il s'agit de la migration des espèces chimiques sous l'effet de gradients solutaux. Toutefois, il s'agit d'un facteur mineur comparé aux quatre causes évoquées plus haut. En effet, la

diffusivité dans le liquide est de l'ordre de  $10^{-9} m^2 s^{-1}$  (ce qui équivaut à parcourir 1 m en environ 32000 ans) alors que les vitesses peuvent atteindre  $1 m.s^{-1}$  dans les autres cas.

L'ensemble des causes évoquées précédemment et agissant sur la macroségrégation a été résumé dans le "taux de macroségrégation" de Lesoult [Les03], pour un VER  $\Omega$  tel que  $\Omega^s$  et  $\Omega^l$  forment une partition de  $\Omega$  et  $\partial\Omega_{ext}^l$ ,  $\partial\Omega_{ext}^s$  et  $\partial\Omega^{s/l}$  forment une partition de la frontière de  $\Omega$  :

$$\frac{d\langle w \rangle}{dt} = \frac{w^l - \langle w \rangle}{m} \left[ \underbrace{\rho^l \left( \underbrace{V^s \frac{1}{\rho^s} \frac{d\rho^s}{dt}}_{\text{terme A1}} + \underbrace{V^l \frac{1}{\rho^l} \frac{\partial\rho^l}{\partial t}}_{\text{terme A2}} \right) + \frac{\rho^s - \rho^l}{\rho^s} \frac{dm^s}{dt}}_{\text{terme A}} + \underbrace{\rho^l \frac{dV}{dt}}_{\text{terme A4}} \right] - \underbrace{\frac{1}{m} \rho^l V^l \mathbf{v}^{l-s} \cdot \nabla w^l}_{\text{terme B}} + \underbrace{\frac{1}{m} \int_{\partial\Omega_{ext}^s} \mathbf{j}^s \mathbf{n}^s dS + \frac{1}{m} \int_{\partial\Omega_{ext}^l} \mathbf{j}^l \mathbf{n}^l dS}_{\text{terme C}} \quad (\text{I.3.1})$$

où  $\langle w \rangle$  désigne la concentration moyenne d'un élément d'alliage, les exposants  $s$  et  $l$  la phase solide et liquide respectivement,  $\rho$  la masse volumique,  $m$  et  $V$  la masse et le volume du domaine,  $\mathbf{v}^{l-s}$  la vitesse relative du liquide par rapport au solide,  $\mathbf{j}$  le flux de diffusion chimique,  $\mathbf{n}^\alpha$  la normale extérieure à la phase  $\alpha$ .  $\partial\Omega_{ext}^s$  représente la frontière entre le solide et l'extérieur,  $\partial\Omega_{ext}^l$  la frontière entre le liquide et l'extérieur.

Le "taux de macroségrégation" correspond au terme de gauche de l'équation I.3.1. Il représente la variation temporelle de la concentration moyenne du soluté dans un élément de matière qui se déforme. On s'intéresse à la concentration moyenne car c'est sa valeur qui caractérise la macroségrégation. Son évolution dépend de :

- A. la variation du volume total du domaine due à :
  - A1 la variation de la masse volumique du solide (contraction thermique)
  - A2 la variation de la masse volumique du liquide (contraction thermique)
  - A3 le retrait de solidification proportionnel au progrès de la solidification
  - A4 la variation de volume associée à des forces extérieures
- B. l'écoulement du liquide dans la zone pâteuse, qui est induit par exemple par la convection ou mouvement des grains équiaxes
- C. la diffusion chimique

Les phénomènes engendrant les mouvements relatifs sont donc variés. Pour comprendre la manière dont ces phénomènes agissent sur la macroségrégation, on s'intéresse à deux cas particuliers. Le premier concerne les effets de la convection et du retrait à la solidification en l'absence de déformations extérieures. Le second cas particulier est l'étude de l'influence de la déformation du solide. La diffusion chimique n'est pas étudiée car elle est de faible importance dans la macroségrégation. La contraction thermique n'est également pas évoquée car elle agit de la même manière que le retrait à la solidification mais à un degré bien moindre. Les deux cas particuliers font l'objet des deux paragraphes suivants.

### I.3.2 Effet des mouvements de convection et du retrait à la solidification

Pour étudier les effets des mouvements de convection et du retrait à la solidification sur la macroségrégation, il est nécessaire d'en comprendre les effets sur la microségrégation. En 1967, Flemings [Fle67] établit une expression permettant l'étude de ces effets sur la microségrégation. Pour cela, il réalise un bilan de masse des espèces chimiques sur un volume de matière ouvert, c'est-à-dire en prenant en compte les échanges de soluté avec l'extérieur par des mouvements de convection et de retrait à la solidification. L'expression de Flemings a été généralisée par le "taux de microségrégation" de [Les03] qui prend aussi en compte les échanges par déformation de solide. Dans le cas où il n'y a pas de déformation du solide, le taux de microségrégation se réduit à l'expression de Flemings :

$$\frac{dw^l}{dg^s} = (1 - k) \frac{w^l}{1 - g^s} \frac{\rho^s / \rho^l}{1 - \frac{v_T^{l-s}}{v_T}} \quad (\text{I.3.2})$$

avec  $v_T^{l-s}$  la composante parallèle au gradient thermique de la vitesse relative du liquide par rapport au solide et  $v_T$  la composante parallèle au gradient thermique de la vitesse de l'isotherme  $T$  dans le repère du solide.

Le terme de gauche représente l'évolution de la concentration dans le liquide par rapport à la variation de fraction solide  $g^s$ , c'est-à-dire par rapport à la progression de la solidification. Cette évolution dépend de la valeur prise par  $v_T^{l-s}$ . Il existe deux valeurs particulières pour  $v_T^{l-s}$  :

1. si  $v_T^{l-s} = v_T$  : la vitesse du liquide est égale celle des isothermes, la microségrégation devient infinie.
2. si  $v_T^{l-s} = v_n = -v_T \frac{\rho^s - \rho^l}{\rho^l}$ , alors l'équation I.3.2 devient :

$$\frac{dw^l}{dg^s} = (1 - k) \frac{w^l}{1 - g^s} \quad (\text{I.3.3})$$

Il s'agit de l'équation d'un bilan de soluté sur un volume fermé (pas d'échange avec l'extérieur) dans l'approximation d'une diffusion nulle dans le solide (modèle de Gulliver-Scheil) [Kur90]. Cette condition  $v_T^{l-s} = v_n$  est réalisée si la seule cause des mouvements est le retrait à la solidification. Dans ce cas, la microségrégation est dite "normale". Sans échange avec l'extérieur, la concentration moyenne de cet élément reste constante et donc aucune macroségrégation ne survient.

Ces valeurs particulières délimitent trois zones représentées à la figure I.16.

- I Si  $v_T^{l-s}$  est inférieure en valeur algébrique à  $v_n$ , la microségrégation est moins accentuée que la "normale".
- II Si  $v_T^{l-s}$  est supérieure à  $v_n$  mais inférieure à  $v_T$  en valeur algébrique, la microségrégation est plus accentuée que la "normale".
- III Si  $v_T^{l-s}$  est supérieure en valeur algébrique à  $v_T$ , une situation paradoxale apparaît. En effet,  $\frac{dw^l}{dg^s} < 0$  (microségrégation négative), c'est-à-dire que le liquide s'appauvrit

en soluté lorsque la solidification progresse bien que le coefficient de partage soit inférieur à 1. Autrement dit, le solide refond.

L'équation I.3.2 permet donc de connaître l'influence de la convection et du retrait sur la microségrégation. En intégrant cette équation sous des hypothèses très restrictives (vitesse de progression du liquide et des isothermes constantes du début à la fin de la solidification dans l'élément de volume considéré [Les89]), on peut traduire cela en termes de composition moyenne et donc mesurer l'impact de la convection et du retrait sur la macroségrégation. La figure I.17 illustre schématiquement l'effet des mouvements de convection et du retrait à la solidification sur la macroségrégation pour un alliage Fe-1%pdsC. On retrouve les mêmes zones que pour la microségrégation :

- I la microségrégation étant moins accentuée que la "normale", la macroségrégation est négative.
- II la microségrégation étant plus accentuée que la "normale", la macroségrégation est positive.
- III la microségrégation est négative, le solide refond.

### I.3.3 Effet de la déformation de la zone pâteuse

L'effet individuel d'une déformation du réseau dendritique sur la macroségrégation peut s'étudier directement avec l'équation I.3.1 pour laquelle seul le terme A4 est conservé [Les89] :

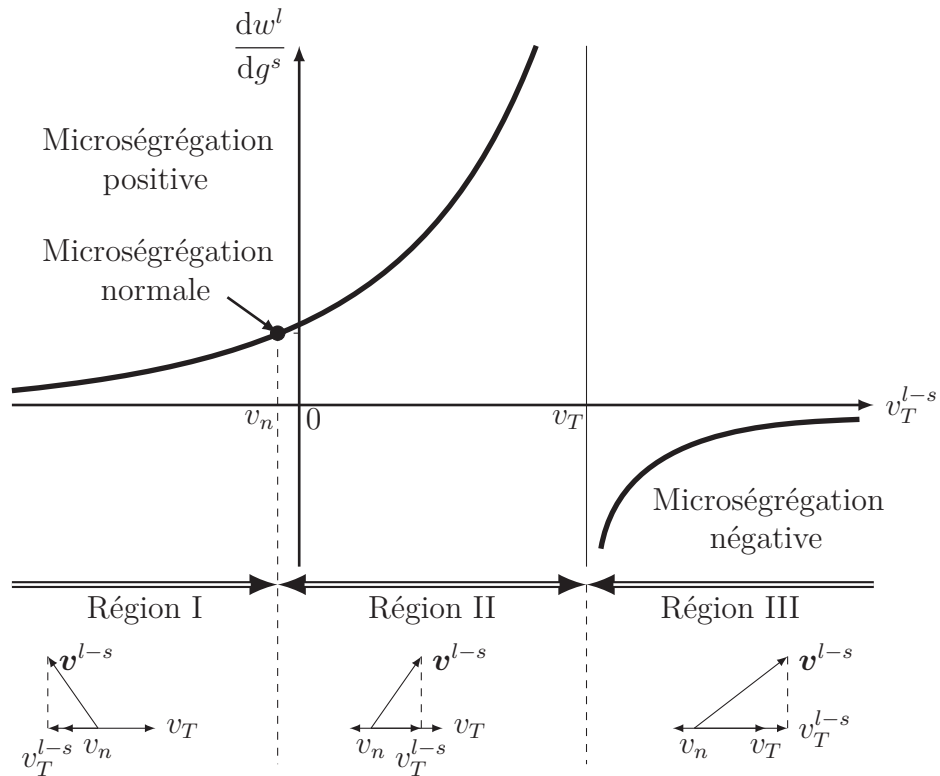
$$\frac{d\langle w \rangle}{dt} = \frac{w^l - \langle w \rangle}{m} \rho^l \frac{dV}{dt} \approx g^s w^l (1 - k) \frac{\rho^l}{m} \frac{dV}{dt} \quad (\text{I.3.4})$$

Cette équation montre bien que la ségrégation ainsi induite est proportionnelle à la variation de volume et de même signe. La zone pâteuse peut se représenter comme une éponge. Lorsqu'elle est comprimée (variation négative du volume), le liquide ségrégué est chassé et résulte alors une macroségrégation négative. A l'inverse, si elle se dilate, une macroségrégation positive est obtenue par un appel de liquide plus riche en soluté. On remarque que la macroségrégation varie également avec la fraction solide  $g^s$ . Des macroségrégations plus sévères sont donc engendrées si on déforme le métal en fin de solidification.

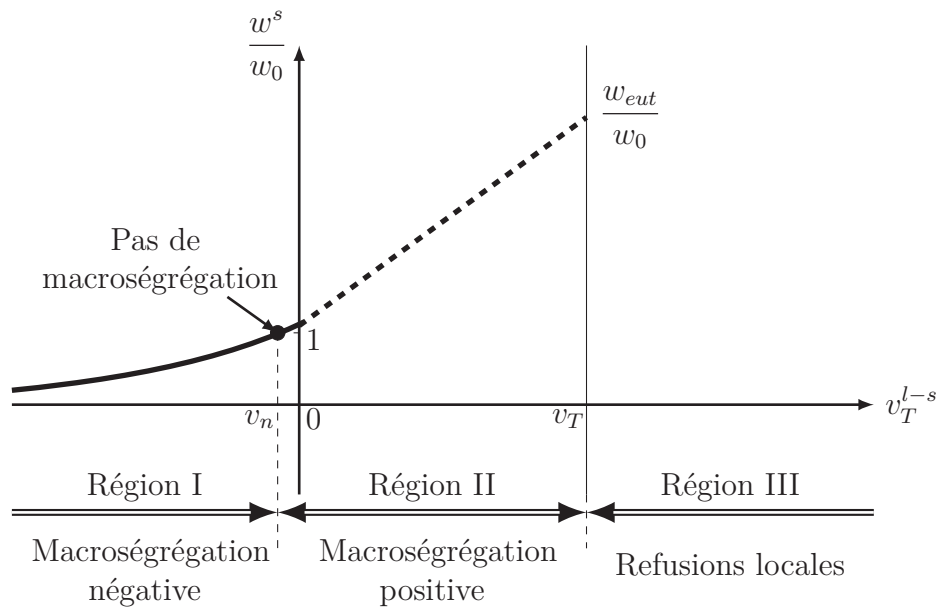
## I.4 Objectif, raison, cadre et plan de l'étude

### Raisons et objectif

L'objectif de cette thèse est la simulation numérique 3D des macroségrégations en peau. Ces macroségrégations sont induites par la convection thermo-solutale et des déformations dues à la contraction thermique et au retrait à la solidification. De ce fait, les mouvements de grains équiaxes ne sont pas pris en compte. Les macroségrégations en peau apparaissent lors des premiers instants de solidification, à la surface des produits coulés. Elles affectent la qualité de surface de ces produits. C'est pourquoi reproduire numériquement en 3D ces macroségrégations dans des conditions de coulée des produits aiderait à mieux comprendre leur répartition et éventuellement agir sur les paramètres du procédé pour les réduire et ainsi améliorer la qualité de surface.



**Fig. I.16:** Illustration schématique de l'effet de la circulation de liquide dans la zone pâteuse sur la microségrégation [Les89]



**Fig. I.17:** Illustration schématique de l'effet de la circulation de liquide sur la macroségrégation après solidification complète pour un alliage binaire Fe-1%*pdsC* [Les89]

## Cadre

Ce travail de thèse a été réalisé au sein du Centre de mise en forme des matériaux (CEMEF) à Sophia Antipolis dans le cadre d'un projet de l'Agence Spatiale Européenne (ESA). Ce projet, dénommé *Chill Cooling for the ElectroMagnetic Levitator in relation with Continuous Casting of Steel* (CCEMLCC), a rassemblé plusieurs partenaires, à la fois académiques et industriels :

- partenaires industriels :
  - ArcelorMittal, Maizières-lès-Metz (France)
  - SKF GmbH, Schweinfurt (Allemagne)
- partenaires académiques :
  - Institut Jean Lamour, INPL, Nancy (France)
  - German Aerospace Center, Institute of Material Physics in Space, Köln (Allemagne)
  - Risoe National Laboratory, Roskilde (Danemark)
  - Centre de mise en forme des matériaux, Mines ParisTech, UMR CNRS 7635, Sophia Antipolis (France)

Le projet a commencé début 2007 et a pris fin en décembre 2009. Il avait pour but d'étudier la solidification en considérant les aspects de déformations du solide et de la zone pâteuse qui peuvent se produire lors des premiers instants de solidification. Cette étude devait permettre une meilleure compréhension des macroségrégations induites par déformation, la réalité industrielle sous-jacente étant l'étude des macroségrégations lors de la formation de la peau des produits sidérurgiques en coulée continue d'acier. Le projet CCEMLCC est divisé en deux parties : une partie expérimentale et une partie simulation numérique. La partie expérimentale vise à construire un dispositif de solidification engendrant des déformations en minimisant les forces extérieures. La partie numérique vise à reproduire numériquement les observations issues de la partie expérimentale. Cette dernière partie correspond à la thèse présentée ici. Au sein du laboratoire, elle fait suite à de précédents travaux sur la modélisation de la macroségrégation [Liu05] [Gou05].

## Plan de l'étude

L'objectif de notre étude est donc de simuler numériquement les macroségrégations induites par déformations thermomécaniques lors de la formation de la peau des produits sidérurgiques. Pour atteindre cet objectif, plusieurs étapes préalables sont nécessaires. Il faut tout d'abord traduire la réalité physique en un système d'équations à résoudre. La modélisation adoptée est détaillée au chapitre II. Le chapitre III est consacré à la stratégie de résolution et à la présentation des méthodes numériques utilisées pour résoudre ces équations ainsi que leurs applications sur des cas simples. Ces cas simples permettent de s'assurer de la bonne résolution des équations car des solutions de références sont connues. La simulation des macroségrégations en peau à solide déformable est un cas complexe. Elle a été construite progressivement. Chacune des phases vise à reproduire numériquement des expériences dont les résultats peuvent être comparés entre eux. Ces expériences sont décrites au chapitre IV, les simulations correspondantes et la comparaison des résultats

seront abordées au chapitre V. Un cas de solidification d'un alliage ternaire est également donné au chapitre V.





# **Modélisation des macroségrégations**

La macroségrégation a été décrite au chapitre précédent. Elle résulte principalement d'une ségrégation à l'échelle microscopique et de mouvements des phases solide et liquide qui redistribuent les espèces chimiques dans toute la pièce. Pour traduire ce phénomène en équations, il est nécessaire de formuler des hypothèses tant pour modéliser la macroségrégation que les mouvements des phases. Ce chapitre est consacré aux différentes étapes de modélisation pour aboutir aux équations qui nous serviront à la simulation.



## Sommaire

---

II.1	Problématique . . . . .	<b>35</b>
II.2	Equations de conservation à résoudre . . . . .	<b>35</b>
II.2.1	Volume Elémentaire Représentatif . . . . .	36
II.2.2	Méthode de la prise de moyenne volumique . . . . .	36
II.2.3	Hypothèses et équations finales . . . . .	39
II.3	Modèle de microségrégation . . . . .	<b>41</b>

---



## II.1 Problématique

La macroségrégation est le produit de phénomènes ayant des longueurs caractéristiques très différentes : la ségrégation à l'échelle des dendrites (quelques centaines de microns) et les mouvements macroscopiques (de l'ordre du mètre). A l'échelle microscopique, on suppose que l'évolution thermomécanique du matériau métallique est gouvernée, à l'intérieur de chacune des phases, par les équations de conservation de la quantité de mouvement, de la masse, de l'énergie et de soluté récapitulées dans le tableau II.1). Les variables  $\rho$ ,  $h$ ,  $\sigma$ ,  $w$ ,  $\mathbf{v}$ ,  $\mathbf{q}$  et  $\mathbf{j}$  représentent respectivement la masse volumique, l'enthalpie massique, le tenseur des contraintes de Cauchy, la concentration massique, la vitesse, le flux de chaleur et le flux de soluté. Il y a autant d'équations de soluté à résoudre qu'il y a d'éléments d'alliages. L'élément d'alliage  $i$  est repéré par l'indice  $i$  dans l'équation du soluté. On se limitera ici aux cas des alliages binaires et ternaires ( $i = 1, 2$ ) et on se placera dans le cas où tous les termes de source volumique (masse, énergie, soluté, quantité de mouvement), dont par exemple le terme de puissance de déformation plastique dans l'équation de la conservation de l'énergie, sont absents [Ni91] [Gan90] [Rap03].

**Tab. II.1:** Equations microscopiques dans chacune des phases

Quantité de mouvement	$\frac{\partial(\rho\mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{v} \times \mathbf{v}) - \nabla \cdot \sigma - \rho\mathbf{g} = 0$
Masse	$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}) = 0$
Energie	$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho h\mathbf{v}) + \nabla \cdot \mathbf{q} = 0$
Soluté	$\frac{\partial(\rho w_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho w_i\mathbf{v}) + \nabla \cdot \mathbf{j}_i = 0$

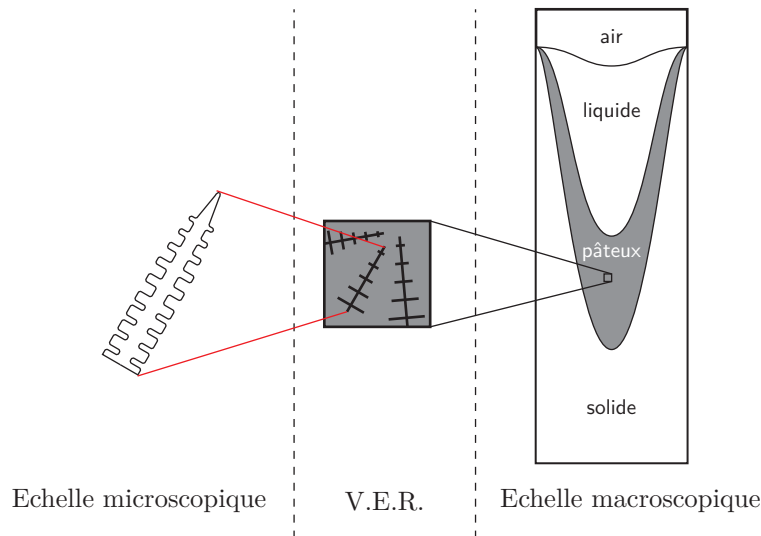
Simuler les macroségrégations sur une pièce industrielle en résolvant ces équations à l'échelle microscopique nécessite de prendre en compte la microstructure dendritique. Celle-ci étant complexe, il n'est pas réaliste, compte tenu des moyens informatiques actuels, de résoudre ces équations à l'échelle microscopique. De ce fait, on résout des équations macroscopiques obtenues en moyennant les équations pour chacune des phases et en formulant des hypothèses. Les étapes pour obtenir ces équations macroscopiques sont détaillées ci-après.

## II.2 Equations de conservation à résoudre

Plusieurs étapes sont nécessaires pour obtenir les équations de conservation finales moyennées. Il faut tout d'abord définir un volume de matière sur lequel on procède à une prise de moyenne. Ce volume est appelé Volume Élémentaire Représentatif (VER). Ensuite, sur ce VER, les équations sont moyennées pour chacune des phases. Ces équations moyennées sont sommées sur le VER. Accompagnées d'hypothèses supplémentaires, elles permettront de modéliser les macroségrégations.

### II.2.1 Volume Élémentaire Représentatif

Comme son nom l'indique, le VER doit être représentatif du phénomène que l'on cherche à modéliser. Dans le cas des phénomènes liés à la solidification, il est constitué d'une phase solide et liquide. Ces dimensions doivent être supérieures à la dimension caractéristique de la microstructure  $d_\mu$  et inférieure à celle du domaine  $d_\Omega$ . Pour la solidification,  $d_\mu \in [10^{-6} m, 10^{-4} m]$  et  $d_\Omega \in [10^{-3} m, 10^{-1} m]$ . Le VER a donc une taille de l'ordre du millimètre. Il comporte ainsi quelques dendrites colonnaires comme schématisé à la figure II.1.



**Fig. II.1:** Représentation schématique du VER

On fait également deux hypothèses pour ce VER :

1. Bien que des porosités puissent se former en cours de solidification (figure I.4), l'étude des porosités n'entre pas dans le cadre de notre projet. C'est pour cette raison que l'on fait l'hypothèse d'un milieu saturé par les phases solide et liquide :  $g^l + g^s = 1$ , où  $g^l$  et  $g^s$  sont les fractions volumiques de liquide et de solide, respectivement.
2. On suppose que dans le VER, la température est uniforme. Ceci est justifié par le fait que les propriétés thermiques des deux phases ne sont pas trop différentes et que les résistances thermiques de contact entre phases sont faibles.

### II.2.2 Méthode de la prise de moyenne volumique

La méthode de prise de moyenne volumique [Ni91] consiste à définir une fonction de phase  $\xi^\alpha(M)$  :

$$\xi^\alpha(M) = \begin{cases} 1 & \text{si } M \in \alpha, \\ 0 & \text{si } M \notin \alpha \end{cases} \quad (\text{II.2.1})$$

où  $\alpha$  représente dans notre cas soit la phase solide soit la phase liquide ( $\alpha = s, l$ ) et  $M$  un point quelconque du VER.

A l'aide de cette fonction de phase, différents opérateurs de moyenne volumique et de fluctuation sont définis. Pour une grandeur physique  $\phi$  volumique quelconque :

- la moyenne volumique sur le VER de  $\phi$  pour la phase  $\alpha$  :

$$\langle \phi^\alpha \rangle = \frac{1}{V_{VER}} \int_{V_{VER}} \phi(M, t) \xi^\alpha(M) dV \quad (\text{II.2.2})$$

où  $V_{VER}$  représente le volume du VER. Pour  $\phi = 1$ , on obtient la définition de la fraction volumique de la phase  $\alpha$  :

$$\frac{V^\alpha}{V_{VER}} = g^\alpha \quad (\text{II.2.3})$$

- la moyenne volumique intrinsèque de  $\phi$  pour la phase  $\alpha$  :

$$\langle \phi^\alpha \rangle^\alpha = \frac{1}{V^\alpha} \int_{V_{VER}} \phi(M, t) \xi^\alpha(M) dV \quad (\text{II.2.4})$$

où  $V^\alpha$  représente le volume de la phase  $\alpha$ .

- la fluctuation de  $\phi$  par rapport à sa moyenne volumique intrinsèque  $\langle \phi^\alpha \rangle^\alpha$  :

$$\hat{\phi}^\alpha = (\phi - \langle \phi^\alpha \rangle^\alpha) \xi^\alpha \quad (\text{II.2.5})$$

De ces définitions, on déduit facilement que :

$$\langle \phi^\alpha \rangle = g^\alpha \langle \phi^\alpha \rangle^\alpha \quad (\text{II.2.6})$$

et que la moyenne volumique intrinsèque du produit de deux variables  $\phi$  et  $\psi$  est égale à la somme du produit des moyennes volumiques intrinsèques et d'un terme de fluctuation :

$$\langle (\phi\psi)^\alpha \rangle^\alpha = \langle \phi^\alpha \rangle^\alpha \langle \psi^\alpha \rangle^\alpha + \langle \hat{\phi}^\alpha \hat{\psi}^\alpha \rangle^\alpha \quad (\text{II.2.7})$$

Pour pouvoir appliquer la prise de moyenne volumique aux équations du tableau II.1, il reste à exprimer  $\left\langle \frac{\partial \phi^\alpha}{\partial t} \right\rangle$ ,  $\langle (\nabla \phi)^\alpha \rangle$  et  $\langle (\nabla \cdot \phi)^\alpha \rangle$  en fonction de  $\frac{\partial \langle \phi^\alpha \rangle}{\partial t}$ ,  $\nabla \langle \phi^\alpha \rangle$  et  $\nabla \cdot \langle \phi^\alpha \rangle$ , respectivement. On a [Rap03] :

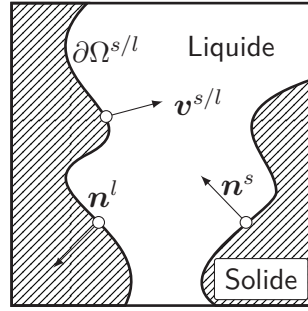
$$\left\langle \frac{\partial \phi^\alpha}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial \langle \phi^\alpha \rangle}{\partial t} - \frac{1}{V_{VER}} \int_{\partial \Omega^{\alpha/\beta}} \phi^\alpha \mathbf{v}^{\alpha/\beta} \cdot \mathbf{n}^\alpha dS \quad (\text{II.2.8})$$

$$\langle (\nabla \phi)^\alpha \rangle = \nabla \langle \phi^\alpha \rangle + \frac{1}{V_{VER}} \int_{\partial \Omega^{\alpha/\beta}} \phi^\alpha \mathbf{n}^\alpha dS \quad (\text{II.2.9})$$



$$\langle (\nabla \cdot \phi)^\alpha \rangle = \nabla \cdot \langle \phi^\alpha \rangle + \frac{1}{V_{VER}} \int_{\partial\Omega^{\alpha/\beta}} \phi^\alpha \cdot \mathbf{n}^\alpha dS \quad (\text{II.2.10})$$

où  $\mathbf{n}^\alpha$  représente la normale sortante à la phase  $\alpha$ .  $\partial\Omega^{\alpha/\beta}$  représente l'interface entre les phases  $\alpha$  et  $\beta$ ,  $\phi^\alpha$  est une quantité définie dans  $\alpha$  sur les interfaces  $\alpha/\beta$ . De même  $\mathbf{v}^{\alpha/\beta}$  définit la vitesse d'interface. Ces différentes variables sont représentées à la figure II.2 pour un VER composé des phases solide et liquide.



**Fig. II.2:** Représentation de la vitesse d'interface et des normales à l'interface solide-liquide lorsque  $\alpha = s$  et  $\beta = l$

On introduit ici la notation concernant la moyenne volumique globale sur le VER pour une quantité volumique  $\phi$  :

$$\langle \phi \rangle = \sum_{\alpha} g^{\alpha} \langle \phi^{\alpha} \rangle^{\alpha} \quad (\text{II.2.11})$$

A noter que si  $\phi$  est une quantité massique (définie par unité de masse), sa moyenne volumique globale sur le VER, elle-même définie par unité de masse, s'écrira :

$$\langle \phi \rangle_m = \sum_{\alpha} f^{\alpha} \langle \phi^{\alpha} \rangle_m^{\alpha} \quad (\text{II.2.12})$$

avec  $f^{\alpha}$  la fraction massique de la phase  $\alpha$  définie par  $f^{\alpha} = g^{\alpha} \rho^{\alpha} / \langle \rho \rangle$  et

$$\langle \phi^{\alpha} \rangle_m^{\alpha} = \frac{1}{V^{\alpha}} \int_{V^{\alpha}} (\rho \phi)(M, t) \xi^{\alpha}(M) dV \bigg/ \frac{1}{V^{\alpha}} \int_{V^{\alpha}} \rho(M, t) \xi^{\alpha}(M) dV \quad (\text{II.2.13})$$

$$= \langle (\rho \phi)^{\alpha} \rangle^{\alpha} / \langle \rho^{\alpha} \rangle^{\alpha} \quad (\text{II.2.14})$$

**Remarque sur la notation de la moyenne intrinsèque :** dans la suite du manuscrit, par souci de lisibilité, on écrira la moyenne volumique intrinsèque  $\phi^{\alpha}$  au lieu de  $\langle \phi^{\alpha} \rangle^{\alpha}$  ou de  $\langle \phi^{\alpha} \rangle_m^{\alpha}$ . Cette notation a une ambiguïté vis-à-vis de la fraction volumique de la phase  $\alpha$ . Celle-ci est notée  $g^{\alpha}$  alors qu'elle ne correspond pas à une moyenne intrinsèque.

**Remarque sur les termes de fluctuation :** Les termes de fluctuation entre la masse volumique  $\rho$  et une variable massique  $\phi$  sont généralement négligés :  $\langle \hat{\rho}^{\alpha} \hat{\phi}^{\alpha} \rangle^{\alpha} = 0$ . On a ainsi :

$$\langle (\rho \phi)^{\alpha} \rangle^{\alpha} = \langle \rho^{\alpha} \rangle^{\alpha} \langle \phi^{\alpha} \rangle^{\alpha} = \rho^{\alpha} \phi^{\alpha}$$

Appliquant cette méthode aux équations du tableau II.1, on obtient les équations macroscopiques récapitulées dans le tableau II.2 pour un alliage métallique. On pourra se référer à [Rap03] pour la démonstration de l'obtention de ces équations. Dans le processus de moyenne, des intégrales sur l'interface solide/liquide apparaissent (dues aux égalités II.2.8, II.2.9 et II.2.10) et génèrent des termes additionnels  $\mathbf{M}$ ,  $\Gamma$ ,  $Q$  et  $J$  qui traduisent respectivement les échanges à l'interface, de quantité de mouvement, de masse, d'énergie, et de soluté entre les deux phases. Les contributions de chacune des phases sont

**Tab. II.2:** Equations macroscopiques pour chacune des phases

Phase liquide	
Quantité de mouvement	$\frac{\partial (g^l \rho^l \mathbf{v}^l)}{\partial t} + \nabla \cdot (g^l \rho^l \mathbf{v}^l \times \mathbf{v}^l) - \nabla \cdot (g^l \boldsymbol{\sigma}^l) - g^l \rho^l \mathbf{g} = \mathbf{M}^{l^s/l}$
Masse	$\frac{\partial (g^l \rho^l)}{\partial t} + \nabla \cdot (g^l \rho^l \mathbf{v}^l) = \Gamma^{l^s/l}$
Energie	$\frac{\partial (g^l \rho^l h^l)}{\partial t} + \nabla \cdot (g^l \rho^l h^l \mathbf{v}^l) + \nabla \cdot \langle \mathbf{q}^l \rangle = Q^{l^s/l}$
Soluté	$\frac{\partial (g^l \rho^l w_i^l)}{\partial t} + \nabla \cdot (g^l \rho^l w_i^l \mathbf{v}^l) + \nabla \cdot \langle \mathbf{j}_i^l \rangle = J_i^{l^s/l}$
Phase solide	
Quantité de mouvement	$\frac{\partial (g^s \rho^s \mathbf{v}^s)}{\partial t} + \nabla \cdot (g^s \rho^s \mathbf{v}^s \times \mathbf{v}^s) - \nabla \cdot (g^s \boldsymbol{\sigma}^s) - g^s \rho^s \mathbf{g} = \mathbf{M}^{s^s/l}$
Masse	$\frac{\partial (g^s \rho^s)}{\partial t} + \nabla \cdot (g^s \rho^s \mathbf{v}^s) = \Gamma^{s^s/l}$
Energie	$\frac{\partial (g^s \rho^s h^s)}{\partial t} + \nabla \cdot (g^s \rho^s h^s \mathbf{v}^s) + \nabla \cdot \langle \mathbf{q}^s \rangle = Q^{s^s/l}$
Soluté	$\frac{\partial (g^s \rho^s w_i^s)}{\partial t} + \nabla \cdot (g^s \rho^s w_i^s \mathbf{v}^s) + \nabla \cdot \langle \mathbf{j}_i^s \rangle = J_i^{s^s/l}$

ensuite additionnées (les bilans aux interfaces s'annulent), excepté pour la conservation de la quantité de mouvement qui sera traitée séparément pour le solide et le liquide. Les équations obtenues sont reportées au tableau II.3.

### II.2.3 Hypothèses et équations finales

La méthode de la prise de moyenne volumique ayant été appliquée, il reste quelques opérations à effectuer et hypothèses à formuler pour arriver aux équations servant à la simulation des macroségrégations.

**Tab. II.3:** Equations macroscopiques moyennées

Phase liquide	
Quantité de mouvement	$\frac{\partial (g^l \rho^l \mathbf{v}^l)}{\partial t} + \nabla \cdot (g^l \rho^l \mathbf{v}^l \times \mathbf{v}^l) - \nabla \cdot (g^l \boldsymbol{\sigma}^l) - \mathbf{M}^{l^s/l} - g^l \rho^l \mathbf{g} = 0$
Phase solide	
Quantité de mouvement	$\frac{\partial (g^s \rho^s \mathbf{v}^s)}{\partial t} + \nabla \cdot (g^s \rho^s \mathbf{v}^s \times \mathbf{v}^s) - \nabla \cdot (g^s \boldsymbol{\sigma}^s) - \mathbf{M}^{s^s/l} - g^s \rho^s \mathbf{g} = 0$
Bilans	
Masse	$\frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \langle \rho \mathbf{v} \rangle = 0$
Energie	$\frac{\partial \langle \rho h \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \langle \rho h \mathbf{v} \rangle - \nabla \cdot \langle \mathbf{q} \rangle = 0$
Soluté	$\frac{\partial \langle \rho w_i \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \langle \rho w_i \mathbf{v} \rangle - \nabla \cdot \langle \mathbf{j}_i \rangle = 0$

**Termes  $\langle \boldsymbol{\sigma}^l \rangle$  et  $\langle \boldsymbol{\sigma}^s \rangle$** 

Les termes  $\langle \boldsymbol{\sigma}^l \rangle$  et  $\langle \boldsymbol{\sigma}^s \rangle$  représentent la contrainte moyenne dans le liquide et dans le solide respectivement. Le tenseur des contraintes  $\langle \boldsymbol{\sigma}^\alpha \rangle$  se décompose classiquement en une partie déviatoire et une partie sphérique :

$$\langle \boldsymbol{\sigma}^\alpha \rangle = \langle \mathfrak{s}^\alpha \rangle - \langle p^\alpha \rangle \mathbb{1} \text{ avec } \langle p^\alpha \rangle = -\frac{1}{3} \text{Tr} \langle \boldsymbol{\sigma}^\alpha \rangle$$

Les expressions de  $\langle \mathfrak{s}^l \rangle$  et  $\langle \mathfrak{s}^s \rangle$  seront explicitées au moment de la résolution des équations au chapitre IV.

**Termes  $\mathbf{M}^{s^s/l}$  et  $\mathbf{M}^{l^s/l}$** 

Les termes  $\mathbf{M}^{s^s/l}$  et  $\mathbf{M}^{l^s/l}$  se rapportent à l'échange de quantité de mouvement à l'interface. Pour simplifier l'écriture, les termes  $\mathbf{M}^{s^s/l}$  et  $\mathbf{M}^{l^s/l}$  s'écriront dans ce paragraphe  $\mathbf{M}^{s/l}$  et  $\mathbf{M}^{l/s}$ , respectivement. Ce terme d'échange de quantité de mouvement se décompose également en un terme déviatoire et un terme sphérique [Ni91] :

$$\begin{aligned} \mathbf{M}^{l/s} &= \mathbf{M}_d^{l/s} + \mathbf{M}_p^{l/s} \\ \mathbf{M}^{s/l} &= \mathbf{M}_d^{s/l} + \mathbf{M}_p^{s/l} \end{aligned}$$

On montre facilement que  $\mathbf{M}_d^{l/s} + \mathbf{M}_d^{s/l} = 0$  et  $\mathbf{M}_p^{l/s} + \mathbf{M}_p^{s/l} = 0$ . L'expression de  $\mathbf{M}_p^{s/l}$  et  $\mathbf{M}_p^{l/s}$  est donnée par [Ni91] :

$$\mathbf{M}_p^{s/l} = -\mathbf{M}_p^{l/s} = -p^l \nabla g^l = p^l \nabla g^s$$

De plus, en modélisant la zone pâteuse comme un milieu poreux, les termes d'échanges  $\mathbf{M}_d^{s/l}$  et  $\mathbf{M}_d^{l/s}$  sont de type Darcy [Ni91] et s'écrivent de la façon suivante :

$$\mathbf{M}_d^{s/l} = -\mathbf{M}_d^{l/s} = \mu^l g^{l^2} \mathbb{K}^{-1} (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) \quad (\text{II.2.15})$$

où  $\mathbb{K}$  est le tenseur de perméabilité et  $\mu^l$  est la viscosité dynamique du liquide.

Dans notre travail comme dans la littérature [Gou05], la perméabilité de la zone pâteuse est supposée isotrope et par conséquent  $\mathbb{K}$  se réduit à un scalaire noté  $K_{perm}$ . L'expression de  $K_{perm}$  couramment utilisée en macroségrégation est celle de Carman-Kozeny [Dan09] :

$$K_{perm} = \frac{\lambda_2^2 g^{l^3}}{180(1 - g^l)^2} \quad (\text{II.2.16})$$

où  $\lambda_2$  est l'espacement interdendritique secondaire.

### Terme $\mathbf{q}^\alpha$ et $\mathbf{j}^\alpha$

Le flux de chaleur  $\mathbf{q}^\alpha$  et le flux de soluté  $\mathbf{j}^\alpha$  de la phase  $\alpha$  sont classiquement modélisés par la loi de Fourier et la loi de Fick, respectivement :

- loi de Fourier :  $\mathbf{q}^\alpha = -\kappa^\alpha \nabla T$  avec  $\kappa^\alpha$  la conductivité thermique de la phase  $\alpha$ .
- loi de Fick :  $\mathbf{j}^\alpha = -D^\alpha \nabla (\rho^\alpha w^\alpha)$  avec  $D^\alpha$  le coefficient de diffusion chimique pour le soluté considéré dans la phase  $\alpha$ .

La diffusion chimique dans le solide à l'échelle macroscopique sera négligée par rapport à celle dans le liquide car  $D^s \ll D^l$ .

En appliquant ces hypothèses aux équations du tableau II.3, les équations finales de la macroségrégation sont obtenues et sont données au tableau II.4. L'équation de conservation du soluté est équivalente au taux de macroségrégation obtenu par [Les03] (section I.3.1, page 24). L'équivalence est démontrée à l'annexe A.

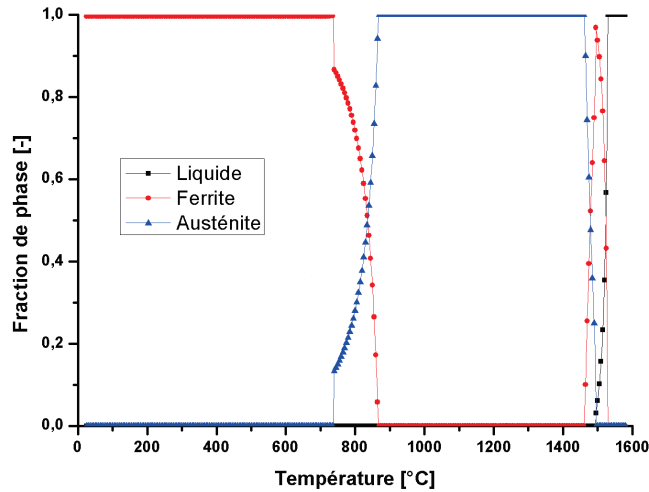
Les équations moyennées établies traduisent le bilan de l'énergie, de la quantité de mouvement, de la masse et des espèces chimiques à l'échelle macroscopique. Cependant il manque un élément dans la modélisation de la macroségrégation. En effet aucune des équations précédentes ne fait intervenir la microségrégation. Aux équations précédentes est alors adjoint un modèle de microségrégation.

## II.3 Modèle de microségrégation

Comme évoquée au chapitre précédent, la microségrégation peut se modéliser de plusieurs manières différentes. Divers modèles existent : loi des leviers, modèle de Gulliver-Scheil et ses dérivés, modèle de Wang-Beckermann... Pour cette étude, le modèle choisi est celui de la loi des leviers, c'est-à-dire une diffusion infinie des espèces chimiques dans le solide et dans le liquide à l'échelle microscopique. Un exemple de chemin de solidification calculé en loi des leviers par Thermocalc<sup>®</sup> est tracé à la figure II.3 pour un alliage binaire

**Tab. II.4:** Equations macroscopiques moyennées finales

Phase liquide	
Quantité de mouvement	$\frac{\partial (g^l \rho^l \mathbf{v}^l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho^l g^l \mathbf{v}^l \times \mathbf{v}^l) - \nabla \cdot (g^l \mathbf{s}^l)$ $+ g^l \nabla p^l + \frac{\mu^l}{K_{perm}} g^{l^2} (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) - g^l \rho^l \mathbf{g} = 0$
Phase solide	
Quantité de mouvement	$\frac{\partial (g^s \rho^s \mathbf{v}^s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho^s g^s \mathbf{v}^s \times \mathbf{v}^s) - \nabla \cdot (g^s \mathbf{s}^s) + \nabla (g^s p^s)$ $- p^l \nabla g^s - \frac{\mu^l}{K_{perm}} g^{l^2} (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) - g^s \rho^s \mathbf{g} = 0$
Bilans	
Masse	$\frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \langle \rho \mathbf{v} \rangle = 0$
Energie	$\frac{\partial \langle \rho h \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \langle \rho h \mathbf{v} \rangle - \nabla \cdot (\langle \kappa \rangle \nabla T) = 0$
Soluté	$\frac{\partial \langle \rho w_i \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \langle \rho w_i \mathbf{v} \rangle - \nabla \cdot (\langle D_i^l \rangle \nabla (\rho^l w_i^l)) = 0$

**Fig. II.3:** Exemple de chemin de solidification obtenu par Thermocalc<sup>®</sup> pour un alliage binaire Fe-0.105%PdS avec la loi des leviers (à l'équilibre thermodynamique)

Fe-0.105%*pdsC*. Ce calcul permet d'avoir l'évolution de la fraction massique  $f^l$  en fonction de la température mais aussi de celle d'autres phases comme la ferrite et l'austénite qui peuvent apparaître en cours de solidification.

### Conclusion partielle

La combinaison de la microségrégation et des mouvements macroscopiques conduit à l'établissement des macroségrégations. Pour prendre en compte à la fois les échelles microscopique et macroscopique, la méthode de la prise de moyenne volumique a été adoptée et, après quelques hypothèses, les équations-bilans macroscopiques moyennées ont été établies. A ces équations est adjoint un modèle de microségrégation décrivant la répartition des espèces chimiques à l'échelle microscopique dans un VER de composition et de température connues. Ces équations-bilans et le modèle de microségrégation constituent ensemble un modèle de solidification traitant la macroségrégation. La résolution de ce modèle se fera pas à pas. La stratégie adoptée ainsi que les méthodes numériques employées seront détaillées au chapitre suivant.



## III

# Stratégie suivie et méthodes numériques de résolution

Les équations du modèle traitant la macroségrégation ont été établies au chapitre précédent. Afin de résoudre ce modèle et d'aboutir à la simulation des macroségrégations en peau à solide déformable, plusieurs étapes intermédiaires sont nécessaires. La stratégie mise en place est présentée dans ce chapitre ainsi que les méthodes numériques employées pour résoudre les équations. Les méthodes utilisées sont détaillées pour chacune des équations du modèle.





## Sommaire

---

III.1	Stratégie de résolution . . . . .	<b>49</b>
III.1.1	Résolution individuelle des équations . . . . .	49
III.1.2	Résolution couplée des équations . . . . .	50
III.1.3	Stratégie de simulation et de validation . . . . .	50
III.1.4	Moyens utilisés . . . . .	51
III.2	Résolution de la mécanique des fluides . . . . .	<b>51</b>
III.2.1	Formulation forte . . . . .	51
III.2.2	Formulation faible . . . . .	53
III.2.3	Discrétisation . . . . .	55
III.2.4	Cas de validation . . . . .	56
III.3	Résolution de la conservation de l'énergie . . . . .	<b>60</b>
III.3.1	Formulation forte . . . . .	60
III.3.2	Formulation faible . . . . .	60
III.3.3	Discrétisation . . . . .	62
III.3.4	Cas de validation . . . . .	65
III.4	Résolution de la conservation des espèces chimiques . . . . .	<b>71</b>
III.4.1	Formulation forte . . . . .	71
III.4.2	Formulation faible . . . . .	72
III.4.3	Discrétisation . . . . .	73
III.4.4	Cas de validation . . . . .	73
III.5	Résolution de la mécanique du solide . . . . .	<b>73</b>
III.5.1	Loi de comportement des aciers . . . . .	74
III.5.2	Résolution thermomécanique . . . . .	76
III.5.3	Cas de validation . . . . .	79

---



## III.1 Stratégie de résolution

La démarche suivie s'articule autour de quatre points : la résolution individuelle des équations, la résolution couplée des équations, la stratégie de validation et les moyens utilisés.

### III.1.1 Résolution individuelle des équations

Les méthodes de résolution des équations s'appuient sur la méthode des éléments finis. Cette méthode, apparue au cours des années 1940, permet de passer des équations aux dérivées partielles à des équations discrétisées résolues numériquement. Seuls quelques aspects de la méthode sont présentés dans ce paragraphe. Une description détaillée se trouve dans [Ern02] et [Rap03].

La méthode des éléments finis repose sur une décomposition du domaine  $\Omega$  ( $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  avec  $d$  la dimension de l'espace) en éléments finis telle que :

$$\Omega = \bigcup_{e \in \mathcal{E}} \Omega_e$$

où  $\mathcal{E}$  représente l'ensemble des éléments de  $\Omega$  ( $\mathcal{E} \subset \mathbb{N}$ ) et  $\Omega_e$  l'espace de  $\Omega$  occupé par l'élément  $e$ .

Cette décomposition de  $\Omega$  définit un maillage de  $\Omega$ . Sur ce maillage, des nœuds sont définis. La résolution des équations consiste à déterminer la valeur des inconnues à chacun de ces nœuds. Pour cela, trois étapes sont nécessaires pour passer des équations aux dérivées partielles aux équations discrétisées. La première étape correspond à l'écriture de la formulation forte du problème, c'est-à-dire des équations à résoudre avec leurs conditions aux limites. La deuxième étape correspond à la formulation faible du problème, obtenue en multipliant les équations par des fonctions-test puis en intégrant sur le domaine  $\Omega$  de calcul. Enfin, la dernière étape consiste à approximer toute grandeur  $\phi$  par  $\phi_h$  définie de la manière suivante, pour tout point  $M \in \Omega$  :

$$\phi_h(M) = \sum_{i=1}^{noe} \varphi_i(M) \phi(N_i)$$

avec  $\varphi_i$  la fonction d'interpolation du nœud  $i$ ,  $N_i$  la position du nœud  $i$  et  $noe$  le nombre total de nœuds du maillage.

Dans notre cas, l'interpolation sera linéaire et les éléments finis seront de type  $\mathbb{P}_1$ , c'est-à-dire des triangles en dimension deux et des tétraèdres en dimension 3, comme représentés à la figure III.1. Les nœuds du maillage sont les sommets des éléments finis.

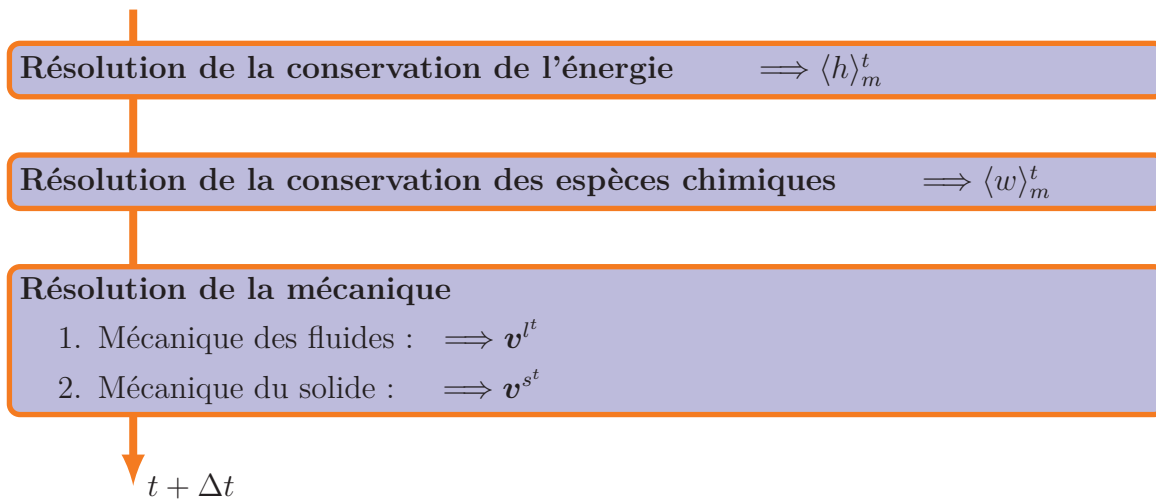


**Fig. III.1:** Éléments finis utilisés

### III.1.2 Résolution couplée des équations

Le modèle de macroségrégation implique de résoudre le couplage de la conservation de la quantité de mouvement, de la masse, de l'énergie et de la masse des espèces chimiques sur le domaine  $\Omega$ . En effet, la vitesse des phases influence le transport de l'énergie et des espèces chimiques. En retour, l'énergie et la masse des espèces chimiques agissent sur le champ de vitesse via la convection, la contraction thermique et chimique et le retrait à la solidification. De plus, énergie et espèces chimiques sont liées via le modèle de microségrégation. Le schéma de résolution adopté est donné à la figure III.2. Pour chaque incrément de temps, le calcul débute par la résolution de la conservation de l'énergie puis celle des espèces chimiques. Ces résolutions donneront accès directement à  $\langle h \rangle_m$  et à  $\langle w \rangle_m$ . Pour finir, la détermination du champ de vitesse se fera en deux étapes : une première étape pour calculer  $\mathbf{v}^l$  (étape de la mécanique des fluides) et une seconde pour calculer  $\mathbf{v}^s$  (étape de la mécanique du solide). Ainsi, pour chaque incrément de temps, les équations ne sont résolues qu'une fois. Ce schéma de résolution est donc un couplage faible des équations. Toutefois, la valeur la plus récente des variables sera utilisée au cours du calcul. Le schéma de résolution sera détaillé au chapitre 5.

A l'instant  $t$  :

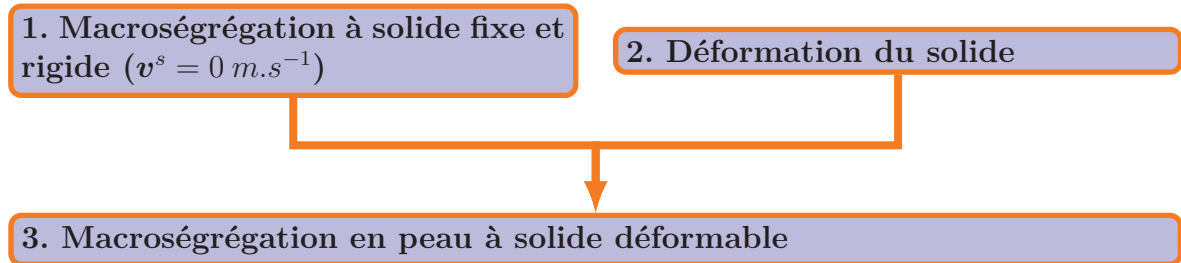


**Fig. III.2:** Schéma de résolution du modèle de macroségrégation pour un incrément de temps

### III.1.3 Stratégie de simulation et de validation

La simulation des macroségrégations en peau à solide déformable est un calcul complexe. Elle a été construite en trois étapes comme indiquée à la figure III.3. La première étape consiste à simuler la macroségrégation à solide fixe et rigide ( $\mathbf{v}^s = 0 \text{ m.s}^{-1}$ ). La deuxième étape, indépendante de la première, simule la déformation du solide. Enfin, la dernière étape est la réunion des deux précédentes et correspond à la simulation souhaitée. Cette décomposition a été guidée par le fait que chacune des étapes correspond à des analyses approximées d'expériences qui seront présentées aux chapitres IV et V. La résolution du modèle de macroségrégation pourra ainsi être testée en comparant les résultats

expérimentaux et numériques. Cette reproduction numérique des expériences représente des cas relativement complexes de calcul. Avant de les mettre en place, des tests sur des cas numériques simples ont été menés.



**Fig. III.3:** Approche adoptée pour la simulation des macroségrégations en peau à solide déformable

### III.1.4 Moyens utilisés

La finalité de ces travaux est la simulation des macroségrégations en peau dans le contexte de la coulée continue. Thericast<sup>®</sup> est un code de solidification permettant des simulations tridimensionnelles par éléments finis des phénomènes thermomécaniques associés au refroidissement du métal pour des configurations de type lingot ou coulée continue. La mise en œuvre numérique de la thermomécanique a donc été effectuée grâce au logiciel Thericast<sup>®</sup>. Toutefois, les développements numériques ont principalement été effectués dans CimLib<sup>®</sup>, bibliothèque avec laquelle Thericast<sup>®</sup> peut communiquer. CimLib<sup>®</sup> est une bibliothèque d'objets C++ dédiée aux simulations massivement parallèles par éléments finis des procédés de mise en forme des matériaux [Dig07] [Mes09]. Les résolutions de la mécanique des fluides, de l'énergie et des espèces chimiques sont faites grâce à cette bibliothèque. La mécanique du solide a quant à elle été résolue par Thericast<sup>®</sup>.

Dans ce chapitre, les méthodes numériques éléments finis utilisées pour résoudre chacune des équations ainsi que les tests de ces méthodes sur des cas simples sont exposés. La présentation des méthodes et des cas se feront dans l'ordre suivant : mécanique des fluides, énergie, espèces chimiques et mécanique du solide.

## III.2 Résolution de la mécanique des fluides

### III.2.1 Formulation forte

La résolution de la mécanique des fluides correspond à la résolution de la conservation de la masse et de la quantité de mouvement pour le liquide. Les équations de conservation sont celles présentées au tableau II.4 du chapitre II. Pour la conservation de la masse, on considère que  $\mathbf{v}^s = 0 \text{ m.s}^{-1}$ . La formulation forte du problème est alors la suivante :

Sur le domaine  $\Omega$  :

$$\begin{cases} \frac{\partial (\rho^l \langle \mathbf{v}^l \rangle)}{\partial t} + \nabla \cdot (g^l \rho^l \mathbf{v}^l \times \mathbf{v}^l) - \nabla \cdot \langle \mathbf{s}^l \rangle \\ \quad + g^l \nabla p^l - g^l \rho^l \mathbf{g} + \frac{\mu^l}{K_{perm}} g^{l2} (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) = 0 \\ \frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho^l \langle \mathbf{v}^l \rangle) = 0 \end{cases} \quad (\text{III.2.1})$$

Sur la frontière  $\partial\Omega$ , on définit les conditions aux limites suivantes :

- $\langle \mathbf{v}^l \rangle = \mathbf{v}_{imp}$  sur  $\partial\Omega_v$ , (vitesse imposée)
- $\langle \mathbf{\sigma} \rangle \cdot \mathbf{n} = \mathbf{T}_{imp}$  sur  $\partial\Omega_s$  (contrainte imposée).

avec  $\partial\Omega_v$  et  $\partial\Omega_s$  formant une partition de  $\partial\Omega$ .

Le système III.2.1 est résolu sous les hypothèse suivantes :

1. le métal est supposé incompressible, c'est-à-dire  $\langle \rho \rangle = cste = \rho_0$ . La seconde équation devient  $\nabla \cdot \langle \mathbf{v}^l \rangle = 0$ . Dans la première équation,  $\frac{\partial (\rho^l \langle \mathbf{v}^l \rangle)}{\partial t} \approx \rho_0 \frac{\partial \langle \mathbf{v}^l \rangle}{\partial t}$  et  $\nabla \cdot (g^l \rho^l \mathbf{v}^l \times \mathbf{v}^l) \approx \rho_0 \nabla \cdot (g^l \mathbf{v}^l \times \mathbf{v}^l)$ . Toutefois, pour prendre en compte les mouvements de convection dans le liquide,  $\rho^l$  dans le terme de gravité  $g^l \rho^l \mathbf{g}$  dépendra de la température et de la concentration du liquide suivant la relation :

$$\rho^l = \rho_0 \left( 1 - \beta_T (T - T_{ref}) - \sum_{i=1}^{neltall} \beta_{w_i} (w_i^l - w_{ref_i}) \right) \quad (\text{III.2.2})$$

où  $\beta_T$  est le coefficient de dilatation thermique (volumique) du matériau,  $\beta_{w_i}$  est le coefficient (volumique) de dilatation solutale de l'élément  $i$ ,  $T_{ref}$  et  $w_{ref_i}$  la température de référence et la concentration de référence de l'élément  $i$  pour lesquelles  $\rho^l = \rho_0$  et  $neltall$  le nombre total d'éléments d'alliage.

Considérer un milieu incompressible avec une masse volumique variant avec la température et la concentration du liquide dans le terme de gravité correspond à l'approximation de Boussinesq. Cette approximation est généralement adoptée pour simuler les macroségrégations dans les alliages métalliques.

2. Le liquide est considéré comme newtonien. Dans ce cas [Gan90] [Ni91] :

$$\langle \mathbf{s}^l \rangle = 2\mu^l \dot{\mathbf{e}}(\langle \mathbf{v}^l \rangle) = \mu^l (\nabla \langle \mathbf{v}^l \rangle + {}^T \nabla \langle \mathbf{v}^l \rangle)$$

3. Le terme  $\rho_0 \nabla \cdot (g^l \mathbf{v}^l \times \mathbf{v}^l) = \rho_0 \nabla \cdot \left( \frac{1}{g^l} \langle \mathbf{v}^l \rangle \times \langle \mathbf{v}^l \rangle \right)$  est approximé par :

$$\rho_0 \nabla \cdot \left( \frac{1}{g^l} \langle \mathbf{v}^l \rangle \times \langle \mathbf{v}^l \rangle \right) \approx \frac{\rho_0}{g^l} \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}^l \rangle \times \langle \mathbf{v}^l \rangle)$$

De plus, du fait de l'incompressibilité,  $\nabla \cdot (\langle \mathbf{v}^l \rangle \times \langle \mathbf{v}^l \rangle) = [\nabla \langle \mathbf{v}^l \rangle] \langle \mathbf{v}^l \rangle$ .





### Méthode de stabilisation

La discrétisation de III.2.4 par la méthode de Galerkin standard (fonctions-test identiques aux fonctions d'interpolation) conduit à des oscillations numériques. Pour éviter cela, la résolution III.2.4 est stabilisée grâce à la formulation SUPG-PSPG-LSIC [Tez92] [Tez00] :

Trouver  $(\langle \mathbf{v}^l \rangle, p^l) \in \mathcal{V} \times \mathcal{P}$  tel que :

$$\begin{aligned}
& \forall \mathbf{v}^* \in \mathcal{V}^0 \\
& \int_{\Omega} \frac{\rho_0}{g^l} \left( \frac{\partial \langle \mathbf{v}^l \rangle}{\partial t} + \frac{1}{g^l} [\nabla \langle \mathbf{v}^l \rangle] \langle \mathbf{v}^l \rangle \right) \cdot \mathbf{v}^* \, d\Omega + \int_{\Omega} \frac{2\mu^l}{g^l} \dot{\varepsilon}(\langle \mathbf{v}^l \rangle) : \dot{\varepsilon}(\mathbf{v}^*) \, d\Omega \\
& - \int_{\Omega} p^l \nabla \cdot \mathbf{v}^* \, d\Omega - \int_{\partial\Omega_s} \frac{1}{g^l} \mathbf{T}_{imp} \cdot \mathbf{v}^* \, dS - \int_{\Omega} \rho^l \mathbf{g} \cdot \mathbf{v}^* \, d\Omega + \int_{\Omega} \frac{\mu^l}{K_{perm}} (\langle \mathbf{v}^l \rangle - g^l \mathbf{v}^s) \cdot \mathbf{v}^* \, d\Omega \\
& + \int_{\Omega} \tau_{SUPG} \langle \mathbf{v}^l \rangle_{centre} \cdot \nabla \mathbf{v}^* \left\{ \frac{\rho_0}{g^l} \frac{\partial \langle \mathbf{v}^l \rangle}{\partial t} + \frac{\rho_0}{g^{l2}} [\nabla \langle \mathbf{v}^l \rangle] \langle \mathbf{v}^l \rangle + \dots \right. \\
& \quad \left. \dots + \frac{\mu^l}{K_{perm}} (\langle \mathbf{v}^l \rangle - g^l \mathbf{v}^s) + \nabla p^l - \rho \mathbf{g} \right\} \, d\Omega \\
& + \int_{\Omega} \tau_{LSIC} \rho_0 \nabla \mathbf{v}^* \cdot \nabla \langle \mathbf{v}^l \rangle \, d\Omega \\
& = 0
\end{aligned} \tag{III.2.5}$$

$$\begin{aligned}
& \forall p^* \in \mathcal{P} \\
& - \int_{\Omega} p^* \nabla \cdot \langle \mathbf{v}^l \rangle \, d\Omega \\
& + \int_{\Omega} \tau_{PSPG} \frac{1}{\rho_0} \cdot \nabla p^* \left\{ \frac{\rho_0}{g^l} \frac{\partial \langle \mathbf{v}^l \rangle}{\partial t} + \frac{\rho_0}{g^{l2}} [\nabla \langle \mathbf{v}^l \rangle] \langle \mathbf{v}^l \rangle + \dots \right. \\
& \quad \left. \dots + \frac{\mu^l}{K_{perm}} (\langle \mathbf{v}^l \rangle - g^l \mathbf{v}^s) + \nabla p^l - \rho \mathbf{g} \right\} \, d\Omega \\
& = 0
\end{aligned}$$

où

$\tau_{SUPG}$  est le paramètre de stabilisation SUPG (Streamline-Upwind Petrov Galerkin) ;  
 $\tau_{PSPG}$  est le paramètre de stabilisation PSPG (Pressure-Stabilizing/Petrov Galerkin) ;  
 $\tau_{LSIC}$  est le paramètre de stabilisation LSIC (Least Square on Incompressibility Constraint).  
et  $\langle \mathbf{v}^l \rangle_{centre}$  est le vecteur vitesse moyenne du liquide calculée au centre de l'élément. Pour

une propriété  $\phi$ , la quantité  $\phi_{centre}$  désigne la valeur de  $\phi$  au centre de l'élément et est calculée au sens de l'interpolation  $\mathbb{P}_1$ .

Les paramètres de stabilisation sont calculés de la manière suivante [Gou05] :

$$\begin{cases} \tau_{SUPG} = \left[ \left( \frac{2 \left( 1 + \Delta t \frac{\mu^l}{\rho_0 K} \right)}{\Delta t} \right)^2 + \left( \frac{2 \|\langle \mathbf{v}^l \rangle_{centre}\|}{h_{mai}} \right)^2 + \left( \frac{4\mu^l}{h_{mai}^2} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}} \\ \tau_{PSPG} = \tau_{SUPG} \\ \tau_{LSIC} = \frac{h_{mai}}{2} \|\langle \mathbf{v}^l \rangle_{centre}\| Z \end{cases} \quad (\text{III.2.6})$$

où  $h_{mai}$  est la taille de maille caractéristique d'un élément fini, exprimée dans la direction de l'écoulement (selon la vitesse d'advection du problème), obtenue suivant la formule ( $\varphi_i$  étant la fonction d'interpolation du noeud  $i$ ) :

$$h_{mai} = 2 \|\langle \mathbf{v}^l \rangle_{centre}\| \left( \sum_{i=1}^{noelt} |\langle \mathbf{v}^l \rangle_{centre} \cdot \nabla \varphi_i| \right)^{-1} \quad (\text{III.2.7})$$

$Z$  est une fonction de nombre de Reynolds de maille  $Re_{mai} = \frac{\|\langle \mathbf{v}^l \rangle_{centre}\| h_{mai} \rho_0}{2\mu^l}$  définie par :

$$Z = \begin{cases} \frac{Re_{mai}}{3} & \text{si } Re_{mai} \leq 3, \\ 1 & \text{si } Re_{mai} > 3 \end{cases} \quad (\text{III.2.8})$$

### III.2.3 Discrétisation

La discrétisation du système III.2.5 sur le maillage de  $\Omega$  requiert :

1. d'approximer  $\langle \mathbf{v}^l \rangle$  et  $p^l$  par  $\langle \mathbf{v}^l \rangle_h$  et  $p_h^l$ , respectivement, telles que :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{v}^l \rangle_h \in \mathcal{V}_h \text{ avec } \mathcal{V}_h &= \{ \mathbf{v}_h, \mathbf{v}_h \in (C^0(\Omega))^d, \mathbf{v}_h|_{\partial\Omega_v} = \mathbf{v}_{imp} \text{ et } \mathbf{v}_h|_{\Omega_e} \in (\mathbb{P}_1(\Omega_e))^d \} \\ p_h^l \in \mathcal{P}_h \text{ avec } \mathcal{P}_h &= \{ p_h, p_h \in C^0(\Omega) \text{ et } p_h|_{\Omega_e} \in \mathbb{P}_1(\Omega_e) \} \end{aligned}$$

2. d'utiliser les fonctions-test  $\mathbf{v}^*$  et  $p^*$  telles que :

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_h^* \in \mathcal{V}_h^0 \text{ avec } \mathcal{V}_h^0 &= \{ \mathbf{v}_h, \mathbf{v}_h \in (C^0(\Omega))^d, \mathbf{v}_h|_{\partial\Omega_v} = 0 \text{ et } \mathbf{v}_h|_{\Omega_e} \in (\mathbb{P}_1(\Omega_e))^d \} \\ p_h^* &\in \mathcal{P}_h \end{aligned}$$

Le système discrétisé n'est pas réécrit ici. Il est de la même forme que celui de la formulation faible III.2.5. Pour obtenir le système discrétisé, les espaces  $\mathcal{V}$  et  $\mathcal{V}^0$ , les variables  $\langle \mathbf{v}^l \rangle$  et  $p^l$  et les fonctions-test  $\mathbf{v}^*$  et  $p^*$  sont remplacés par les espaces  $\mathcal{V}_h$  et  $\mathcal{V}_h^0$ , les variables  $\langle \mathbf{v}^l \rangle_h$  et  $p_h^l$  et les fonctions-test  $\mathbf{v}_h^*$  et  $p_h^*$  respectivement.

### Résolution

La résolution du système discrétisé présente deux particularités :

1. elle fait intervenir deux variables : la vitesse et la pression. Le système sera résolu en vitesse/pression grâce aux éléments finis mixtes [Arn84].
2. elle est non-linéaire de par la présence du terme  $[\nabla\langle\mathbf{v}^l\rangle_h]\langle\mathbf{v}^l\rangle_h$ . Deux choix sont possibles pour linéariser ce terme :
  - (a) Méthode semi-implicite :  $[\nabla\langle\mathbf{v}^l\rangle_h]\langle\mathbf{v}^l\rangle_h \approx [\nabla\langle\mathbf{v}^l\rangle_h]\langle\mathbf{v}^l\rangle_h^{t-\Delta t}$  ;
  - (b) Méthode implicite : une méthode de Newton avec itérations successives est utilisée [Bas06].  $\langle\mathbf{v}^l\rangle_h$  est écrit comme la somme de deux termes :  $\langle\mathbf{v}^l\rangle_h = \langle\mathbf{u}\rangle_h + (\langle\mathbf{v}^l\rangle_h - \langle\mathbf{u}\rangle_h)$  où  $\langle\mathbf{u}\rangle_h$  est la vitesse connue, calculée à l'itération de Newton précédente. Le terme  $[\nabla\langle\mathbf{v}^l\rangle_h]\langle\mathbf{v}^l\rangle_h$  s'écrit donc :

$$[\nabla\langle\mathbf{v}^l\rangle_h]\langle\mathbf{v}^l\rangle_h = [\nabla\langle\mathbf{v}^l\rangle_h]\langle\mathbf{u}\rangle_h + [\nabla\langle\mathbf{u}\rangle_h]\langle\mathbf{v}^l\rangle_h - [\nabla\langle\mathbf{u}\rangle_h]\langle\mathbf{u}\rangle_h \quad (\text{III.2.9})$$

où l'on a négligé les termes  $[\nabla(\langle\mathbf{v}^l\rangle_h - \langle\mathbf{u}\rangle_h)](\langle\mathbf{v}^l\rangle_h - \langle\mathbf{u}\rangle_h)$ .

Pour la suite de cette section, l'indice  $h$  sera omis.

### III.2.4 Cas de validation

Le cas de validation du solveur de mécanique des fluides est celui de la cavité entraînée. Le test de la cavité entraînée consiste à simuler l'écoulement d'un fluide dans une cavité carré 2D d'un mètre de coté, schématisée à la figure III.4(a), pour différents nombres de Reynolds. Le nombre de Reynolds  $Re$  est défini par  $Re = \frac{\rho_0 U l_\Omega}{\mu^l}$  avec  $l_\Omega$  la longueur caractéristique de domaine  $\Omega$  ( $l_\Omega = 1$  m) et  $U$  l'ordre de grandeur de la vitesse  $\mathbf{v}^l$ . Une vitesse horizontale de  $1 \text{ m.s}^{-1}$  est imposée sur la paroi supérieure ( $U \approx 1 \text{ m.s}^{-1}$ ). Elle est nulle partout ailleurs. La masse volumique de fluide  $\rho_0$  est prise constante égale à  $1 \text{ kg.m}^{-3}$ . L'approximation de Boussinesq n'est donc pas nécessaire dans ce cas. On fait varier la viscosité pour obtenir le nombre de Reynolds souhaité. De plus  $g^l = 1$  et  $\mathbf{v}^s = 0 \text{ m.s}^{-1}$ . Enfin, la cavité est remplie d'un liquide newtonien. Le système à résoudre se réduit aux équations de Navier-Stokes pour le domaine  $\Omega$  :

$$\begin{cases} \rho_0 \frac{\partial \mathbf{v}^l}{\partial t} + \rho_0 [\nabla \mathbf{v}^l] \mathbf{v}^l - \nabla \cdot (\mu^l (\nabla \mathbf{v}^l + {}^T \nabla \mathbf{v}^l)) + \nabla p^l - \rho_0 \mathbf{g} + \frac{\mu^l}{K_{perm}} \mathbf{v}^l = 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{v}^l = 0 \end{cases} \quad (\text{III.2.10})$$

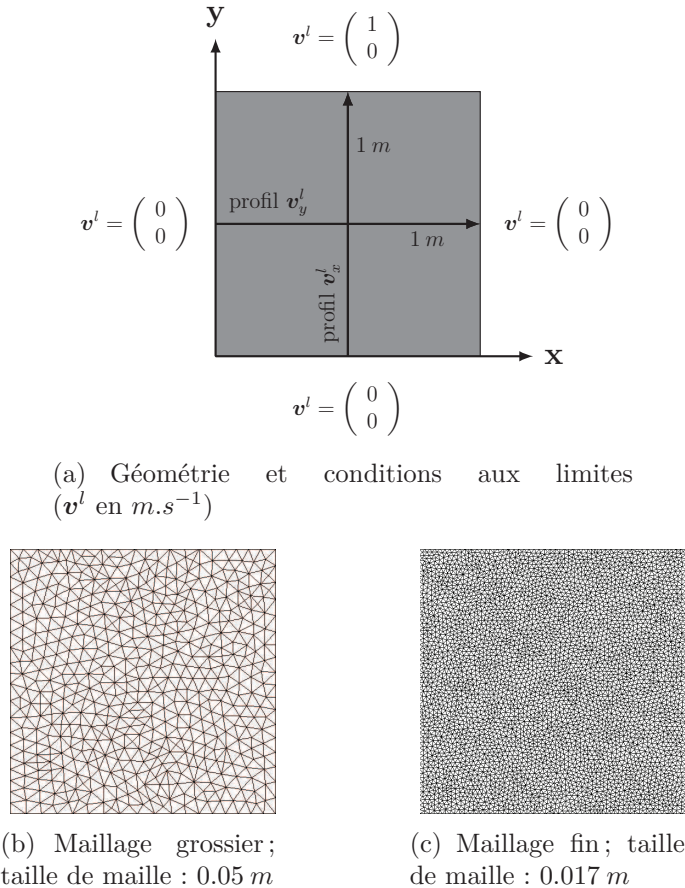
Les simulations mises en place visent à étudier l'influence de la méthode de résolution (implicite ou semi-implicite) et de la discrétisation spatiale (maillage fin de  $0.017$  m de taille de maille (figure III.4(c)) et maillage grossier  $0.05$  m de taille de maille (figure III.4(b)) pour trois nombres de Reynolds ( $Re = 100, 1000$  et  $10000$ ). Le pas de temps est fixé constant à  $0.1$  s. Les calculs sont arrêtés lorsqu'est atteint l'état stationnaire, c'est-à-dire dans notre cas :

$$\max_{\Omega} \left( \|\mathbf{v}^{l^t} - \mathbf{v}^{l^{t-\Delta t}}\| \right) < 10^{-6} \text{ m.s}^{-1} \quad (\text{III.2.11})$$

Les résultats obtenus sont comparés à des solutions de référence. Les références sont [Ghi82] pour  $Re = 100$  et [Ghi82] et [Ert05] pour  $Re = 1000$  et  $10000$ . La comparaison se fait sur le profil de la première composante de la vitesse  $v_x^l$  de bas en haut de la cavité à  $x = 0.5 m$  et sur celui de la deuxième composante de la vitesse  $v_y^l$  de gauche à droite de la cavité à  $y = 0.5 m$ .

Les résultats concernant l'influence de la méthode de résolution sont reportés à la figure III.5. Les résultats obtenus pour le schéma implicite et semi-implicite sont identiques. Toutefois, les simulations sont plus longues avec la méthode implicite car elle nécessite d'effectuer des itérations de Newton pour résoudre le système. C'est pour cette raison qu'on utilisera la méthode semi-implicite dans la suite des calculs. On constate que pour les Reynolds 100 et 1000, les résultats sont similaires à ceux des références. Pour  $Re = 10000$ , les résultats s'éloignent des solutions de référence. A cette valeur du Reynolds, l'écoulement n'est plus laminaire. Le maillage n'est pas adapté. On notera que des simulations numériques avec des maillages mieux adaptés, mises en œuvre par Elie Hachem au CEMEF [Hac10], minimisent les écarts observés et se rapprochent des courbes de référence.

L'influence du maillage est ensuite étudiée et les résultats sont reportés à la figure III.6. Pour  $Re = 100$ , les résultats sont identiques. Pour  $Re = 1000$  et  $10000$ , les résultats obtenus avec le maillage grossier sont plus loin de la solution de référence.



**Fig. III.4:** Schéma de la cavité entraînée et maillages utilisés

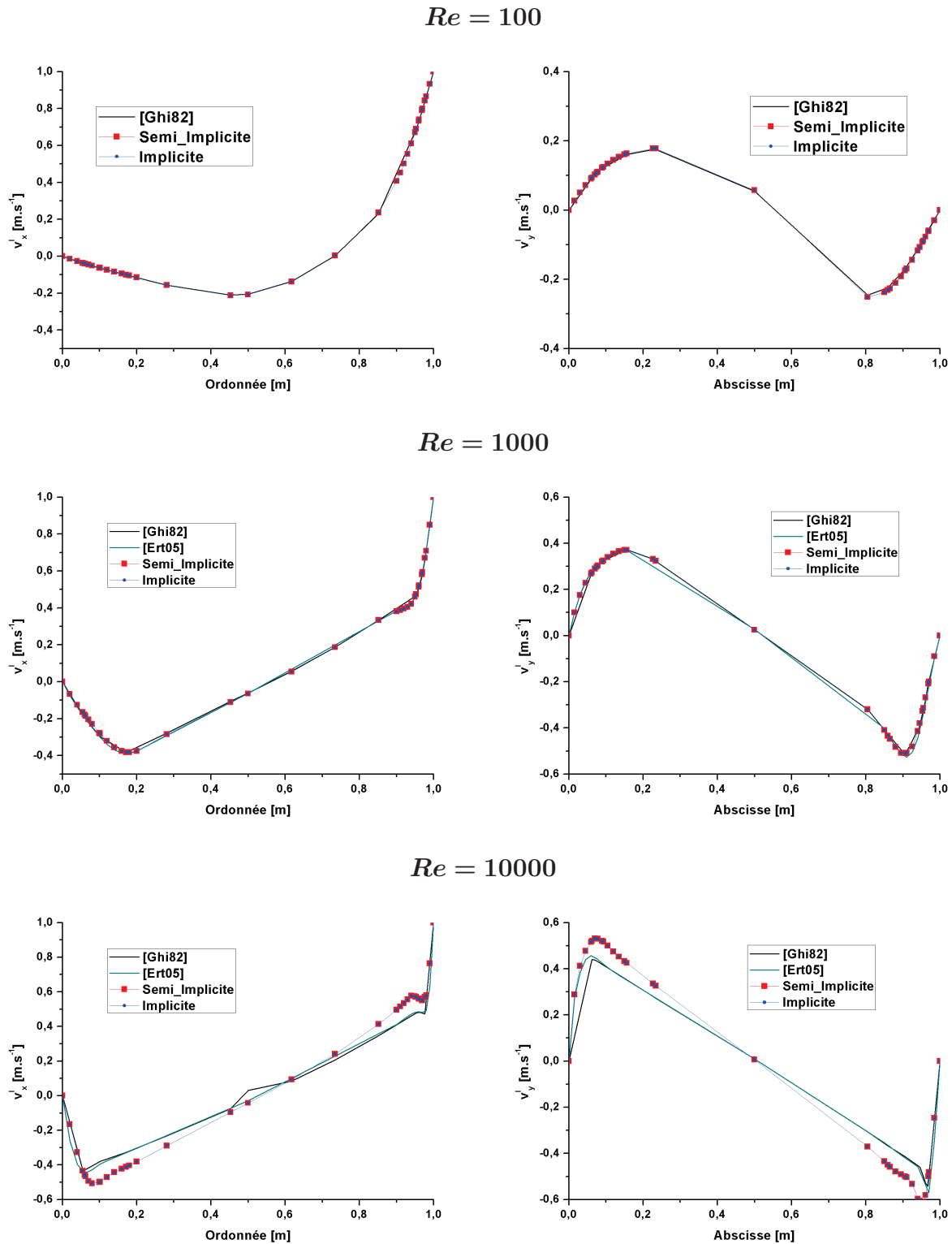
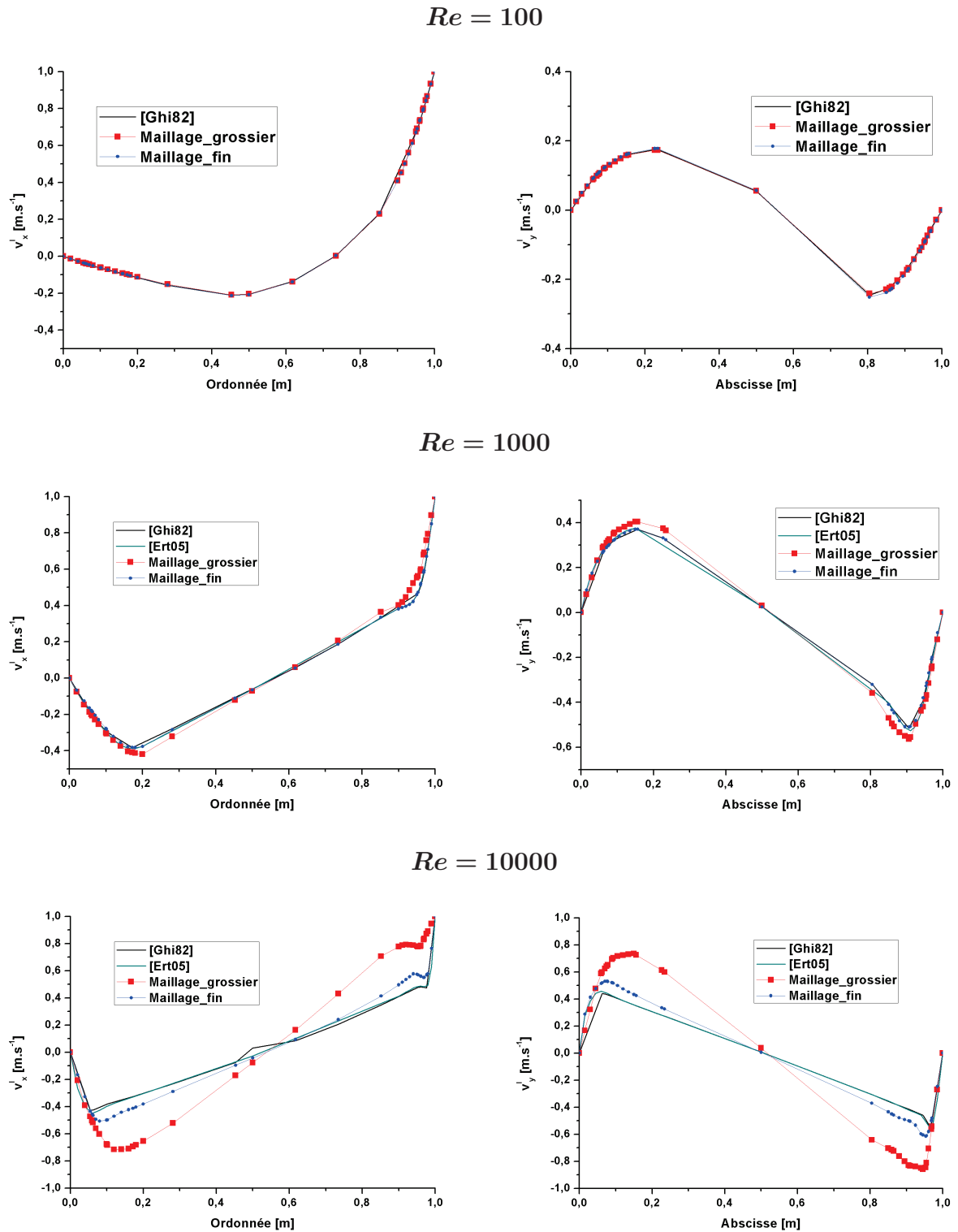


Fig. III.5: Influence de la méthode de résolution pour des Reynolds de 100, 1000 et 10000 (maillage fin pour tous les calculs), (gauche) profil  $v_x^l$ , (droite) profil  $v_y^l$  suivant les directions indiquées à la figure III.4(a)



**Fig. III.6:** Influence du maillage sur les résultats pour des Reynolds de 100, 1000 et 10000 (méthode semi-implicite pour tous les calculs), (gauche) profil  $v_x^l$ , (droite) profil  $v_y^l$  suivant les directions indiquées à la figure III.4(a)

Ce cas de référence 2D a un équivalent 3D. La cavité n'est plus un carré mais un cube dont une vitesse est imposée sur la face supérieure. Le solveur a aussi été testé pour cette géométrie et pour différents Reynolds. La description du cas ainsi que les résultats ne sont pas détaillés ici. Ils ont été publiés dans un article co-signé avec E. Hachem [Hac10]. De même que pour le cas 2D, les résultats numériques sont proches des solutions de référence pour des Reynolds allant jusqu'à 20000.

### III.3 Résolution de la conservation de l'énergie

#### III.3.1 Formulation forte

L'équation de conservation de l'énergie s'écrit sur le domaine  $\Omega$  :

$$\frac{\partial \langle \rho h \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \langle \rho h \mathbf{v} \rangle - \nabla \cdot (\langle \kappa \rangle \nabla T) = 0 \quad (\text{III.3.1})$$

En utilisant la définition de la fraction massique ( $f^\alpha = g^\alpha \rho^\alpha / \langle \rho \rangle$ ), les égalités  $f^l + f^s = 1$  et  $L = h^l - h^s$  ( $L$  chaleur latente de fusion), l'équation III.3.1 se réécrit de la manière suivante (démonstration en Annexe B) [Bel05a] :

$$\langle \rho \rangle \frac{\partial \langle h \rangle_m}{\partial t} + \langle \rho \mathbf{v} \rangle \cdot \nabla \langle h \rangle_m + L \nabla \cdot (f^s f^l \langle \rho \rangle (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s)) - \nabla \cdot (\langle \kappa \rangle \nabla T) = 0 \quad (\text{III.3.2})$$

Cette dernière expression se simplifie en :

$$\langle \rho \rangle \frac{\partial \langle h \rangle_m}{\partial t} + \langle \rho \mathbf{v} \rangle \cdot \nabla \langle h \rangle_m + L f^s f^l \langle \rho \rangle \nabla \cdot (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) - \nabla \cdot (\langle \kappa \rangle \nabla T) = 0 \quad (\text{III.3.3})$$

où le terme  $(\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) \nabla (f^s f^l \langle \rho \rangle)$  a été négligé.

La formulation forte du problème énergétique s'écrit alors :

*Trouver  $\langle h \rangle_m$  telle que :*

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle \rho \rangle \frac{\partial \langle h \rangle_m}{\partial t} + \langle \rho \mathbf{v} \rangle \cdot \nabla \langle h \rangle_m + L f^s f^l \langle \rho \rangle \nabla \cdot (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) - \nabla \cdot (\langle \kappa \rangle \nabla T) = 0 \\ T = T_{imp} \text{ sur } \partial\Omega_T \text{ (condition de Dirichlet)} \\ -\langle \kappa \rangle \nabla T \cdot \mathbf{n} = \phi_{imp} \text{ sur } \partial\Omega_q \text{ (condition de Neumann)} \\ -\langle \kappa \rangle \nabla T \cdot \mathbf{n} = h_c (T - T_{ext}) \text{ sur } \partial\Omega_c \text{ (condition de Fourier)} \\ \partial\Omega_T, \partial\Omega_q \text{ et } \partial\Omega_c \text{ forment une partition de } \partial\Omega \end{array} \right. \quad (\text{III.3.4})$$

#### III.3.2 Formulation faible

De même que pour la résolution de la mécanique des fluides, la résolution de l'énergie nécessite d'être stabilisée. La méthode de stabilisation SUPG est utilisée. Elle consiste à remplacer les fonctions-test classiques  $h^*$  par les fonctions-test SUPG :

$$h_{SUPG}^* = h^* + \tau \mathbf{v} \cdot \nabla h^* \quad (\text{III.3.5})$$

avec  $h^* \in \mathcal{W}^0 = \{f, f \in H^1(\Omega) \text{ et } f|_{\partial\Omega_T} = 0\}$ ,  $\tau$  un paramètre de stabilisation et  $\mathbf{v}$  la vitesse d'advection du problème.

Dans notre cas,  $\mathbf{v}$  s'apparentera à  $\tilde{\mathbf{v}}_{centre}$  avec  $\tilde{\mathbf{v}}$  calculée de la manière suivante :

$$\tilde{\mathbf{v}} = \begin{cases} \mathbf{v}^s & \text{si } g_{centre}^l \leq 10^{-5}, \\ \mathbf{v}^l & \text{si } g_{centre}^s \leq 10^{-5}, \\ \frac{g_{centre}^s \rho_{sol} \mathbf{v}^s + g_{centre}^l \rho_{liq} \mathbf{v}^l}{\tilde{\rho}} & \text{sinon} \end{cases} \quad (\text{III.3.6})$$

avec  $\tilde{\rho} = g_{centre}^s \rho_{sol} + g_{centre}^l \rho_{liq}$ .

Reprenant les travaux de Brooks [Bro82] et Tezduyar [Tez92],  $\tau$  est calculé de la manière suivante :

$$\tau = \frac{\theta h_{mai}}{\sqrt{15} \|\tilde{\mathbf{v}}_{centre}\|} \quad (\text{III.3.7})$$

où  $\|\tilde{\mathbf{v}}_{centre}\|$  est la norme du vecteur  $\tilde{\mathbf{v}}_{centre}$ ,  $h_{mai}$  est défini par :

$$h_{mai} = 2 \|\tilde{\mathbf{v}}_{centre}\| \left( \sum_{i=1}^{noelt} |\tilde{\mathbf{v}}_{centre} \cdot \nabla \varphi_i| \right)^{-1} \quad (\text{III.3.8})$$

et  $\theta$  est une fonction du nombre de Péclet de maille  $Pe_{mai}$ , égal à :

$$\theta = \coth\left(\frac{Pe_{mai}}{2}\right) - \frac{2}{Pe_{mai}} \quad (\text{III.3.9})$$

avec

$$Pe_{mai} = \frac{h_{mai} \|\tilde{\mathbf{v}}_{centre}\| \tilde{\rho} c_{pcentre}}{\kappa_{centre}}$$

avec

$$\tilde{\rho} = \begin{cases} \rho_{sol} & \text{si } g_{centre}^l \leq 10^{-5}, \\ \rho_{liq} & \text{si } g_{centre}^s \leq 10^{-5}, \\ g_{centre}^s \rho_{sol} + g_{centre}^l \rho_{liq} & \text{sinon} \end{cases} \quad (\text{III.3.10})$$

.../...



La formulation faible de la conservation de l'énergie est :

Trouver  $\langle h \rangle_m \in \mathcal{W} = \{f, f \in H^1(\Omega) \text{ et } f|_{\partial\Omega_T} = h(T_{imp})\}$  telle que :

$$\begin{aligned}
\forall h^* \in \mathcal{W}^0 \quad & \int_{\Omega} \langle \rho \rangle \frac{\partial \langle h \rangle_m}{\partial t} h^* \, d\Omega + \int_{\Omega} \langle \rho \mathbf{v} \rangle \cdot \nabla \langle h \rangle_m h^* \, d\Omega + \int_{\Omega} \langle \kappa \rangle \nabla T \cdot \nabla h^* \, d\Omega \\
& + \int_{\Omega} L f^s f^l \langle \rho \rangle \nabla \cdot (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) h^* \, d\Omega \\
& + \int_{\partial\Omega_q} \phi_{imp} h^* \, dS + \int_{\partial\Omega_c} h_c (T - T_{ext}) h^* \, d\Omega \\
& + \int_{\Omega} \tau \tilde{\mathbf{v}}_{centre} \cdot \nabla h^* \left( \langle \rho \rangle \frac{\partial \langle h \rangle_m}{\partial t} + \langle \rho \mathbf{v} \rangle \cdot \nabla \langle h \rangle_m + \dots \right. \\
& \quad \left. \dots + L f^s f^l \langle \rho \rangle \nabla \cdot (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) - \nabla \cdot (\langle \kappa \rangle \nabla T) \right) \, d\Omega \\
& = 0
\end{aligned} \tag{III.3.11}$$

### III.3.3 Discrétisation

De la même manière que pour la mécanique des fluides, la discrétisation entraîne d'approximer  $\langle h \rangle_m$  par  $\langle h \rangle_{m,h}$  avec  $\langle h \rangle_{m,h} \in \mathcal{W}_h = \{f, f \in C^0(\Omega), f|_{\Omega_e} \in \mathbb{P}_1(\Omega) \text{ et } f|_{\partial\Omega_T} = h(T_{imp})\}$  et d'utiliser les fonctions-test  $h_h^*$  avec  $h_h^* \in \mathcal{W}_h^0 = \{f, f \in C^0(\Omega), f|_{\Omega_e} \in \mathbb{P}_1(\Omega) \text{ et } f|_{\partial\Omega_T} = 0\}$ . Le système discrétisé s'écrit sous forme matricielle (les fonctions  $h_h^*$  et les fonctions d'interpolation  $\varphi$  sont prises identiques) :

$$\left( M_{SUPG} + A_{SUPG} \right) \{ \langle h \rangle_{m,h} \} + \left( K \right) \{ T_h \} - \left( M_{SUPG} \right) \{ \langle h \rangle_{m,h}^{t-\Delta t} \} - \{ F \} + \{ S \} = 0 \tag{III.3.12}$$

avec  $\forall i, j \in [1, \dots, noe]$

$$\begin{aligned}
\left( M_{SUPG} \right)_{ij} &= \int_{\Omega} \frac{\langle \rho \rangle}{\Delta t} (\varphi_i + \tau \tilde{\mathbf{v}}_{centre} \cdot \nabla \varphi_i) \varphi_j \, d\Omega \\
\left( A_{SUPG} \right)_{ij} &= \int_{\Omega} (\varphi_i + \tau \tilde{\mathbf{v}}_{centre} \cdot \nabla \varphi_i) \nabla \varphi_j \cdot \langle \rho \mathbf{v} \rangle \, d\Omega \\
\left( K \right)_{ij} &= \int_{\Omega} \langle \kappa \rangle \nabla \varphi_i \cdot \nabla \varphi_j \, d\Omega + \int_{\partial\Omega_c} h_c \varphi_i \varphi_j \, dS
\end{aligned} \tag{III.3.13}$$

$$\begin{aligned}\{S\}_i &= \int_{\Omega} L f^s f^l \langle \rho \rangle \nabla \cdot (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) (\varphi_i + \tau \tilde{\mathbf{v}}_{centre} \cdot \nabla \varphi_i) d\Omega \\ \{F\}_i &= \int_{\partial\Omega_q} -\phi_{imp} \varphi_i dS + \int_{\partial\Omega_c} h_c T_{ext} \varphi_i dS\end{aligned}$$

Dans la suite de cette section, l'indice  $h$  sera omis.

### Résolution

La particularité de la résolution de la conservation de l'énergie est que deux variables principales, l'enthalpie  $\langle h \rangle_m$  et la température  $T$ , interviennent. Pour résoudre, seule une des deux variables doit être conservée. L'enthalpie est choisie comme variable principale, d'une part pour mieux prendre en compte la conservation de l'énergie lors du changement de phase et d'autre part pour garder toute flexibilité dans le choix du modèle de micro-ségrégation qui relie  $\langle h \rangle_m$  et  $T$ . Ainsi cette relation entre  $\langle h \rangle_m$  et  $T$  permet d'éliminer  $T$  de III.3.12. Bien évidemment, le modèle de micro-ségrégation ne propose pas de relation linéaire simple entre  $\langle h \rangle_m$  et  $T$ . Une méthode itérative de Newton-Raphson a donc été mise en place au cours de la thèse de Makhlof Hamide [Ham08]. Elle consiste, à l'instant  $t$  pour l'itération  $(n)$ , à minimiser le résidu :

$$\begin{aligned}R_E(\langle h \rangle_m^{(n)}) &= \left( M_{SUPG} + A_{SUPG} \right) \{ \langle h \rangle_m^{(n)} \} + \left( K \right) \{ T^{(n)} \} - \left( M_{SUPG} \right) \{ \langle h \rangle_m^{t-\Delta t} \} \\ &\quad - \{ F \} + \{ S \} \quad (\text{III.3.14})\end{aligned}$$

jusqu'à ce qu'un critère de convergence soit atteint. Dans notre cas, les itérations s'arrêtent si une des conditions suivantes est satisfaite ( $IterNr$  est un compteur des itérations de Newton-Raphson) :

$$\begin{cases} \max(|T^{(n)} - T^{(n-1)}|) < \varepsilon_T \\ \frac{\langle h \rangle_m^{(n)} - \langle h \rangle_m^{(n-1)}}{\langle h \rangle_m^{(n)}} < \varepsilon_H \\ IterNr > IterNrMax \end{cases} \quad (\text{III.3.15})$$

avec  $\varepsilon_T$  et  $\varepsilon_H$  les tolérances en température et en enthalpie et  $IterNrMax$  le nombre maximal d'itérations de Newton-Raphson.

Minimiser le résidu  $R_E(\langle h \rangle_m^{(n)})$  revient à résoudre, à l'itération  $n$ , l'équation suivante :

$$R_E(\langle h \rangle_m^{(n-1)} + d\langle h \rangle_m^{(n)}) = R_E(\langle h \rangle_m^{(n-1)}) + \left( \frac{\partial R_E(\langle h \rangle)}{\partial \langle h \rangle_m} \right)^{(n-1)} \{ d\langle h \rangle_m^{(n)} \} = 0 \quad (\text{III.3.16})$$

De l'équation III.3.14, on déduit :

$$\left( \frac{\partial R_E(\langle h \rangle_m)}{\partial \langle h \rangle_m} \right)^{(n-1)} = \left( M_{SUPG} + A_{SUPG} \right) + \left( K \right) \left( \frac{\partial T}{\partial \langle h \rangle_m} \right)^{(n-1)} + \left( \frac{\partial S}{\partial \langle h \rangle_m} \right)^{(n-1)} \quad (\text{III.3.17})$$

avec

$$\left( \frac{\partial S}{\partial \langle h \rangle_m} \right)_{ij} = L \int_{\Omega} \langle \rho \rangle \nabla \cdot (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) (1 - 2f^l) \underbrace{\left( \varphi_j \frac{\partial f^l}{\partial \langle h \rangle_m} \Big|_j \right)}_{\text{pas de somme sur } j} (\varphi_i + \tau \tilde{\mathbf{v}}_{\text{centre}} \cdot \nabla \varphi_i) d\Omega$$

En injectant III.3.14 et III.3.17 dans III.3.16, on obtient le système linéaire à résoudre au temps  $t$  pour l'itération  $n$  :

$$\begin{aligned} & \left[ \left( M_{SUPG} + A_{SUPG} \right) + \left( K \right) \left( \frac{\partial T}{\partial \langle h \rangle_m} \right)^{(n-1)} + \left( \frac{\partial S}{\partial \langle h \rangle_m} \right)^{(n-1)} \right] \{ dh_m^{(n)} \} \\ & = - \left( M_{SUPG} \right) \{ \langle h \rangle_m^{(n-1)} - \langle h \rangle_m^{t-\Delta t} \} - \left( A_{SUPG} \right) \{ \langle h \rangle_m^{(n-1)} \} \\ & \quad - \left( K \right) \{ T^{(n-1)} \} + \{ F \} - \{ S \} \quad (\text{III.3.18}) \end{aligned}$$

Cette méthode de Newton-Raphson implique d'évaluer à chaque itération les termes  $T$ ,  $\frac{\partial T}{\partial \langle h \rangle_m}$  et  $\frac{\partial f^l}{\partial \langle h \rangle_m}$ . Les deux derniers termes sont reliés entre eux par :

$$\langle h \rangle_m - \left( \int_0^T c_p(\omega) d\omega + f^l L \right) = 0 \quad (\text{III.3.19})$$

En dérivant par rapport à  $\langle h \rangle_m$ , on obtient :

$$\frac{\partial f^l}{\partial \langle h \rangle_m} = \frac{1 - c_p \frac{\partial T}{\partial \langle h \rangle_m}}{L}$$

Il reste donc à déterminer  $T$  et  $\frac{\partial T}{\partial \langle h \rangle_m}$ . Ceci se fait grâce à la conversion de l'enthalpie en température. Trois configurations sont possibles :

1. il n'y a pas de macroségrégation et une relation  $\forall T f^l(T)$  est donnée a priori. Dans ce cas, la conversion d'enthalpie en température revient à chercher la température  $T$  telle que la relation III.3.19 soit vérifiée. Cette température est déterminée grâce à un algorithme itératif de recherche du zéro d'une fonction par la méthode de la fausse position. Une fois  $T$  connue,  $\frac{\partial T}{\partial \langle h \rangle_m}$  est évalué : soit  $(p)$  l'itération telle que  $T^{(p)}$  soit le zéro de la fonction, alors  $\frac{\partial T}{\partial \langle h \rangle_m} = \frac{T^{(p)} - T^{(p-1)}}{\langle h \rangle_m(T^{(p)}) - \langle h \rangle_m(T^{(p-1)})}$
2. il y a macroségrégation mais en système fermé (on suppose que la concentration moyenne reste constante pendant la solidification). Le chemin de solidification, c'est-à-dire la relation  $\forall T f^l(T)$ , est connu à l'avance et on est alors ramené au cas précédent.
3. il y a macroségrégation mais en système ouvert. On ne connaît pas à l'avance la relation liant  $f^l$  et  $T$ . Dans ce cas, la conversion se fait grâce à la résolution du modèle de microségrégation. Cette résolution est détaillée en annexe C.

### III.3.4 Cas de validation

La résolution de la conservation de l'énergie a été testée sur trois cas simples :

1. sans vitesse ( $\mathbf{v}^s = \mathbf{v}^l = 0 \text{ m.s}^{-1}$ ) et sans changement de phase : refroidissement simple d'une barre
2. sans vitesse ( $\mathbf{v}^s = \mathbf{v}^l = 0 \text{ m.s}^{-1}$ ) mais avec changement de phase : solidification d'une barre
3. avec vitesse ( $\mathbf{v}^l \neq 0$ ,  $\mathbf{v}^s = 0 \text{ m.s}^{-1}$ ) et sans changement de phase : convection naturelle

#### III.3.4.1 Refroidissement simple d'une barre

Le refroidissement simple d'une barre permet de tester la résolution de la conservation de l'énergie dans sa configuration la plus simple. En effet, pour ce cas, il n'y a ni vitesse ( $\mathbf{v}^s = \mathbf{v}^l = 0 \text{ m.s}^{-1}$ ) ni changement de phase. A l'instant initial, le métal est à haute température ( $T_{init} = 1500^\circ\text{C}$ ) mais entièrement solide. La barre est brusquement refroidie en imposant une température  $T_{imp}$  de  $800^\circ\text{C}$  sur sa paroi latérale gauche, les autres parois étant adiabatiques. La masse volumique du métal ainsi que la chaleur massique et la conductivité thermique sont constantes ( $\kappa^s = cste1$ ,  $c_p^s = cste2$ ,  $\rho^s = \rho_0 = cste3$ ). Dans cette configuration, l'équation de la conservation de l'énergie à résoudre se réduit à :

$$\rho_0 c_p^s \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla \cdot (\kappa^s \nabla T) = 0 \quad (\text{III.3.20})$$

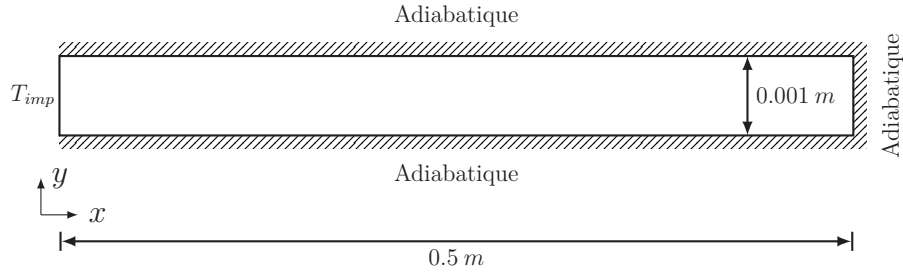
Ce cas simple monodimensionnel possède la solution analytique suivante [Aga96] :

$$T - T_{imp} = (T_{init} - T_{imp}) \operatorname{erf} \left( \frac{x}{2\sqrt{a^s t}} \right) \quad (\text{III.3.21})$$

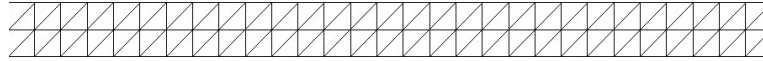
avec  $a^s = \kappa^s / (\rho_0 c_p^s)$ .

Cette solution analytique est obtenue pour un domaine 1D : une demi-droite de longueur infinie. La solution numérique est quant à elle calculée sur un domaine fini 2D. Pour se rapprocher d'un cas 1D, la longueur  $l$  du domaine doit être nettement supérieure à sa hauteur  $h$  :  $h/l \ll 1$ . De plus, la longueur doit être suffisamment grande pour que la température sur la frontière droite ne subisse pas de changements trop prononcés lors de la résolution. La barre considérée est donc une barre 2D de  $1 \times 500 \text{ mm}^2$  représentée à la figure III.7(a).

Pour les simulations, la barre a été discrétisée avec un maillage structuré régulier dont la taille de maille est de  $5 \times 10^{-4} \text{ m}$  (figure III.7(b)). La température  $T_{imp}$  a été imposée sur sa paroi latérale gauche. Un flux nul est appliqué sur les autres parois (figure III.7(a)). Les propriétés du matériau sont données dans le tableau III.1. Elles correspondent aux caractéristiques de l'alliage de titane VT3-1 (Ti-6.5Al-2.5Mo-1.5Cr-0.5Fe-0.3Si). La température initiale  $T_{init}$  étant inférieure à la température du solidus, seules les valeurs se rapportant au solide sont utilisées. Le pas de temps  $\Delta t$  est constant fixé à  $0.1 \text{ s}$ .



(a) Géométrie et conditions aux limites



(b) Vue partielle du maillage structuré régulier ; taille de maille :  $5 \times 10^{-4} m$

**Fig. III.7:** Géométrie, conditions aux limites et vue partielle du maillage pour le refroidissement de la barre

**Tab. III.1:** Propriétés physiques du VT3-1

Conductivité thermique		
pour le solide $\kappa^s$	10.0	$W.m^{-1}.K^{-1}$
pour le liquide $\kappa^l$	35.0	$W.m^{-1}.K^{-1}$
Capacité calorifique		
pour le solide $c_p^s$	600.0	$J.kg^{-1}.K^{-1}$
pour le liquide $c_p^l$	1200.0	$J.kg^{-1}.K^{-1}$
Masse volumique $\rho_0$	4500.0	$kg.m^{-3}$
Température du solidus $T_{sol}$	1550.0	°C
Température du liquidus $T_{liq}$	1620.0	°C
Température de fusion $T_f$	1668.0	°C
Chaleur latente de fusion $L$	355000.0	$J.kg^{-1}$

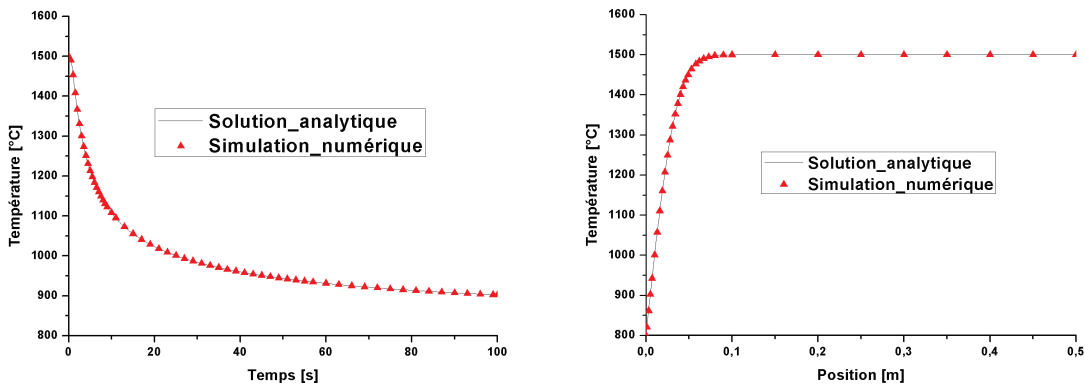
Le refroidissement brutal de la barre peut entraîner numériquement l'apparition d'un choc thermique, c'est-à-dire l'obtention d'une température supérieure à la température initiale à un ou plusieurs nœuds, ce qui est physiquement impossible. La condition numérique pour qu'il n'y ait pas de choc thermique est la suivante [Ali00] [Pel05] :

$$2\sqrt{a \Delta t} > h_{mai} \quad (\text{III.3.22})$$

avec  $a = \kappa / (\rho c_p)$  la diffusivité thermique.

Avec les paramètres de simulation et le maillage choisis, la condition III.3.22 est vérifiée et donc aucun choc n'apparaît.

Les résultats de la simulation numérique et ceux de la solution analytique sont comparés à la figure III.8 sous la forme de deux graphiques représentant l'évolution dans le temps de la température en  $x = 5 \text{ mm}$  et le profil de température dans la barre à  $t = 100 \text{ s}$ . La solution analytique et la simulation numérique correspondent. L'écart relatif entre les deux courbes est inférieur à 0.1%.



(a) Evolution de la température en  $x = 5 \text{ mm}$

(b) Profil de température à  $t = 100 \text{ s}$

**Fig. III.8:** Comparaison des solutions analytiques et numériques pour le refroidissement de la barre sans changement de phase

### III.3.4.2 Solidification d'une barre

Le test numérique est le même que précédemment sauf que la température initiale est égale à  $1650^\circ\text{C}$ , température supérieure à la température de solidus du matériau. Le refroidissement à  $800^\circ\text{C}$  s'accompagne alors d'un changement de phase liquide à solide. L'équation de conservation de l'énergie à résoudre est alors :

$$\rho_0 \frac{\partial \langle h \rangle}{\partial t} - \nabla \cdot (\langle \kappa \rangle \nabla T) = 0 \quad (\text{III.3.23})$$

E.N. Kondrashov fournit une solution analytique de ce problème [Kon06]. Son expression est donnée en annexe D. Cette solution est basée sur les hypothèses suivantes :

- le transfert de chaleur est principalement conductif, le mouvement de chaque phase est négligé, sa diffusion se fait de manière isotrope ;

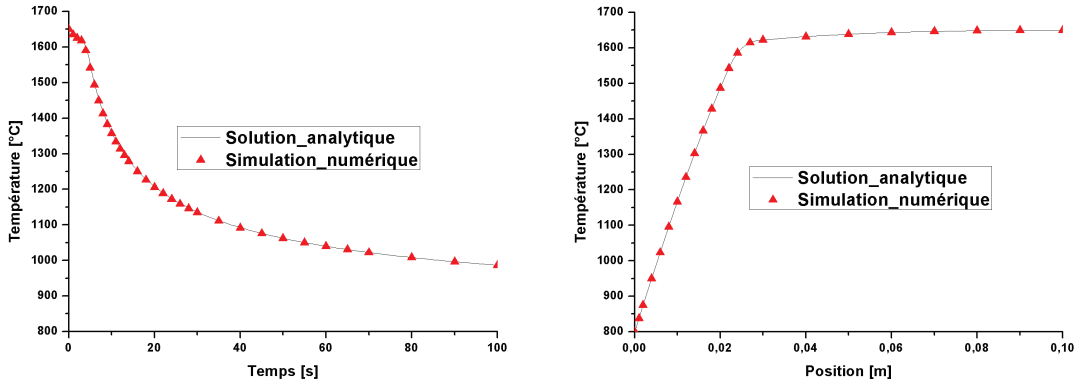
- la tension de surface à l'interface solide/liquide est négligeable ;
- les propriétés thermophysiques du matériau sont constantes au sein du solide et du liquide, dans le pâteux, chaque propriété  $\phi(T)$  est obtenue par une loi de mélange linéaire :

$$\phi(T) = (1 - g^l(T)) \phi^s + g^l(T) \phi^l$$

où  $g^l(T)$  est connue à l'avance ;

- la masse volumique  $\rho$  est inchangée entre les deux phases (les fractions massiques et volumiques sont donc confondues).

De même que pour le refroidissement simple de la barre, il n'y a pas de choc thermique. La solution analytique et les résultats numériques sont comparés à la figure III.9. Solution analytique et simulation numérique se superposent. L'écart entre les résultats est inférieur à 0.1%.



(a) Evolution de la température en  $x = 5 \text{ mm}$

(b) Profil de température à  $t = 100 \text{ s}$

**Fig. III.9:** Comparaison des solutions analytiques et numériques pour le refroidissement de la barre avec changement de phase

### III.3.4.3 Convection naturelle

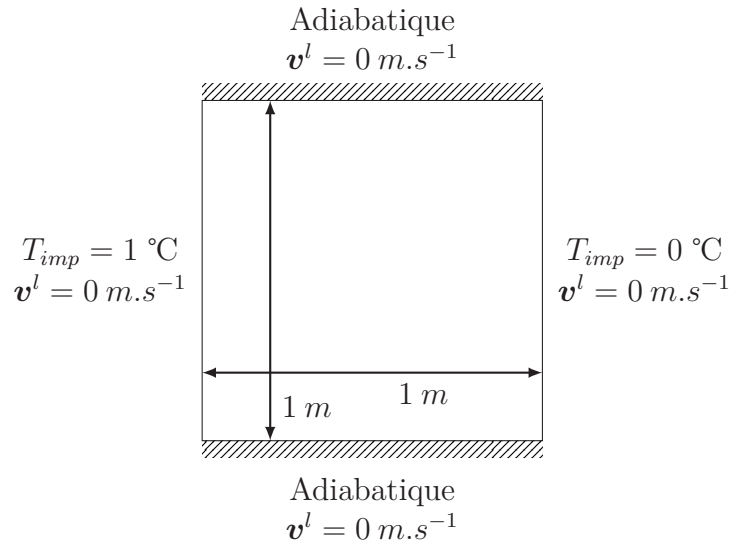
Il s'agit de tester la résolution de la conservation de l'énergie avec une vitesse non nulle. Le cas de référence est fourni par [Dav83]. Il consiste à simuler la convection naturelle d'un fluide dans une cavité carrée. Il nécessite de résoudre la mécanique de fluides avec  $g^l = 1$  ( $\langle \mathbf{v}^l \rangle = \mathbf{v}^l$ ) et l'énergie. Les équations à résoudre sont rappelées ci-dessous :

$$\begin{cases} \rho_0 \left( \frac{\partial h^l}{\partial t} + c_p^l \nabla T \cdot \mathbf{v}^l \right) - \nabla \cdot (\kappa^l \nabla T) = 0 \\ \begin{cases} \rho_0 \frac{\partial \mathbf{v}^l}{\partial t} + \rho_0 \nabla \mathbf{v}^l \cdot \mathbf{v}^l - \nabla \cdot (\mu^l (\nabla \mathbf{v}^l + {}^T \nabla \mathbf{v}^l)) + \nabla p^l - \rho \mathbf{g} = 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{v}^l = 0 \end{cases} \end{cases} \quad (\text{III.3.24})$$

avec  $\rho = \rho_0 (1 - \beta_T (T - T_{ref}))$ .

Ce couplage thermomécanique permet de valider à la fois l'implémentation des équations de la mécanique des fluides avec  $g^l = 1$  et approximation de Boussinesq mais sans terme de Darcy ainsi que le solveur thermique avec des vitesses non nulles.

La cavité ainsi que les conditions aux limites thermiques et mécaniques sont représentées à la figure III.10. Les propriétés physiques sont données au tableau III.2, correspondant à un nombre de Rayleigh  $Ra$  égal à  $10^4$ , ordre de grandeur de  $Ra$  en solidification. Deux maillages ont servi aux simulations. Il s'agit des mêmes maillages que ceux utilisés pour la cavité entraînée (figure III.4(b) et III.4(c)). La température initiale est de  $0.5\text{ °C}$ . Le pas de temps est pris constant égal à  $0.1\text{ s}$ .



**Fig. III.10:** Géométrie et conditions aux limites pour le cas de De Vahl Davis

**Tab. III.2:** Propriétés physiques pour le cas de De Vahl Davis

Masse volumique $\rho_0$	1.0	$kg.m^{-3}$
Viscosité dynamique $\mu^l$	$0.71 \times 10^{-2}$	$Pa.s$
Conductivité thermique $\kappa^l$	1.0	$W.m^{-1}.K^{-1}$
Capacité calorifique $c_p^l$	100	$J.kg^{-1}.K^{-1}$
Coefficient de dilatation thermique $\beta_T$	$7.1 \times 10^{-2}$	$K^{-1}$
Température de référence $T_{ref}$	0.5	$°C$

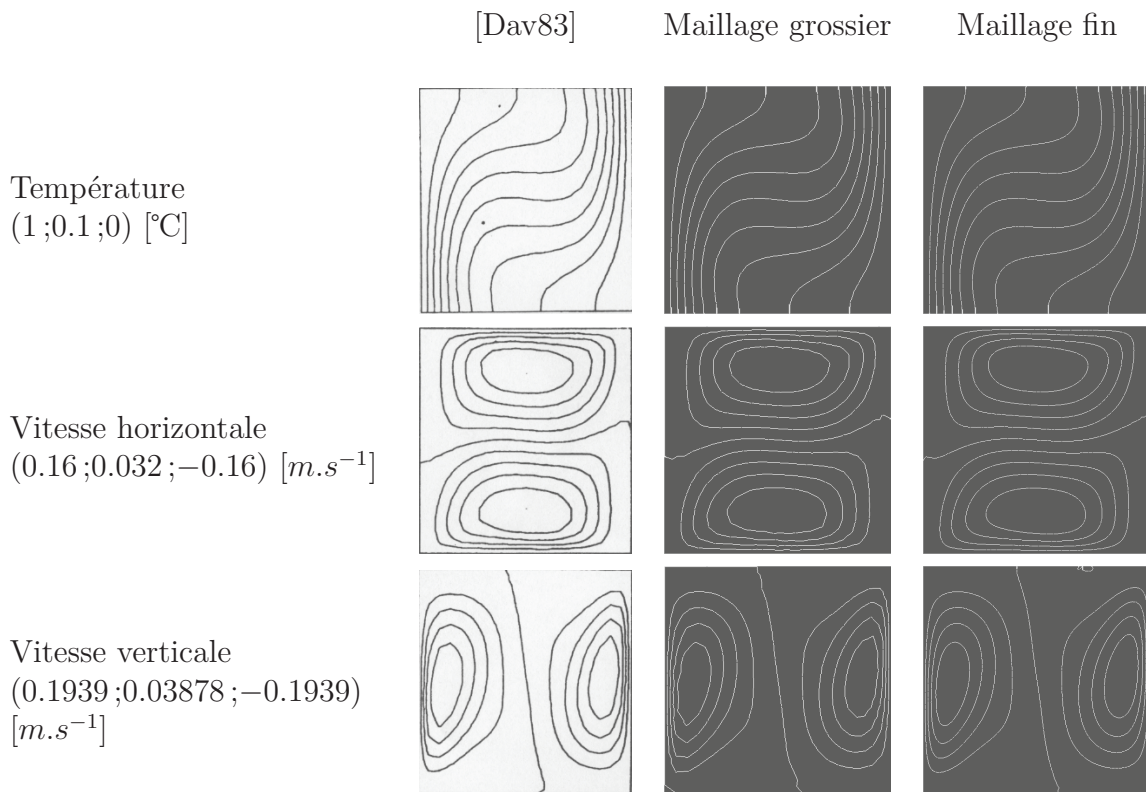
Les résultats sont comparés lorsque l'état stationnaire est atteint. Numériquement cela signifie que les deux conditions suivantes sont vérifiées :

$$\begin{cases} \max_{\Omega} |T^t - T^{t-\Delta t}| \leq 10^{-6} \text{ °C} \\ \max_{\Omega} \|\mathbf{v}^{lt} - \mathbf{v}^{lt-\Delta t}\| \leq 10^{-6} \text{ m.s}^{-1} \end{cases} \quad (\text{III.3.25})$$

Les isoplèthes de température, de vitesse horizontale ( $v_x^l$ ) et verticale ( $v_y^l$ ) sont comparées avec celles de [Dav83] à la figure III.11. De gauche à droite de la cavité, la température varie



de 1 à 0 °C (pas de 0.1°C) et la vitesse verticale de 0.16 à  $-0.16 m.s^{-1}$  (pas de  $0.032 m.s^{-1}$ ). De haut en bas de la cavité, la vitesse horizontale varie de 0.1939 à  $-0.1939 m.s^{-1}$  (pas de  $0.03878 m.s^{-1}$ ). Les isoplèthes obtenues par la simulation numérique et celles de [Dav83] sont qualitativement très proches. Pour une comparaison quantitative des résultats, De Vahl Davis indique dans [Dav83] la valeur et la position du maximum pour la vitesse horizontale et verticale. Que ce soit pour le maillage fin ou grossier, les résultats sont en accord avec [Dav83] comme indiqué au tableau III.3.



**Fig. III.11:** Comparaison des isoplèthes de température et de vitesses pour De Vahl Davis

**Tab. III.3:** Comparaison des maxima et leur position pour De Vahl Davis

		Maximum	
		Valeur	Position
		$[m.s^{-1}]$	$([m]; [m])$
Vitesse horizontale			
	[Dav83]	0.1618	(0.5; 0.824)
	Maillage grossier	0.1616	(0.493; 0.816)
	Maillage fin	0.1610	(0.479; 0.824)
Vitesse verticale			
	[Dav83]	0.1959	(0.118; 0.5)
	Maillage grossier	0.1949	(0.113; 0.46)
	Maillage fin	0.1942	(0.114; 0.479)

## III.4 Résolution de la conservation des espèces chimiques

### III.4.1 Formulation forte

L'équation de conservation des espèces chimiques sur le domaine  $\Omega$  s'écrit :

$$\frac{\partial \langle \rho w_i \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \langle \rho w_i \mathbf{v} \rangle - \nabla \cdot (\langle D_i^l \rangle \nabla (\rho^l w_i^l)) = 0 \quad (\text{III.4.1})$$

En suivant le même raisonnement que pour la conservation de l'énergie (Annexe B) et en remarquant que  $w^l - w^s = w^l(1 - k)$  (approximation loi des leviers), l'équation III.4.1 s'écrit aussi :

$$\langle \rho \rangle \frac{\partial \langle w_i \rangle_m}{\partial t} + \langle \rho \mathbf{v} \rangle \cdot \nabla \langle w_i \rangle_m + \nabla \cdot ((1 - k_i) f^s f^l \langle \rho \rangle (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) w_i^l - g^l D_i^l \nabla (\rho^l w_i^l)) = 0 \quad (\text{III.4.2})$$

Le premier terme de divergence se décompose en la somme de deux termes :

$$\begin{aligned} \nabla \cdot ((1 - k_i) f^s f^l \langle \rho \rangle (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) w_i^l) = \\ (1 - k_i) f^s f^l \langle \rho \rangle w_i^l \nabla \cdot (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) + (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) \cdot \nabla ((1 - k_i) f^s f^l \langle \rho \rangle w_i^l) \end{aligned} \quad (\text{III.4.3})$$

On simplifie ensuite  $\nabla ((1 - k_i) f^s f^l \langle \rho \rangle w_i^l)$  par  $(1 - k_i) f^s f^l \langle \rho \rangle \nabla w_i^l$ .

Le terme  $\nabla (\rho^l w_i^l)$  est transformé en  $\rho^l \nabla w_i^l$  en négligeant la contribution de  $w_i^l \nabla \rho^l$ .

L'équation de conservation des espèces chimiques à résoudre est donc la suivante :

$$\begin{aligned} \langle \rho \rangle \frac{\partial \langle w_i \rangle_m}{\partial t} + \langle \rho \mathbf{v} \rangle \cdot \nabla \langle w_i \rangle_m + (1 - k_i) f^s f^l \langle \rho \rangle w_i^l \nabla \cdot (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) \\ + (1 - k_i) f^s f^l \langle \rho \rangle (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) \cdot \nabla w_i^l - \nabla \cdot (g^l D_i^l \rho^l \nabla (w_i^l)) = 0 \end{aligned} \quad (\text{III.4.4})$$

De même que pour l'équation de conservation de l'énergie, deux variables principales constituent l'équation III.4.4 :  $\langle w_i \rangle_m$  et  $w_i^l$ . La résolution de III.4.4 ne peut se faire que

suivant l'une ou l'autre de ces variables. Le choix s'est porté ici sur  $\langle w_i \rangle_m$  car plus flexible dans le choix du modèle de microségrégation. Afin d'éliminer  $w_i^l$  de III.4.4, l'équation III.4.4 est transformée suivant la méthode de séparation de Voller-Prakash [Vol89] ( $w_i^l = \langle w_i \rangle_m - \langle w_i \rangle_m^{t-\Delta t} + w_i^{l,t-\Delta t}$ ) :

$$\begin{aligned} & \langle \rho \rangle \frac{\partial \langle w_i \rangle_m}{\partial t} + \langle \rho \mathbf{v} \rangle \cdot \nabla \langle w_i \rangle_m + (1 - k_i) f^s f^l \langle \rho \rangle \langle w_i \rangle_m \nabla \cdot (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) \\ & \quad + (1 - k_i) f^s f^l \langle \rho \rangle (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) \cdot \nabla \langle w_i \rangle_m - \nabla \cdot (g^l D_i^l \rho^l \nabla (\langle w_i \rangle_m)) \\ & \quad = (1 - k_i) f^s f^l \langle \rho \rangle \left( \langle w_i \rangle_m^{t-\Delta t} - w_i^{l,t-\Delta t} \right) \nabla \cdot (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) \\ & + (1 - k_i) f^s f^l \langle \rho \rangle (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) \cdot \nabla \left( \langle w_i \rangle_m^{t-\Delta t} - w_i^{l,t-\Delta t} \right) - \nabla \cdot \left( g^l D_i^l \rho^l \nabla \left( \langle w_i \rangle_m^{t-\Delta t} - w_i^{l,t-\Delta t} \right) \right) \end{aligned} \quad (\text{III.4.5})$$

Cette séparation nécessite de prendre des pas de temps petits. La formulation forte du problème est :

Trouver  $\langle w_i \rangle_m$  telle que :

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle \rho \rangle \frac{\partial \langle w_i \rangle_m}{\partial t} + \langle \rho \mathbf{v} \rangle \cdot \nabla \langle w_i \rangle_m + (1 - k_i) f^s f^l \langle \rho \rangle \langle w_i \rangle_m \nabla \cdot (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) \\ \quad + (1 - k_i) f^s f^l \langle \rho \rangle (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) \cdot \nabla \langle w_i \rangle_m - \nabla \cdot (g^l D_i^l \rho^l \nabla (\langle w_i \rangle_m)) = S_w \\ \\ S_w = (1 - k_i) f^s f^l \langle \rho \rangle \left( \langle w_i \rangle_m^{t-\Delta t} - w_i^{l,t-\Delta t} \right) \nabla \cdot (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) \\ \quad + (1 - k_i) f^s f^l \langle \rho \rangle (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) \cdot \nabla \left( \langle w_i \rangle_m^{t-\Delta t} - w_i^{l,t-\Delta t} \right) \\ \quad - \nabla \cdot \left( g^l D_i^l \rho^l \nabla \left( \langle w_i \rangle_m^{t-\Delta t} - w_i^{l,t-\Delta t} \right) \right) \\ \\ \langle w_i \rangle = w_{imp_i} \text{ sur } \partial\Omega_{w_i} \text{ (concentration imposée)} \\ - \langle D_i^l \rangle \nabla \langle w_i \rangle = \phi_{imp_i} \text{ sur } \partial\Omega_{j_i} \text{ (flux imposée)} \\ \partial\Omega_{w_i} \text{ et } \partial\Omega_{j_i} \text{ forment une partition de } \partial\Omega \end{array} \right. \quad (\text{III.4.6})$$

### III.4.2 Formulation faible

La formulation faible est obtenue par multiplication par des fonctions-test similaires à celles utilisées pour la formulation faible de la conservation de l'énergie afin de stabiliser la résolution :

$$w_{SUPG}^* = w_i^* + \tau \tilde{\mathbf{v}}_{centre} \cdot \nabla w_i^* \quad (\text{III.4.7})$$

avec  $w_i^* \in \mathcal{W}_i^0 = \{f, f \in H^1(\Omega) \text{ et } f|_{\partial\Omega_{w_i}} = 0\}$ .

Le paramètre de stabilisation  $\tau$  est calculé de la même manière que pour l'énergie mais avec le nombre de Péclet de maille égal à :

$$Pe_{mai} = \frac{h_{mai} \|\tilde{\mathbf{v}}_{centre}\|}{D_i^l} \quad (\text{III.4.8})$$

La formulation faible du problème de conservation des espèces chimiques s'écrit :

Trouver  $\langle w_i \rangle_m \in \mathcal{W}_i = \{f, f \in H^1(\Omega) \text{ et } f|_{\partial\Omega_{w_i}} = w_{imp_i}\}$  telle que

$$\begin{aligned}
 \forall w_i^* \in \mathcal{W}_i^0 \quad & \int_{\Omega} \langle \rho \rangle \left( \frac{\partial \langle w_i \rangle}{\partial t} + (1 - k_i) f^s f^l \nabla \cdot (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) \langle w_i \rangle \right) w_i^* \, d\Omega \\
 & + \int_{\Omega} (\langle \rho \mathbf{v} \rangle + (1 - k_i) f^s f^l \langle \rho \rangle (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s)) \cdot \nabla \langle w_i \rangle w_i^* \, d\Omega \quad (\text{III.4.9}) \\
 & - \int_{\Omega} g^l D_i^l \rho^l \nabla \langle w_i \rangle \cdot \nabla w_i^* \, d\Omega + \int_{\partial\Omega_j} w_i^* \phi_{imp} \, dS - \int_{\Omega} w_i^* S_w \, d\Omega \\
 & + \int_{\Omega} \tau \tilde{\mathbf{v}}_{centre} \cdot \nabla w_i^* \left( \langle \rho \rangle \frac{\partial \langle w_i \rangle}{\partial t} + \langle \rho \mathbf{v} \rangle \cdot \nabla \langle w_i \rangle \right) + \dots \\
 & \quad \dots - \nabla \cdot (g^l D_i^l \nabla \langle w_i \rangle) + (1 - k) f^s f^l \langle \rho \rangle \langle w_i \rangle \nabla \cdot (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) + \dots \\
 & \quad \dots + (1 - k_i) f^s f^l \langle \rho \rangle (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) \cdot \nabla \langle w_i \rangle - S_w \Big) \, d\Omega \\
 & = 0
 \end{aligned}$$

### III.4.3 Discrétisation

Munie des espaces,  $\mathcal{W}_{i h} = \{f_h, f_h \in C^0(\Omega), f_h|_{\Omega_e} \in \mathbb{P}_1(\Omega_e)\}$  et  $f_h|_{\partial\Omega_{w_i}} = w_{imp_i}\}$  et  $\mathcal{W}_{i h}^0 = \{f_h, f_h \in C^0(\Omega), f_h|_{\Omega_e} \in \mathbb{P}_1 \text{ et } f_h|_{\partial\Omega_{w_i}} = 0\}$ , la discrétisation s'écrit comme la formulation faible en remplaçant  $\mathcal{W}_i$ ,  $\mathcal{W}_{i h}^0$ ,  $w_i^*$ ,  $\langle w_i \rangle_m$  par  $\mathcal{W}_{i h}$ ,  $\mathcal{W}_{i h}^0$ ,  $w_{i h}^*$ ,  $\langle w_i \rangle_{m h}$  respectivement.

### III.4.4 Cas de validation

Le solveur solutal a été dérivé, moyennant quelques modifications, d'un autre solveur développé et validé par Elie Hachem pendant sa thèse [Hac09]. De plus, l'équation résolue par le solveur solutal est de même type que celle du solveur énergétique. Toutes les deux sont des équations de transport-diffusion. Le solveur énergétique ayant déjà fait l'objet de tests (section III.3.4), le solveur solutal n'a donc pas été retesté pour des cas intermédiaires. Il a été directement utilisé pour des cas complexes.

## III.5 Résolution de la mécanique du solide

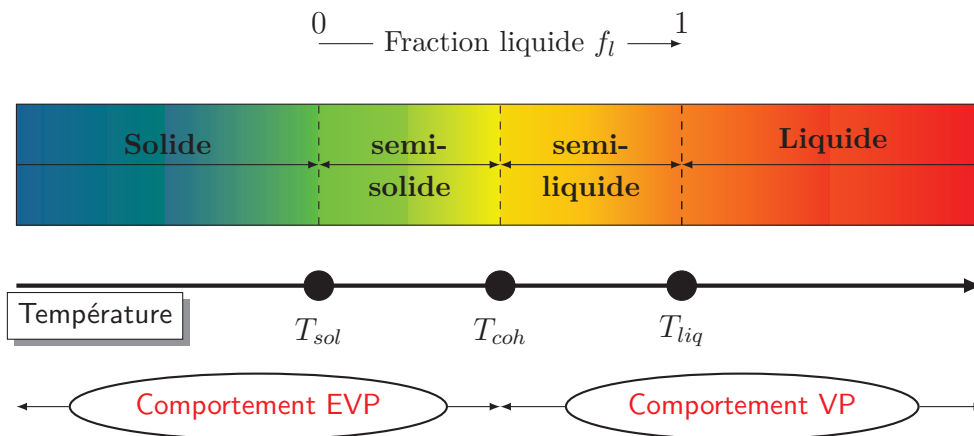
La résolution de la mécanique du solide a été entièrement réalisée par Theracast<sup>®</sup>. Le logiciel résout la conservation de la quantité de mouvement et de la masse à la fois pour les phases solide et liquide. Il calcule ainsi une vitesse globale  $\mathbf{v}$  qui correspond à une vitesse solide dans le solide, une vitesse liquide dans le liquide et une vitesse mixte dans

le domaine pâteux. De cette résolution, seules les vitesses dans le solide et dans le pâteux seront gardées et assimilées à  $\mathbf{v}^s$  pour le calcul global de macroségrégation. La vitesse calculée pour le liquide n'est pas retenue car des problèmes de convergence apparaissent pour des viscosités du liquide  $\leq 1 Pa.s$ . Or dans notre cas, la viscosité du liquide est de l'ordre de  $10^{-3} Pa.s$ . C'est la raison pour laquelle la vitesse du liquide est calculée par la mécanique des fluides dans un module complémentaire à Thercast<sup>®</sup>, développé avec CimLib<sup>®</sup>, dans lequel sont résolues les équations développées à la section III.2. Dans la suite de cette section, la résolution thermomécanique de Thercast<sup>®</sup> est détaillée. Cette résolution a été mise en place par Olivier Jaouen au cours de sa thèse [Jao98]. Elle repose sur la modélisation du comportement des aciers par des lois de type viscoplastique ou élasto-viscoplastique.

### III.5.1 Loi de comportement des aciers

L'acier au cours de son refroidissement passe par trois états : liquide, pâteux et solide. Dans la résolution proposée par Thercast<sup>®</sup>, le comportement de l'acier varie en fonction de ces trois états comme illustré à la figure III.12 :

- comportement de type viscoplastique (VP) lorsque le matériau est liquide ou pâteux.
- comportement de type élasto-viscoplastique (EVP) pour l'état solide.



**Fig. III.12:** Comportement du métal en fonction de la température (approche utilisée par Thercast<sup>®</sup>)

Le passage entre les comportements EVP et VP s'opère à la température  $T_c$  dont le choix est arbitraire. Cette température peut éventuellement correspondre à la température de cohérence  $T_{cohe}$  à laquelle le squelette solide formé est capable de supporter une déformation. Mais très souvent, le choix  $T_c = T_{sol}$  est effectué.

Ces lois de comportement doivent tenir compte des variations de différents coefficients rhéologiques. De plus, le matériau subit des dilatations thermiques importantes et non négligeables en particulier à l'état solide. Le tenseur des vitesses de déformation  $\dot{\epsilon}$  est

donc décomposé linéairement comme suit :

$$\dot{\mathbf{c}} = \dot{\mathbf{c}}^* + \dot{\mathbf{c}}^{th}$$

avec

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{c}}^* &= \dot{\mathbf{c}}^{vp} && \text{pour la loi de type viscoplastique} \\ \dot{\mathbf{c}}^* &= \dot{\mathbf{c}}^{vp} + \dot{\mathbf{c}}^{el} && \text{pour la loi de type élasto-viscoplastique} \\ \dot{\mathbf{c}}^{th} &&& \text{le tenseur sphérique des vitesses de dilatation thermique} \end{aligned}$$

Le tenseur des vitesses de dilatation thermique  $\dot{\mathbf{c}}^{th}$  s'exprime de la façon suivante :

$$\dot{\mathbf{c}}^{th} = -\frac{1}{3\langle\rho\rangle} \frac{d\langle\rho\rangle}{dt} \mathbb{1}$$

avec, en dehors de l'intervalle de solidification,  $\langle\rho\rangle = \rho^s(T)$  ou  $\langle\rho\rangle = \rho^l(T)$ . Dans l'intervalle de solidification, on a :

$$\begin{aligned} \langle\rho\rangle &= g^s \rho^s(T_{sol}) + g^l \rho^l(T_{liq}) \\ &= g^s \rho_{sol} + g^l \rho_{liq} \end{aligned}$$

$$\text{et } \dot{\mathbf{c}}^{th} \text{ devient alors } \dot{\mathbf{c}}^{th} = -\frac{1}{3\langle\rho\rangle} \frac{d\langle\rho\rangle}{dt} \mathbb{1} = -\frac{1}{3\langle\rho\rangle} (\rho_{sol} - \rho_{liq}) \frac{dg^s}{dt} \mathbb{1}.$$

Connaissant  $\dot{\mathbf{c}}^{th}$ , il reste à détailler l'expression de  $\dot{\mathbf{c}}^*$  pour les lois viscoplastique et élasto-viscoplastique.

### Loi de comportement de type élasto-viscoplastique

Le tenseur des vitesses de déformations se décompose donc de manière additive en la somme de trois termes :

$$\dot{\mathbf{c}} = \dot{\mathbf{c}}^{vp} + \dot{\mathbf{c}}^{el} + \dot{\mathbf{c}}^{th}$$

La partie élastique de  $\dot{\mathbf{c}}$  est liée à la dérivée temporelle des contraintes par la loi de Hooke :

$$\dot{\mathbf{c}}^{el} = \mathbb{E}^{-1} \dot{\mathbf{\sigma}} = \frac{1+\nu}{E} \dot{\mathbf{\sigma}} - \frac{\nu}{E} \text{Tr}(\dot{\mathbf{\sigma}}) \mathbb{1} \quad (\text{III.5.1})$$

$\mathbb{E}$  est le tenseur d'élasticité d'ordre 4 dont les composantes dépendent de  $E$ , le module d'Young et de  $\nu$ , le coefficient de poisson.  $\dot{\mathbf{\sigma}}$  désigne la dérivée temporelle du tenseur des contraintes de Cauchy  $\mathbf{\sigma}$  (cette dérivée, bien que non objective, est admissible dans notre étude, les rotations et déformations incrémentales étant très faibles).

Or  $\mathbb{E} = \mathbb{E}(T)$ . Comme  $T$  varie au cours du temps,  $\mathbb{E}$  aussi. Par conséquent, la loi de Hooke s'écrira sous cette forme :

$$\dot{\mathbf{c}}^{el} = \mathbb{E}^{-1} \dot{\mathbf{\sigma}} + \dot{T} \frac{\partial \mathbb{E}^{-1}}{\partial T} \mathbf{\sigma} \quad (\text{III.5.2})$$

où la deuxième partie de l'expression représente la prise en compte de la variation pendant l'incrément de temps, des coefficients rhéologiques de la loi de comportement. Ceci constitue un couplage plus prononcé entre les phénomènes thermiques et les phénomènes

mécaniques que dans III.5.1.

La partie viscoplastique de  $\dot{\mathbf{e}}$ , de trace nulle, s'écrit en se référant à un potentiel de viscoplasticité de type Perzyna [Rap03] :

$$\dot{\mathbf{e}}^{vp} = \lambda(\mathfrak{s}) \mathfrak{s} \quad (\text{III.5.3})$$

avec  $\lambda$ , le multiplicateur plastique, donné par :

$$\lambda(\mathfrak{s}) = \frac{\sqrt{3}}{2\sigma_{eq}} \left\langle \left\langle \frac{\sigma_{eq} - \sigma_s}{K(T)\bar{\varepsilon}^{n(T)}\sqrt{3}} \right\rangle \right\rangle^{1/m(T)} \quad (\text{III.5.4})$$

où  $K(T)$  est la consistance du matériau,  $m(T)$  la sensibilité de la contrainte d'écoulement à la vitesse de déformation et la fonction qui à  $\langle\langle x \rangle\rangle$  donne la valeur de  $x$  pour  $x > 0$  ou 0 sinon.

D'après l'équation III.5.3, l'écoulement plastique n'apparaît que si la contrainte de von Mises est supérieure au seuil d'écoulement statique  $\sigma_s$ . Sachant que la contrainte d'écoulement de von Mises est donnée par  $\sigma_{eq} = \sqrt{\frac{3}{2}} \mathfrak{s} : \mathfrak{s}$  et que la vitesse de déformation généralisée a pour expression  $\dot{\bar{\varepsilon}} = \sqrt{\frac{2}{3}} \dot{\mathbf{e}}^{vp} : \dot{\mathbf{e}}^{vp}$ , la forme monodimensionnelle de l'équation III.5.3 s'écrit par :

$$\sigma_{eq} = \sigma_s + K(T)\sqrt{3}^{m(T)+1} \bar{\varepsilon}^{m(T)} \bar{\varepsilon}^{n(T)}$$

### Loi de comportement de type viscoplastique

Les déformations d'origine élastique sont négligées et les équations de la loi de comportement VP peuvent alors s'écrire de la façon suivante :

$$\dot{\mathbf{e}} = \dot{\mathbf{e}}^{vp} + \dot{\mathbf{e}}^{th}$$

avec  $\dot{\mathbf{e}}^{vp}$  donné par la loi de Norton-Hoff :

$$\dot{\mathbf{e}}^{vp} = \frac{1}{2K_{vp}(T)} \left( \sqrt{3}\dot{\bar{\varepsilon}} \right)^{1-m(T)} \mathfrak{s} \quad (\text{III.5.5})$$

Remarque : dans l'équation III.5.5, quand  $m(T) = 1$ , on retrouve l'expression du tenseur des taux de déformation newtonien. Ceci correspond à l'état purement liquide de l'alliage, pour lequel  $K_{vp}$  est donc égal à la viscosité dynamique.

## III.5.2 Résolution thermomécanique

La conservation de la quantité de mouvement et de la masse s'écrit sur le domaine  $\Omega$  :

$$\begin{cases} \nabla \cdot (\mathfrak{s}) - \nabla p + \langle \rho \rangle \mathbf{g} - \langle \rho \rangle \frac{d\mathbf{v}}{dt} = 0 \\ \text{Tr}(\dot{\mathbf{e}}^{vp}) = 0 \end{cases} \quad (\text{III.5.6})$$

avec

- pour le comportement élasto-viscoplastique :

$$\begin{aligned}\text{Tr}(\dot{\mathbf{e}}^{vp}) &= \text{Tr}(\dot{\mathbf{e}}) - \text{Tr}(\dot{\mathbf{e}}^{el}) - \text{Tr}(\dot{\mathbf{e}}^{th}) \\ &= \nabla \cdot \mathbf{v} - \text{Tr}(\dot{\mathbf{e}}^{el}) - \frac{1}{\langle \rho \rangle} \frac{d\langle \rho \rangle}{dt}\end{aligned}$$

De III.5.1 et III.5.2, on déduit que :  $\text{Tr}(\dot{\mathbf{e}}^{el}) = -\frac{\dot{p}}{\chi} + \frac{\dot{\chi}}{\chi^2}p$  où  $\chi = \frac{E}{3(1-2\nu)}$

Donc :

$$\text{Tr}(\dot{\mathbf{e}}^{vp}) = \nabla \cdot \mathbf{v} + \frac{\dot{p}}{\chi} - \frac{\dot{\chi}}{\chi^2}p - \frac{1}{\langle \rho \rangle} \frac{d\langle \rho \rangle}{dt}$$

- pour le comportement viscoplastique :

$$\begin{aligned}\text{Tr}(\dot{\mathbf{e}}^{vp}) &= \text{Tr}(\dot{\mathbf{e}}) - \text{Tr}(\dot{\mathbf{e}}^{th}) \\ &= \nabla \cdot \mathbf{v} - \frac{1}{\langle \rho \rangle} \frac{d\langle \rho \rangle}{dt}\end{aligned}$$

La formulation faible du problème est :

Trouver  $\mathbf{v} \in \mathcal{V}$  et  $p \in \mathcal{P}$  telles que :

$$\begin{aligned}\forall \mathbf{v}^* \in \mathcal{V}^0 \\ \int_{\Omega} \left\{ \begin{array}{c} \mathfrak{S}^{evp} \\ \mathfrak{S}^{vp} \end{array} \right\} : \dot{\mathbf{e}}(\mathbf{v}^*) \, d\Omega - \int_{\Omega} p \nabla \cdot \mathbf{v}^* \, d\Omega - \int_{\partial\Omega_s} \mathbf{T}_{imp} \cdot \mathbf{v}^* \, dS + \int_{\Omega} \langle \rho \rangle \mathbf{g} \cdot \mathbf{v}^* \, d\Omega \\ - \int_{\Omega} \langle \rho \rangle \frac{d\mathbf{v}}{dt} \cdot \mathbf{v}^* \, d\Omega = 0\end{aligned}$$

$$\forall p^* \in \mathcal{P} \tag{III.5.7}$$

$$\int_{\Omega} p^* \left( \nabla \cdot \mathbf{v} + \left\{ \begin{array}{c} \frac{\dot{p}}{\chi} - \frac{\dot{\chi}}{\chi^2}p \\ 0 \end{array} \right\} - \frac{1}{\langle \rho \rangle} \frac{d\langle \rho \rangle}{dt} \right) d\Omega = 0 \tag{III.5.8}$$

La résolution du système III.5.7 est détaillée dans [Jao98], [Ali00] et [Cos04]. La résolution avec un comportement EVP se fait pour un élément dont la température au centre est inférieure à la température critique  $T_c$ . Dans le cas où la température au centre est supérieure à  $T_c$ , l'élément est considéré comme VP.

La résolution thermomécanique précédente fait intervenir la dérivée totale de la vitesse. A chaque pas de temps, la position des nœuds du maillage doit donc être actualisée par la vitesse  $\mathbf{v}$ . Or dans la zone viscoplastique, cette vitesse peut être importante et faire dégénérer le maillage. Il est donc nécessaire de désynchroniser le maillage de la matière. Cette désynchronisation est réalisée grâce à la méthode ALE.



### Méthode ALE

La méthode ALE consiste à actualiser le maillage de la manière suivante :

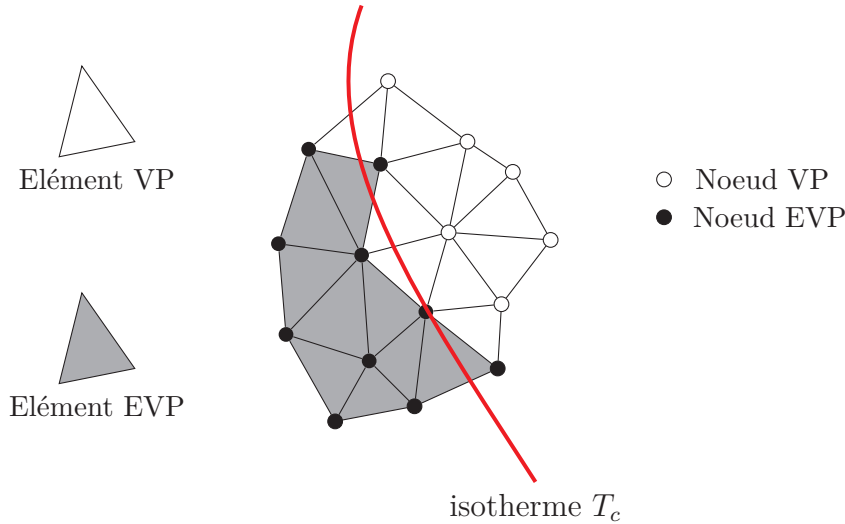
$$N^{t+\Delta t} = N^t + \mathbf{v}_{mai}\Delta t$$

avec  $N^{t+\Delta t}$ ,  $N^t$  la position des nœuds du nouveau et de l'ancien maillage, respectivement et  $\mathbf{v}_{mai}$  la vitesse de maillage.

La vitesse de maillage est calculée sous les contraintes suivantes, sachant que  $\mathbf{v}_{mat}$  est la vitesse obtenue lors de la résolution de III.5.7 :

1. pour les nœuds VP :  $\mathbf{v}_{mai} = f_{ale}(\mathbf{v}_{mat})$  avec la fonction  $f_{ale}$  permettant de minimiser la distortion des éléments du maillage actualisé. Son expression est donnée dans [Bel04].
2. pour les nœuds EVP :  $\mathbf{v}_{mai} = \mathbf{v}_{mat}$
3. sur la frontière  $\partial\Omega$  :  $\mathbf{v}_{mai} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{v}_{mat} \cdot \mathbf{n}$  où  $\mathbf{n}$  est la normale sortante au domaine.

Un nœud EVP est un nœud qui appartient à au moins un élément-EVP. Dans le cas contraire, le nœud est traité de manière VP. Un exemple pour une configuration 2D est donné à la figure III.13.



**Fig. III.13:** Noeud VP et EVP suivant leur appartenance aux éléments VP et EVP pour une configuration 2D [Bel04].

Cette actualisation du maillage par  $\mathbf{v}_{mai}$  implique un transport de la vitesse sur le nouveau maillage. En effet, la résolution du III.5.7 calcule la vitesse lagrangienne, c'est-à-dire  $\mathbf{v}_{mat} = \mathbf{v}(N_{Lag}^{t+\Delta t})$  telle que  $N_{Lag}^{t+\Delta t} = N^t + \mathbf{v}(N_{Lag}^{t+\Delta t})\Delta t$ . Or c'est la valeur de  $\mathbf{v}(N^{t+\Delta t})$  qui est recherchée. Cette vitesse est déterminée grâce à la relation ci-dessous :

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{\partial_{mai}\mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v}(N_{Lag}^{t+\Delta t}) - \mathbf{v}_{mai}) \cdot \nabla \mathbf{v}(N_{Lag}^{t+\Delta t}) \quad (\text{III.5.9})$$

où la dérivée lagrangienne s'exprime par

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{\mathbf{v}(N_{Lag}^{t+\Delta t}) - \mathbf{v}(N^t)}{\Delta t}$$

et la dérivée de grille par

$$\frac{\partial_{mai} \mathbf{v}}{\partial t} = \frac{\mathbf{v}(N^{t+\Delta t}) - \mathbf{v}(N^t)}{\Delta t}$$

Plus de détails sur la méthode ALE sont donnés dans [Jao98], [Bel04] et [Bel05b].

### III.5.3 Cas de validation

La résolution thermomécanique mise en œuvre dans Thericast<sup>®</sup> a été testée et validée par Olivier Jaouen au cours de sa thèse [Jao98]. Elle a également été utilisée avec succès pour les travaux de thèses de [Ali00] et [Cos04]. Aucun test supplémentaire n'a donc été entrepris.

### Conclusion partielle

Ce chapitre a permis de décrire les méthodes numériques employées pour résoudre les équations ainsi que la démarche adoptée pour aboutir à la simulation des macroségrégations en peau à solide déformable. La première partie de cette démarche, concernant la résolution des équations sur des cas simples, a été réalisée et les résultats obtenus sont proches de ceux des références. La seconde partie vise à tester la résolution sur des cas plus complexes. Ces cas sont tirés d'expériences présentées au chapitre suivant.



## IV

# Expériences pour comparaison avec les simulations numériques

Les expériences décrites dans ce chapitre font partie intégrante de la stratégie de validation des simulations. Cette stratégie se décompose en deux étapes : la première correspondant à la simulation de cas simples a été présentée au chapitre précédent. La seconde consiste à la simulation sur des cas complexes. Ces cas complexes sont tirés d'expériences afin de comparer résultats numériques et expérimentaux. Ces expériences concernent tout d'abord l'étude des macroségrégations à solide fixe, puis celle de la déformation du solide et enfin celle des macroségrégations à solide déformable.



## Sommaire

---

IV.1	Expérience pour la simulation des macroségrégations sans déformation du solide . . . . .	85
IV.2	Expérience pour la simulation de la déformation du premier voile solide	87
IV.3	Expériences pour la simulation des macroségrégations avec déformation du solide . . . . .	97

---



## IV.1 Expérience pour la simulation des macroségrégations sans déformation du solide

Cette partie concerne l'expérience qui a permis de mettre en place la simulation des macroségrégations à solide fixe et rigide. Dans la pratique, le solide se déforme mais les conditions expérimentales peuvent être ajustées afin de rendre négligeable cette déformation par rapport aux autres phénomènes engendrant la macroségrégation, notamment les mouvements de convection. Deux expériences où les mouvements de convection étaient le moteur principal de la macroségrégation peuvent servir de référence au calcul de la macroségrégation à solide fixe et rigide : celle de Hebditch & Hunt [Heb74], réalisée en 1973, et celle du laboratoire SIMaP (Science et Ingénierie des Matériaux et des Procédés) et détaillée dans [Wan06], [Wan07] et [Wan09]. L'expérience retenue comme référence ici est celle de Hebditch & Hunt car elle a déjà fait l'objet de précédents calculs par [Ahm98], [Liu05] et [Gou07]. La transposition numérique de l'expérience du SIMaP a été initiée dans un projet blanc de l'Agence Nationale de la Recherche actuellement en cours.

### Expérience de Hebditch & Hunt [Heb74]

L'expérience de Hebditch & Hunt avait pour but de suivre l'avancement de la solidification et des macroségrégations lors du refroidissement de lingots d'alliages métalliques. Elle a permis de mettre en lumière l'importance des mouvements de convection sur les macroségrégations. Les auteurs ont procédé au refroidissement de lingots de petites dimensions (10 cm de longueur, 6 cm de haut et 1.3 cm d'épaisseur) schématisés à la figure IV.1. Certains de ces lingots ont été brutalement refroidis au cours de la solidification afin d'obtenir un instantané des macroségrégations et de la structure cristalline comme montrés à la figure IV.2.

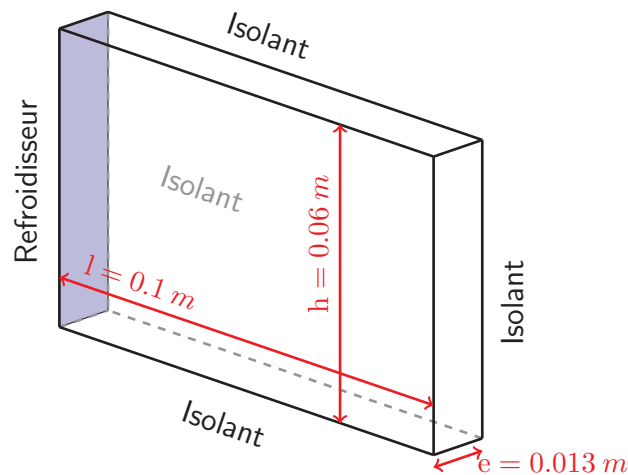
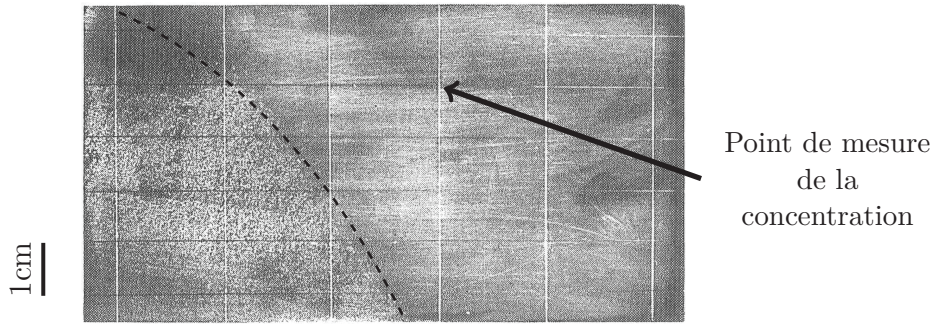


Fig. IV.1: Géométrie du lingot de Hebditch & Hunt

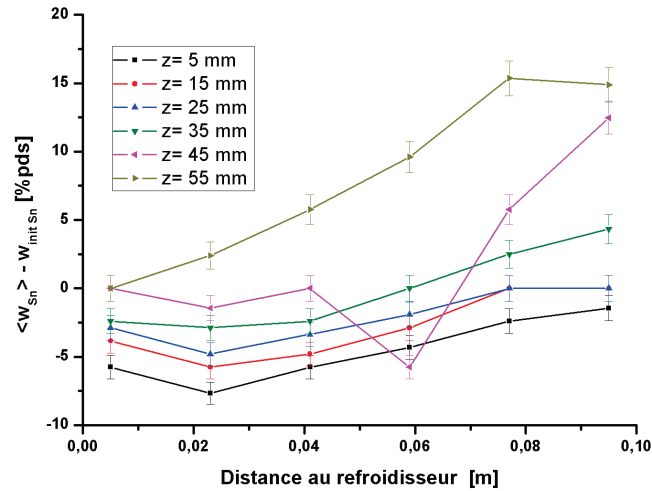




**Fig. IV.2:** Exemple d'un lingot de Pb-48%PdsSn après une trempe. Les pointillés représentent le front dendritique. Les points d'intersection de la grille correspondent aux points de mesure de la concentration [Heb74].

Le métal liquide est versé dans un moule chauffé puis reste dans le moule pendant une à deux heures afin que la température du liquide se stabilise à 1 ou 2 degrés au-dessus de la température du liquidus. Ensuite le refroidissement est déclenché. L'énergie est extraite par la paroi latérale gauche du lingot (paroi bleutée sur la figure IV.1) en limitant autant que possible les pertes thermiques par les autres parois. La solidification progressant, le lingot est brutalement refroidi à un temps choisi, figeant ainsi les macroségrégations. Des lingots ont aussi été complètement solidifiés sans trempe. Complètement solide, le lingot est demoulé puis raboté sur chacune des faces d'une épaisseur de 2 mm. Une attaque métallographique est ensuite effectuée afin de révéler la structure de solidification. La concentration des espèces chimiques a été mesurée en différents points du lingot suivant un quadrillage déterminé (figure IV.2) pour quantifier les macroségrégations. Les lignes horizontales de la grille sont espacées de 1.0 cm en commençant à 5 mm du bas du lingot. Les lignes verticales sont espacées de 1.8 cm en commençant à 0.5 cm du bord droit. A chaque intersection, un échantillon a été prélevé pour effectuer une mesure de concentration par spectrophotomètre à émission de flamme. L'échantillon ayant une taille supérieure à la microstructure, la concentration mesurée correspond donc à une concentration moyenne. Les concentrations mesurées sont précises à  $\pm 2\%$ .

L'expérience qui a servi de base à la simulation des macroségrégations à solide fixe est celle de la solidification complète sans trempe d'un lingot de Pb-48%Sn. A la figure IV.3 est tracé le profil horizontal de concentration mesurée à différentes hauteurs du lingot. On constate une macroségrégation positive en haut à droite du lingot et une macroségrégation négative en bas à gauche du lingot. Cette répartition de concentration s'explique par les mouvements de convection et la vitesse des isothermes (section I.3.2, page 25). Du fait du dispositif de refroidissement, les isothermes se propagent de la gauche vers la droite. Pour le Pb-48%PdsSn, le liquide circule dans le sens trigonométrique négatif car la composante solutale, associée à l'enrichissement de la phase liquide en étain, domine par rapport à la composante thermique. Le liquide et les isothermes se déplacent ainsi dans le même sens en haut de la cavité, ce qui conduit à une macroségrégation positive. En bas de la cavité, liquide et isothermes se déplacent en sens contraire ce qui génère une macroségrégation négative.



**Fig. IV.3:** Profils horizontaux de ségrégation d'un lingot de Pb-48%Sn après solidification sans trempe (incertitude de mesure  $\pm 2\%$  de la concentration mesurée) [Heb74]

## IV.2 Expérience pour la simulation de la déformation du premier voile solide

Cette section présente les expériences à partir desquelles la simulation de la déformation du premier voile solide a été construite. Ces expériences sont celles qui ont été réalisées au cours du projet CCEMLCC.

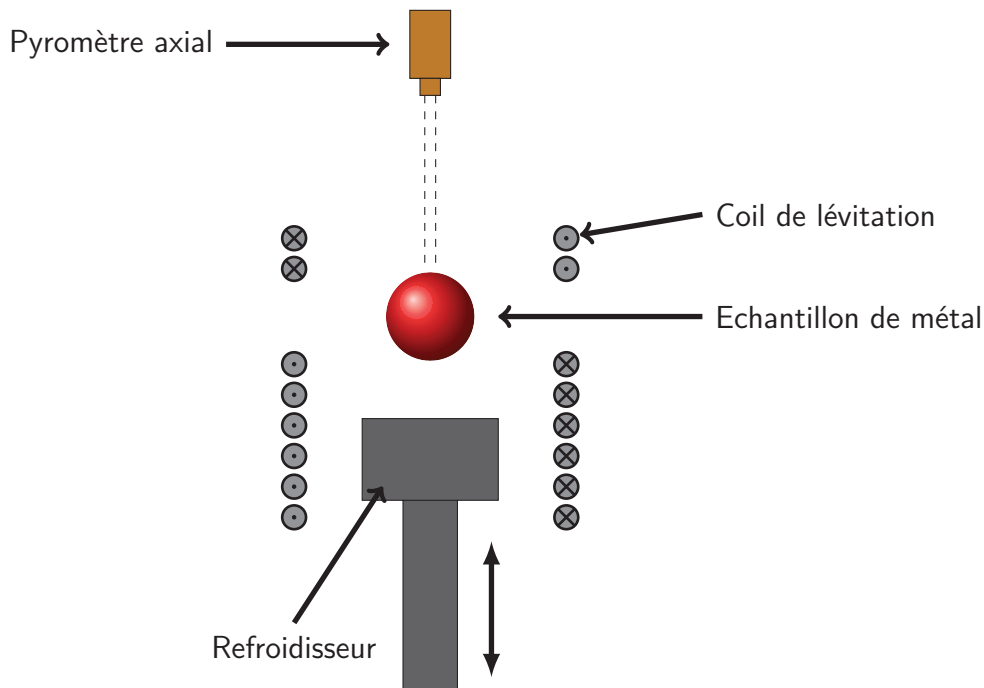
### Expériences du projet CCEMLCC

Les expériences du projet CCEMLCC avaient pour but d'étudier l'influence de la déformation du solide sur la macroségrégation. La déformation du solide devait donc être prépondérante parmi les facteurs agissant sur la répartition des espèces chimiques, notamment par rapport aux mouvements de convection. Pour minimiser ces mouvements, les expériences se sont déroulées en gravité réduite soit au cours de vols paraboliques (essais TEMPUS) soit au cours du vol d'une fusée-sonde (essai TEXUS).

Le principe général des expériences est de mettre en contact une goutte liquide d'un alliage Fe-C avec un refroidisseur en nitrure de silicium  $Si_3N_4$ . Les dispositifs expérimentaux utilisés pour les essais TEMPUS et TEXUS sont représentés aux figures IV.4 et IV.5, respectivement. Ces dispositifs ont été conçus par les équipes du German Aerospace Center (Institute of Material Physics in Space, Köln). Ils s'inspirent de dispositifs construits pour des expériences sur Terre pour lesquelles la goutte tombait par gravité sur le refroidisseur. Un exemple de dispositif terrestre est schématisé à la figure IV.6. Ces expériences terrestres ont montré que le contact d'une goutte liquide sur un refroidisseur mettait en jeu une déformation qualitativement représentative de celle de la peau des

produits coulés en continu [Don95]. C'est pour cette raison que les dispositifs TEMPUS et TEMPUS reprennent ce principe du contact goutte-refroidisseur mais dans un contexte de gravité réduite : la goutte ne tombe plus mais c'est le refroidisseur qui est mis en mouvement pour réaliser le contact. L'échantillon de métal est chauffé et maintenu en lévitation grâce à un système d'induction électromagnétique puis le refroidisseur se déplace afin que le contact avec la goutte puisse se réaliser. Une cage entoure l'échantillon de métal afin de contraindre l'échantillon à rester dans une zone déterminée. Entre les dispositifs TEMPUS et TEMPUS, quelques différences peuvent être notées :

1. Dans TEMPUS, le pyromètre axial mesure la température de la face "supérieure" de la goutte (côté opposé au refroidisseur) alors que dans TEMPUS, le pyromètre axial donne accès à la température de la face "inférieure" de la goutte (côté refroidisseur) via un interstice dans le refroidisseur. De plus pour l'expérience TEMPUS, un deuxième pyromètre permet d'obtenir la température d'une face latérale.
2. Pour TEMPUS, une caméra rapide permet de suivre la solidification de la goutte.



**Fig. IV.4:** Dispositif expérimental pour les vols paraboliques TEMPUS (cage entourant l'échantillon non représentée) [Gan09]

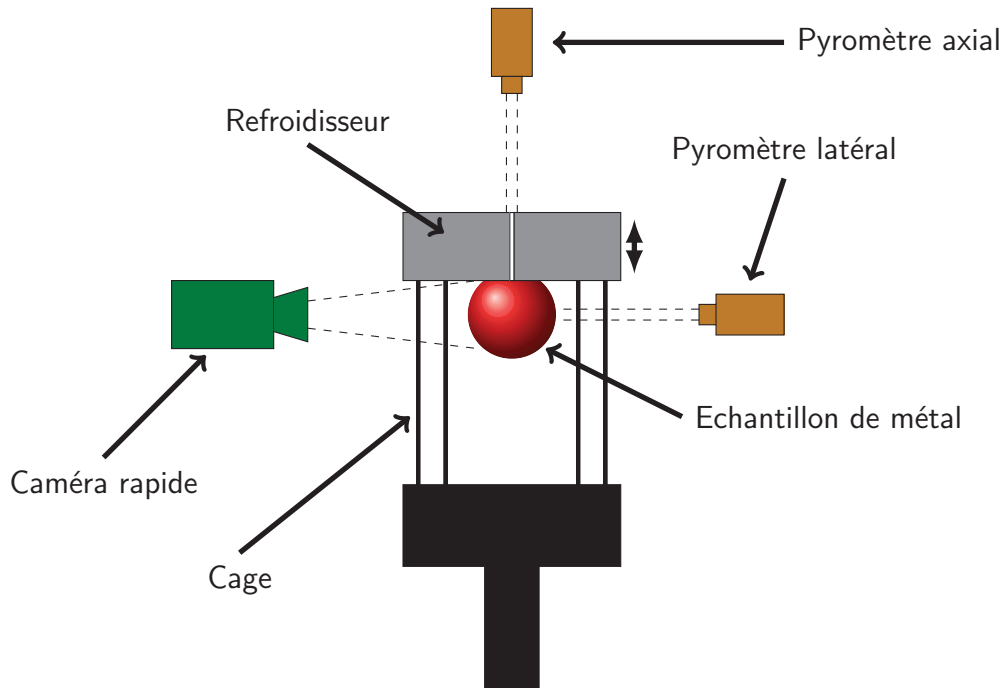


Fig. IV.5: Dispositif expérimental pour le vol de la fusée-sonde TEXUS (système d'induction électromagnétique non représenté)[Gan09]

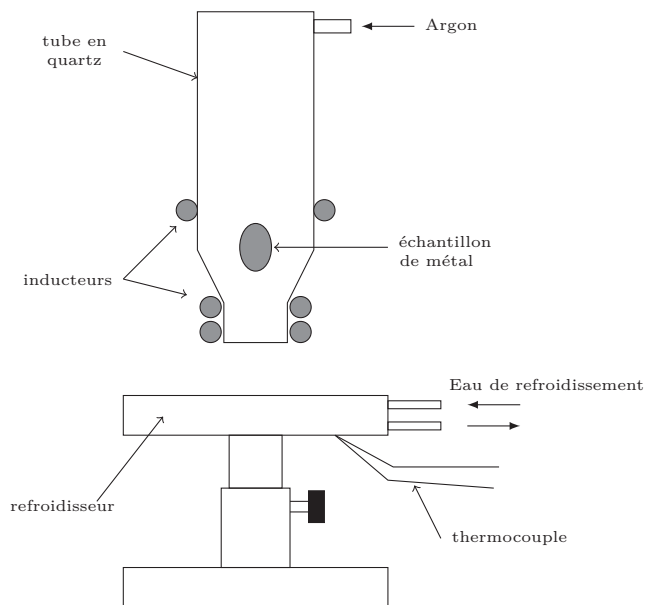


Fig. IV.6: Exemple de dispositif terrestre [Don95]

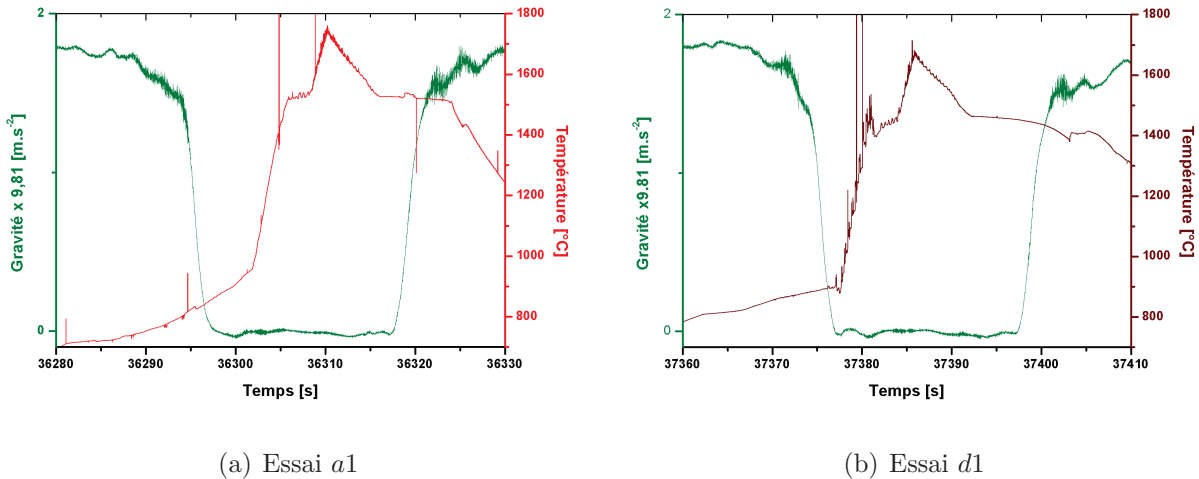
Trois nuances d'acier ont été utilisées pour les expériences. Ces nuances d'acier ont été élaborées par le centre français de recherche d'ArcelorMittal à Maizières-lès-Metz. Leur composition est donnée au tableau IV.1. Les alliages *a1* et *d1* ont servi pour les expériences TEMPUS alors que la nuance *b1* a servi pour l'expérience TEXUS.

**Tab. IV.1:** Alliages utilisés dans le projet CCEMLCC [Gan09]

Expérience	Alliage	Composition mesurée après élaboration [%pds]					
		C	Mn	Si	Al	S	P
TEMPUS	<b>a1</b>	0.046	0.636	0.2606	0.0020	0.009	0.0183
TEXUS	<b>b1</b>	0.105	0.636	0.2680	0.0067	0.009	0.0189
TEMPUS	<b>d1</b>	0.921	0.544	0.2643	0.0115	0.009	0.0111

### Expériences TEMPUS et résultats

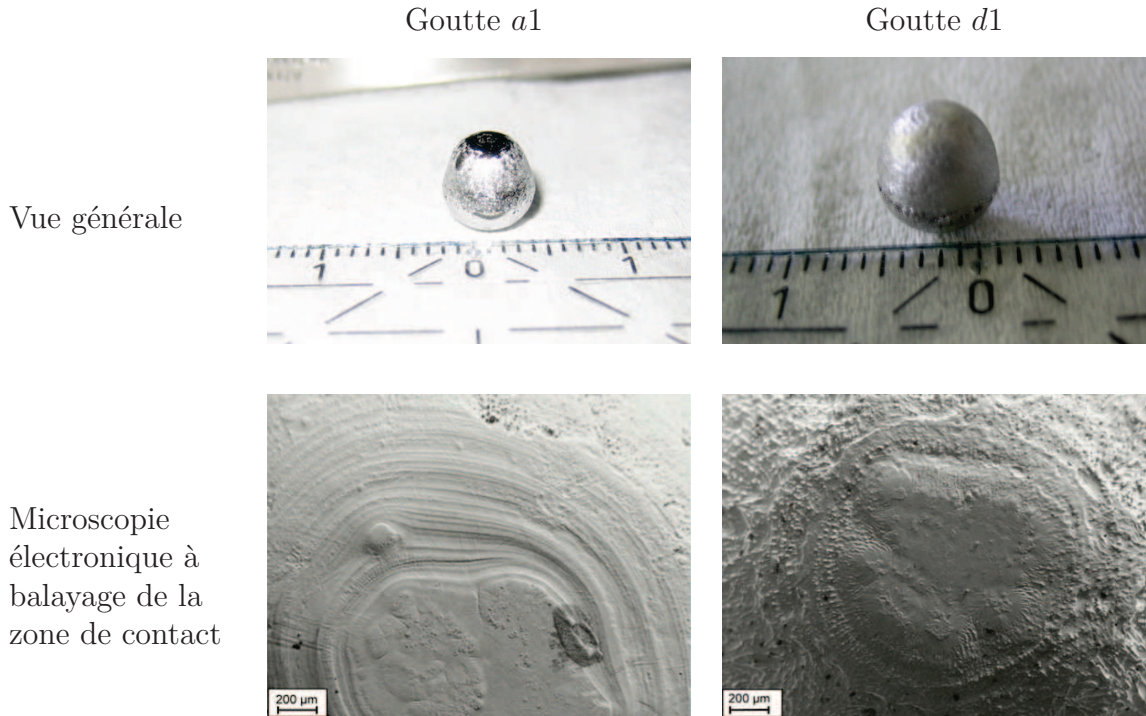
Les expériences pour les gouttes *a1* et *d1* ont été réalisées lors d'un vol parabolique. Un vol parabolique consiste en une série de trajectoires paraboliques réalisées par un avion. A chaque trajectoire, une période de microgravité s'établit. Les essais pour *a1* et *d1* ont chacun été effectués au cours d'une de ces paraboles. Le déroulement de l'essai peut être suivi grâce à la mesure de la température par le pyromètre axial et la valeur de la gravité résiduelle comme représentées aux figures IV.7(a) pour *a1* et IV.7(b) pour *d1*.



**Fig. IV.7:** Evolution de la température de la face supérieure de la goutte et de la gravité au cours de l'expérience TEMPUS [Gan09]

Avant la période de microgravité, la goutte est pré-chauffée jusqu'à 800 – 900°C. Au moment du passage en microgravité, le chauffage est accéléré jusqu'à ce que le métal atteigne la température désirée, typiquement quelques dizaines de degrés au-dessus de la température de liquidus de l'alliage. Après contact avec le refroidisseur, la goutte se refroidit. Le refroidissement n'est pas brutal car la température mesurée est celle du sommet de la goutte et non celle de la face en contact avec le refroidisseur. On remarque également que la goutte n'a pas entièrement le temps de se solidifier pendant la période

de microgravité, la température du liquidus et du solidus étant respectivement pour  $a1$  de  $1530^{\circ}\text{C}$  et  $1480^{\circ}\text{C}$  et pour  $d1$  de  $1461^{\circ}\text{C}$  et  $1350^{\circ}\text{C}$ . Ce problème sera levé grâce à l'expérience TEXUS qui permet d'avoir une période de microgravité d'environ 180 secondes, laissant la possibilité de réaliser plusieurs cycles de chauffage-refroidissement. A l'issue des expériences, les gouttes sont récupérées. Elles sont montrées à la figure IV.8.



**Fig. IV.8:** Gouttes  $a1$  et  $d1$  après les essais TEMPUS [Gan09]

De l'observation des gouttes, plusieurs remarques peuvent être formulées :

1. La forme globale de la goutte est semblable pour  $a1$  et  $d1$ . Les gouttes ne sont pas sphériques mais allongées dans la direction perpendiculaire au refroidisseur.
2. La zone de contact goutte-refroidisseur est plane. Pour  $a1$ , cette surface est approximativement de  $2.5\text{ mm}$  de diamètre, pour  $d1$  approximativement de  $1.5\text{ mm}$  de diamètre. La présence de cette surface plane est confirmée par des mesures de profil de la face de la goutte en contact avec le refroidisseur. Pour chacune des gouttes, deux profils dans des directions orthogonales ont été mesurés à l'aide d'un rugosimètre par ArcelorMittal. Les résultats sont présentés à la figure IV.9.

### Expérience TEXUS et résultats

L'expérience TEXUS, effectuée lors du vol d'une fusée-sonde pour l'alliage  $b1$ , permet de réaliser pendant les 180 secondes de microgravité cinq cycles de chauffage-refroidissement. Sur ces 5 cycles, les trois premiers étaient réservés à un autre projet de l'ESA : le projet Thermolab [Aun05], consistant à déterminer la tension de surface et la viscosité de l'échantillon par une technique d'oscillations [Sau92] [Egr99]. Ces données peuvent servir



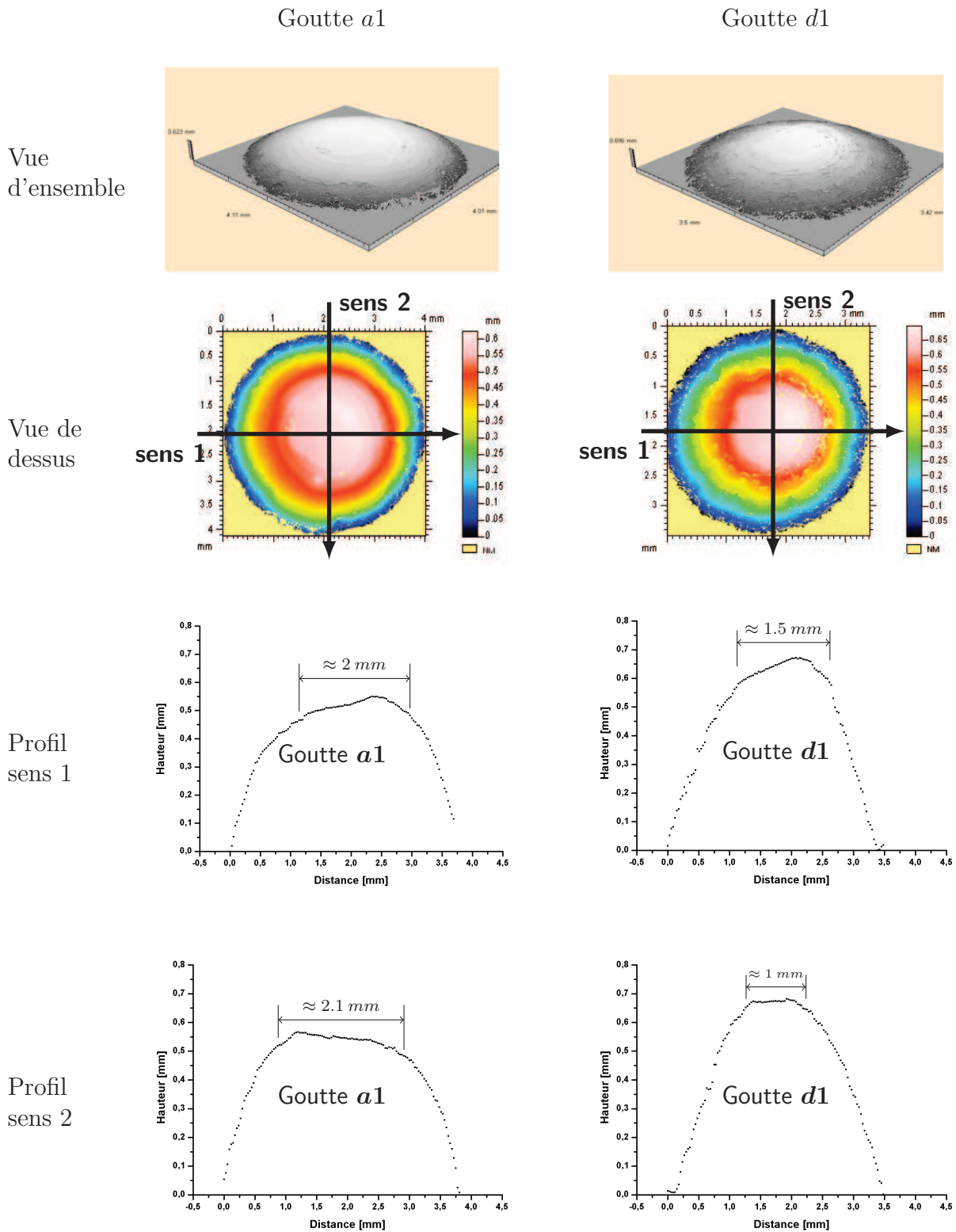
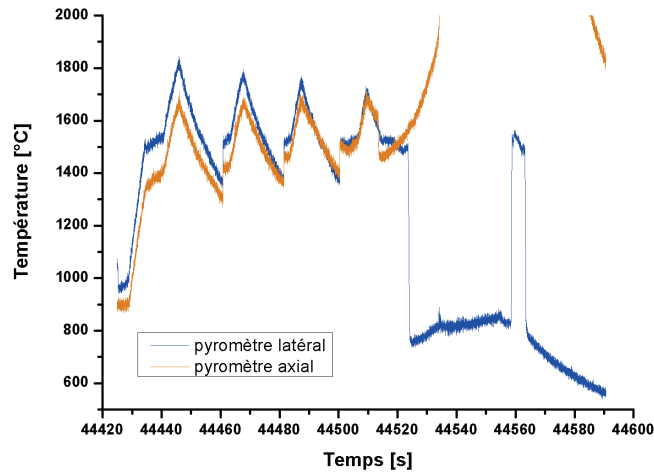


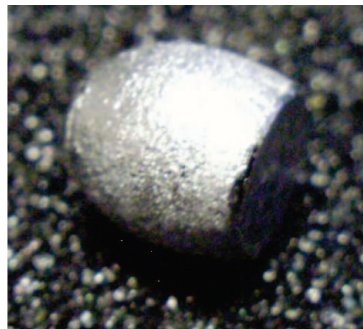
Fig. IV.9: Analyse des gouttes *a1* et *d1* (vols paraboliques TEMPUS) à l'aide du rugosimètre (mesures effectuées par ArcelorMittal)

à la reproduction numérique de l'essai. Les deux derniers cycles étaient consacrés au projet CCEMLCC. L'évolution temporelle de la température mesurée par les pyromètres au cours de l'expérience est tracée à la figure IV.10.



**Fig. IV.10:** Evolution de la température au cours de l'expérience TEXUS [Vol09]

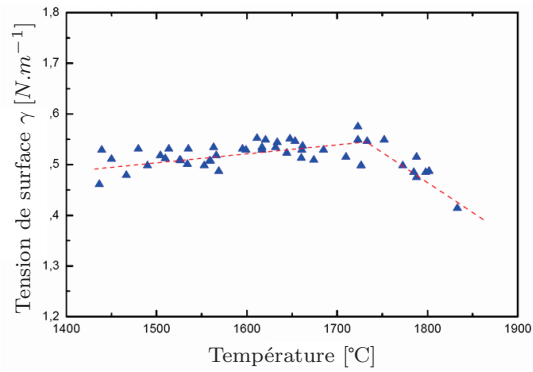
Quatre montées-descentes de la température correspondant aux quatre premiers cycles sont facilement repérables. Au début du cinquième cycle, les températures évoluent de manière inattendue. Ceci provient du fait que la goutte est restée collée au refroidisseur. La goutte *b1* récupérée est montrée à la figure IV.11. Elle présente une large surface plane, surface qui est restée en contact avec le refroidisseur. Du fait de ce dysfonctionnement, le pyromètre latéral ne visait plus la goutte : la température a chuté. De plus, le refroidisseur a été anormalement chauffé. Le pyromètre axial visant la goutte et le refroidisseur était calibré avec l'émissivité du métal. Comme l'émissivité du refroidisseur est supérieure à celle du métal, la température mesurée est bien plus grande que la température réelle.



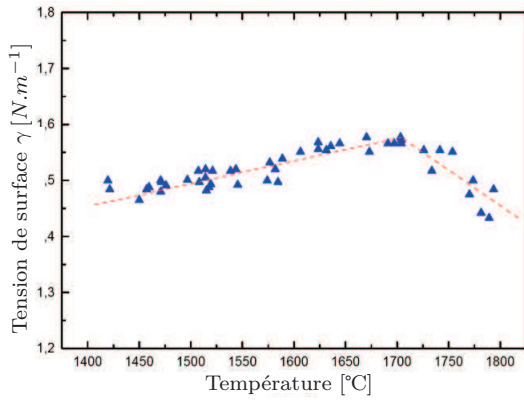
**Fig. IV.11:** Goutte *b1* récupérée après l'expérience TEXUS [Vol09]

L'analyse des données pour les trois premiers cycles a été réalisée par R. Wunderlich et H.J. Fecht de l'université de Ulm dans le cadre du projet Thermolab [Wun10]. Aux figures IV.12 et IV.13 sont tracées, en fonction de la température, la tension de surface évaluée pour chacun des trois cycles et la viscosité estimée pour l'ensemble des cycles.

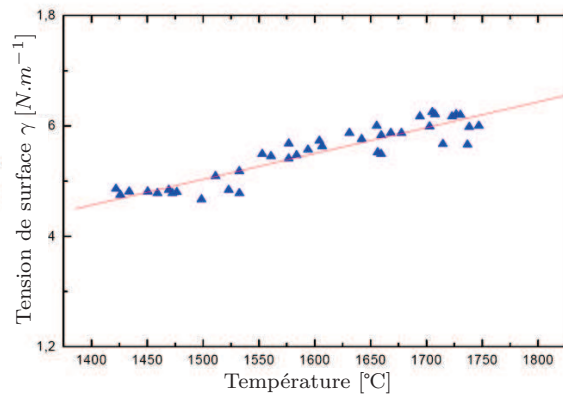




(a) Premier cycle

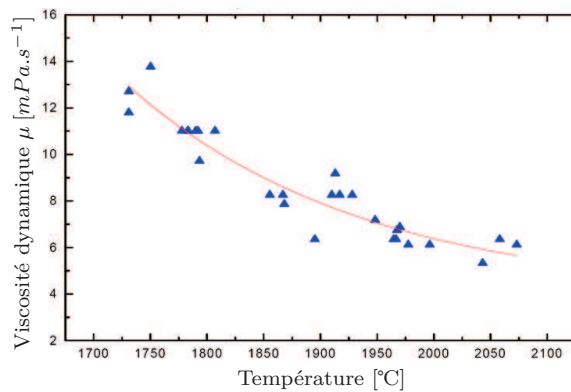


(b) Deuxième cycle



(c) Troisième cycle

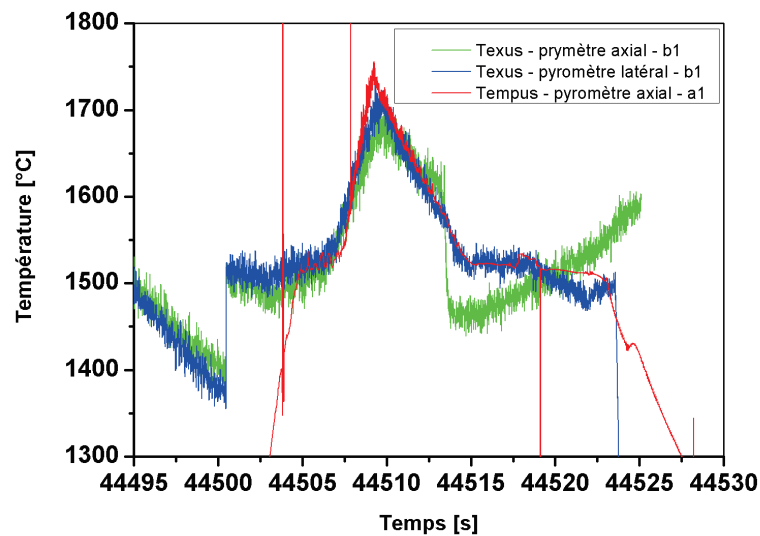
**Fig. IV.12:** Tension de surface  $\gamma$  en fonction de la température obtenue par l'analyse de l'expérience TEXUS [Wun10]



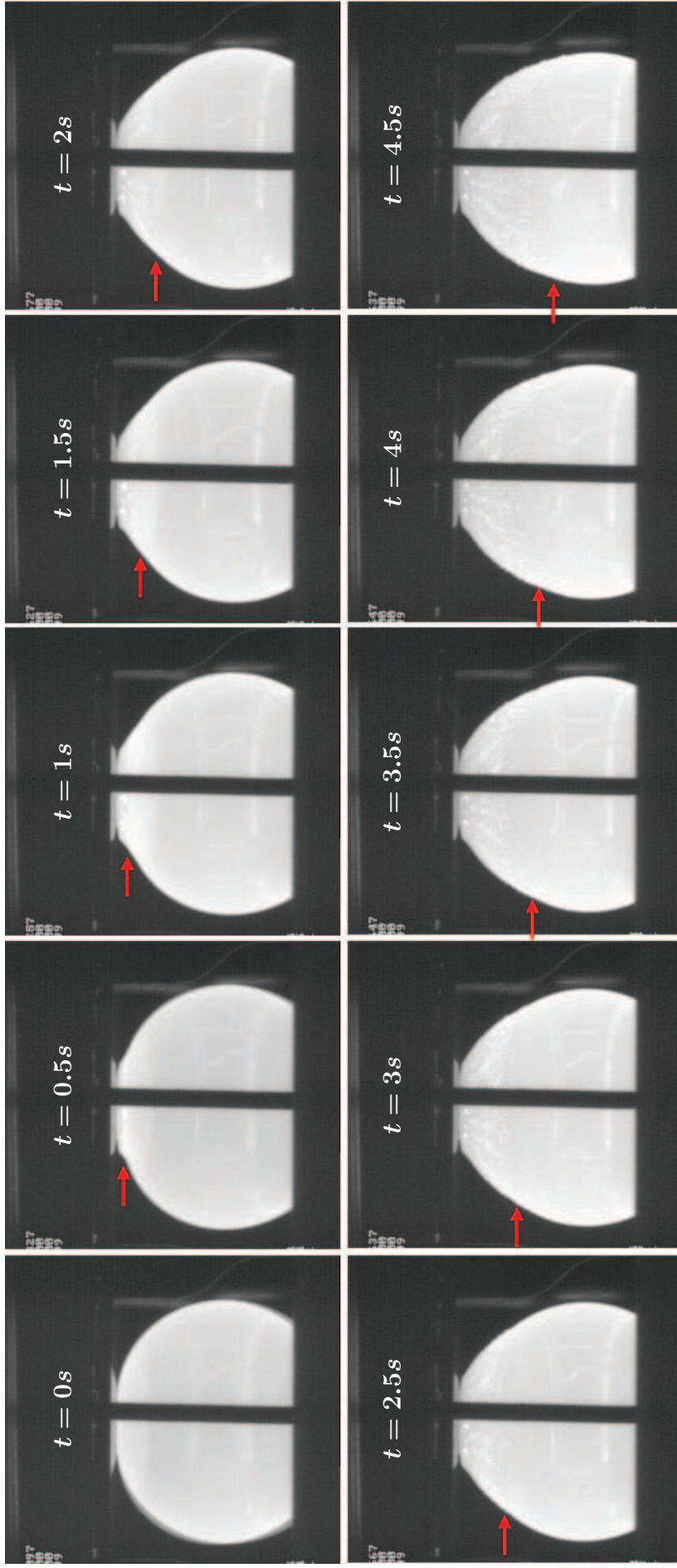
**Fig. IV.13:** Viscosité dynamique  $\mu$  en fonction de la température obtenue par l'analyse de l'expérience TEXUS [Wun10]

La tension de surface présente l' "effet boomerang", c'est-à-dire un changement de pente avec un accroissement à basse température et une décroissance à haute température. Cet effet serait, d'après R. Wunderlich, probablement dû à la présence d'éléments actifs de surface, tel que le dioxygène. La valeur moyenne de la tension de surface, pour des températures supérieures à  $1400^{\circ}\text{C}$  est approximativement de  $1.5\text{N.m}^{-1}$ . La viscosité varie entre  $12\text{mPa.s}^{-1}$  et  $6\text{mPa.s}^{-1}$ . Ces valeurs semblent trop élevées d'après R. Wunderlich. Il avance deux explications : 1. présence d'éléments actifs de surface, comme l'oxygène dissout, et 2. incertitude provenant de la méthode de mesure.

Sur les deux derniers cycles réservés au projet CCEMLCC, le cinquième cycle n'est pas exploitable, compte tenu du problème survenu. Aucune analyse sur la goutte récupérée à la fin de l'expérience n'a été menée. Par conséquent, l'expérience TEXUS ne peut être exploitée que grâce à la courbe temps-température représentée aux figures IV.10 et IV.14 et grâce à la caméra permettant de suivre la solidification de la goutte. Des images tirées de cette vidéo sont montrées à la figure IV.15.



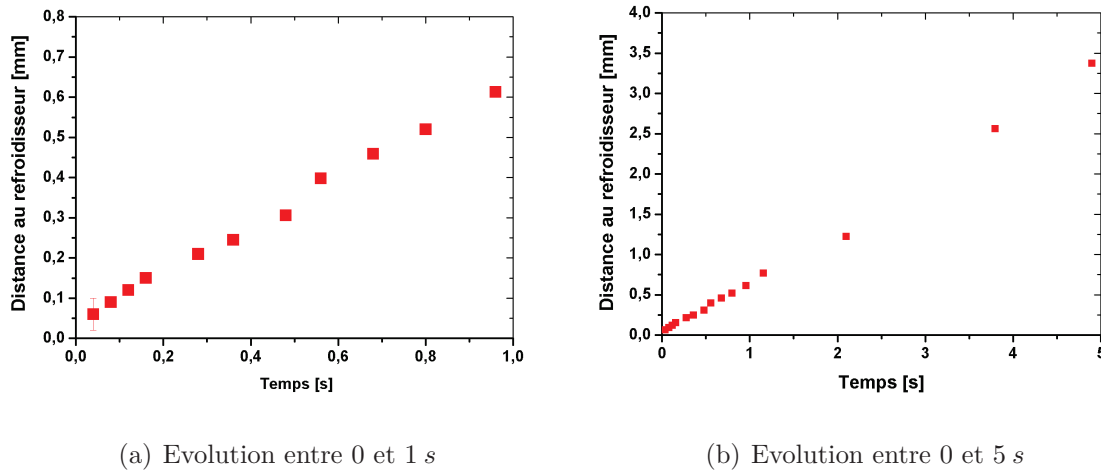
**Fig. IV.14:** Evolution de la température de la goutte pour TEXUS (*b1*, pyromètre latéral et axial) et comparaison avec celle de l'expérience TEMPUS (*a1*, pyromètre axial)



**Fig. IV.15:** Solidification de la goutte au cours de l'expérience TEXUS. La flèche rouge indique la position du front de solidification à la surface de la goutte.

La séquence vidéo permet d'obtenir deux informations :

1. La première information concerne la propagation du front de solidification au cours du refroidissement. A la figure IV.16 est tracée la propagation du front au cours du temps. Les mesures ont été faites par le centre aérospatial allemand. Le front se propage à une vitesse de  $0.7 \text{ mm.s}^{-1}$ .



**Fig. IV.16:** Propagation du front de solidification dans l'expérience TEXUS

2. La seconde information réside dans la manière dont la déformation de la goutte a lieu lors du vol parabolique TEMPUS. La goutte se déforme au cours de son refroidissement en s'allongeant dans la direction normale au refroidisseur et se contracte dans la direction parallèle au refroidisseur. Cette similitude de déformation de la goutte pour TEMPUS et TEXUS est corroborée par les courbes de température. Les courbes de température issues du pyromètre latéral de TEXUS et du pyromètre axial de TEMPUS sont comparées à la figure IV.14. Ces deux pyromètres mesuraient la température de la goutte sur une surface qui n'était pas celle en contact avec le refroidisseur. Les courbes sont proches : les gouttes ont des histoires thermiques similaires.

### IV.3 Expériences pour la simulation des macroségrégations en peau avec déformation du solide

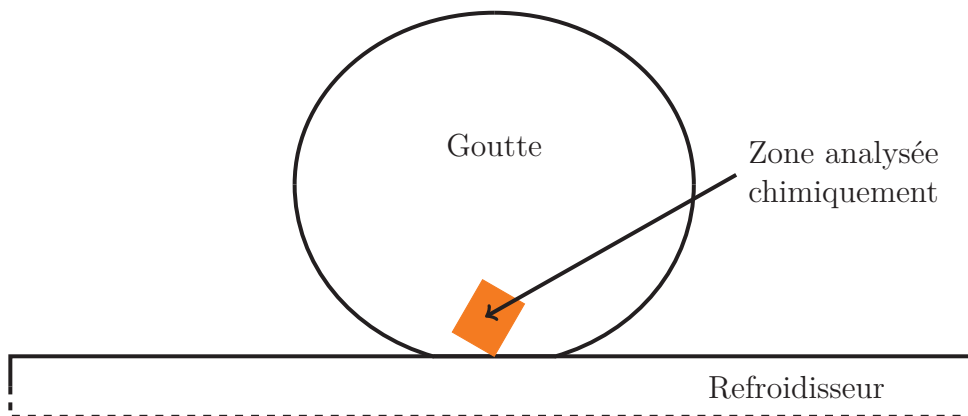
Deux expériences ont servi de base à la simulation des macroségrégations en peau avec déformation du solide. Il s'agit des expériences CCEMLCC ainsi qu'une expérience de la littérature : l'expérience de El-Bealy [Elb00].

#### Expériences CCEMLCC

Les expériences CCEMLCC qui servent de base à la simulation des macroségrégations en peau avec déformation du solide sont les mêmes que celles présentées à la section précédente IV.2. Les expériences TEXUS et TEMPUS ont permis de déformer la goutte au

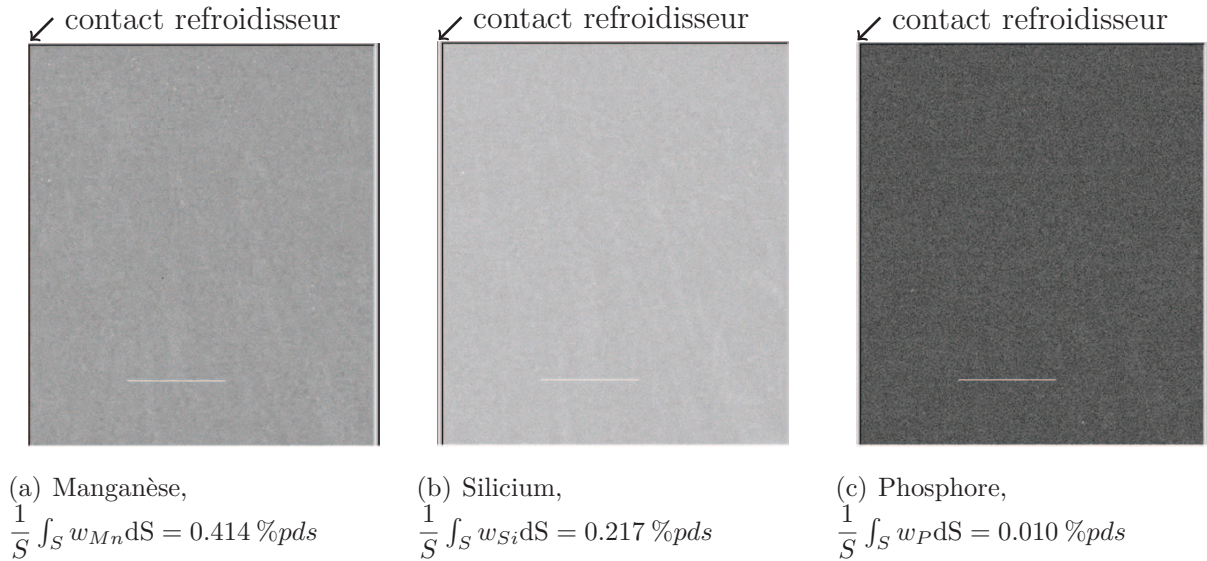
cours de sa solidification en microgravité. En analysant chimiquement les gouttes, on peut étudier la répartition des macroségrégations suite à cette déformation.

Des analyses par microsonde ont été effectuées par le centre français de recherche d'ArcelorMittal sur les gouttes *a1* et *d1* de l'expérience TEMPUS tandis qu'aucune analyse n'a été entreprise pour la goutte *b1* en raison du dysfonctionnement de l'expérience TEXUS. L'analyse porte, dans le plan médian, sur une zone rectangulaire ( $768 \mu\text{m}$  de largeur et  $1024 \mu\text{m}$  de longueur) allant de la surface de la goutte à un millimètre en dessous. La région analysée se situe au niveau de la zone de contact comme montré à la figure IV.17. La recherche a porté sur trois éléments : la manganèse, le silicium et le phosphore. Les résultats sont reportés figure IV.18 pour *a1* et figure IV.19 pour *d1* [Mar09]. Aucune ségrégation n'a été détectée pour la goutte *a1*. Pour la goutte *d1*, une variation de concentration apparaît. Des profils de concentration sont tracés à la figure IV.20 suivant les lignes noires figurées à la figure IV.19. Des bosses et des creux de concentration sont aisément identifiables. La période de ces variations est d'environ d'une centaine de micromètres. La ségrégation observée est la ségrégation qui se développe à l'échelle de la microstructure, c'est-à-dire la microségrégation. A partir de ces mesures, il est donc difficile de conclure à propos des macroségrégations. De plus la surface balayée par la microsonde correspond aux dimensions d'un VER et ne représente que 2% de la surface totale de la goutte. Une cartographie de la goutte entière permettrait d'avoir un aperçu de la ségrégation à l'échelle de la goutte et donc de quantifier les macroségrégations. Pour ces raisons, la comparaison avec des résultats de simulation sera difficile. Une expérience de la littérature a donc fait l'objet d'une simulation : l'expérience de El-Bealy, décrite au paragraphe suivant.

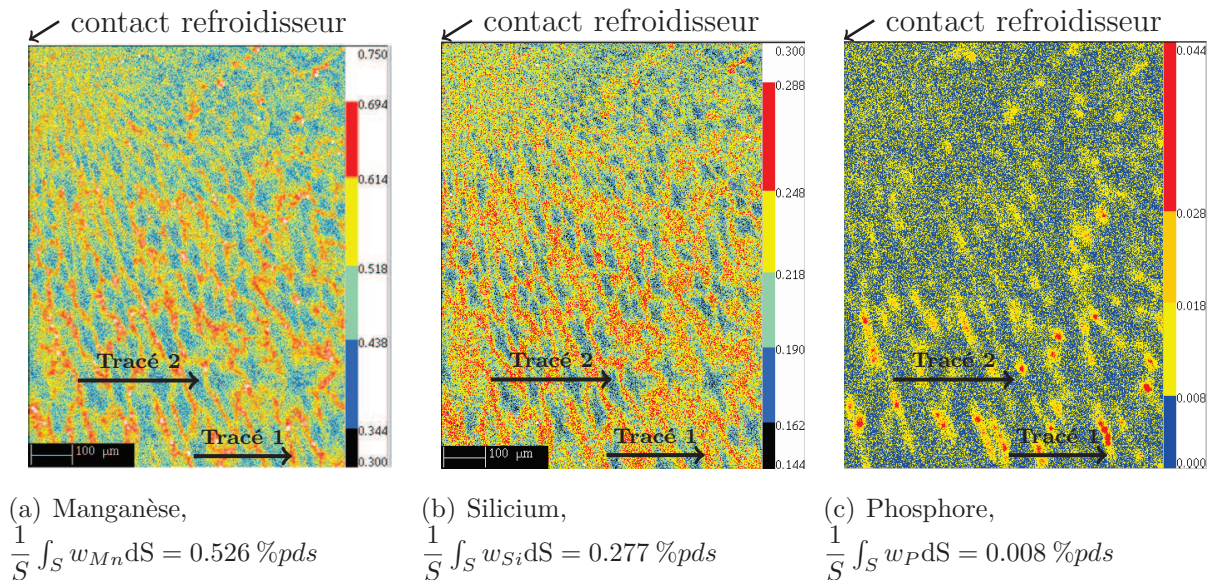


**Fig. IV.17:** Localisation dans le plan médian de la goutte de la zone analysée chimiquement par ArcelorMittal





**Fig. IV.18:** Analyse microsonde de la goutte *a1* et concentration moyenne pour la surface analysée ( $768\mu m \times 1024\mu m$ , voir figure IV.17). Les mesures ont été effectuées par ArcelorMittal, le point de contact avec le refroidisseur est en haut à gauche des images.



**Fig. IV.19:** Analyse microsonde de la goutte *d1* et concentration moyenne pour la surface analysée ( $768\mu m \times 1024\mu m$ , voir figure IV.17). Les mesures ont été effectuées par ArcelorMittal, le point de contact avec le refroidisseur est en haut à gauche des images. Les tracés correspondent aux segments le long desquels les profils de concentration, donnés à la figure IV.20, sont tracés.

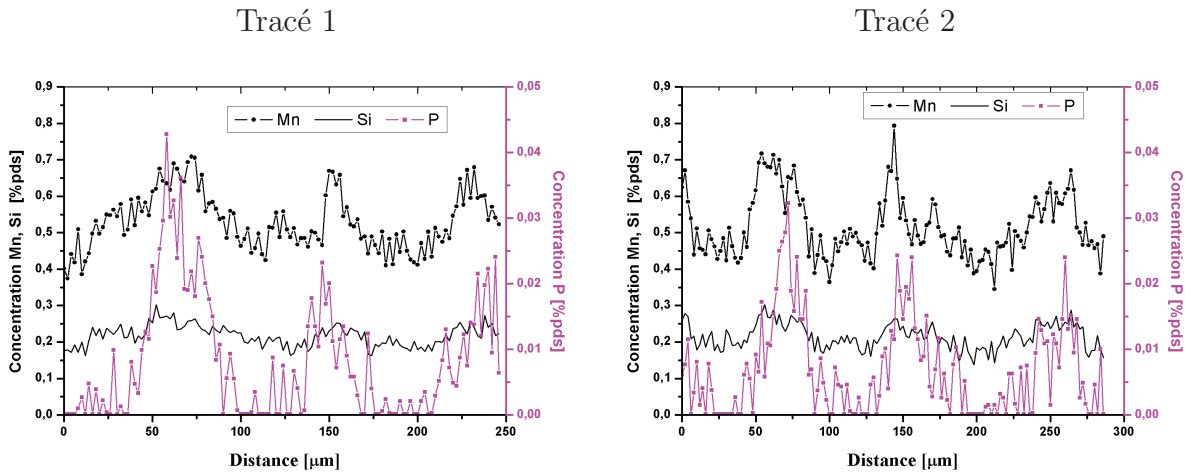


Fig. IV.20: Profils de concentration en manganèse, silicium et phosphore, pour la goutte d1, tracés suivant les lignes noires représentées à la figure IV.19

### Expérience de El-Bealy [Elb00]

L'expérience de El-Bealy consiste à remplir un lingotin (12 cm de haut, 8 cm de large et 10 cm de long) de métal liquide et à le refroidir par l'une de ces parois de manière à obtenir une solidification unidirectionnelle. Le dispositif permet également de changer le mode de refroidissement afin de faire varier la vitesse de refroidissement. Le schéma du dispositif est reproduit à la figure IV.21. Il est constitué d'un canal d'alimentation du métal et d'un lingot. La partie intéressante est le lingot, le canal servant uniquement à remplir le lingot. Le lingot est isolé thermiquement par un isolant excepté sur sa face latérale droite constituée d'une plaque en cuivre sur laquelle le refroidissement est appliqué. Plusieurs thermocouples assurent la mesure de la température et permettent de suivre l'évolution du refroidissement.

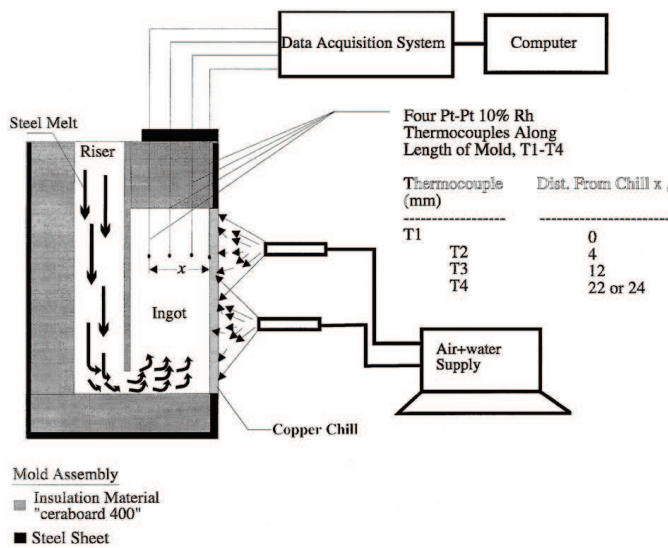
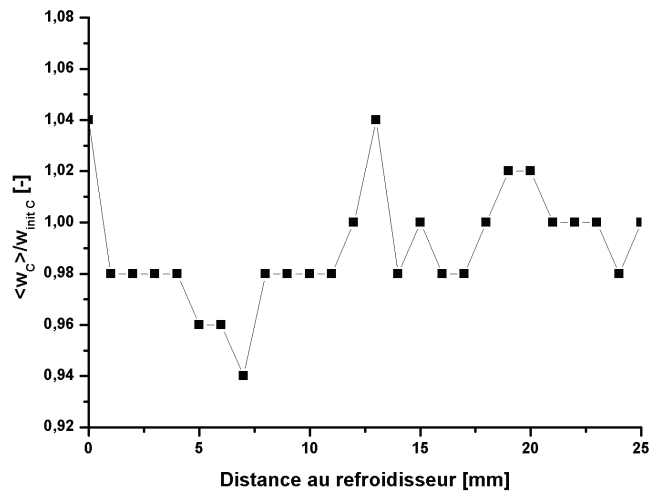


Fig. IV.21: Dispositif expérimental de El-Bealy [Elb00]

La séquence expérimentale est la suivante : le métal liquide est versé dans le canal jusqu'à ce que le lingot soit rempli. Le lingot est ensuite refroidi par sa paroi latérale en cuivre par de l'air ou par un mélange d'air et d'eau. A la fin du refroidissement, des échantillons sont prélevés et analysés afin de connaître l'évolution de la ségrégation en fonction de la distance à la plaque en cuivre. El-Bealy a réalisé plusieurs expériences en faisant varier le mode de refroidissement et les alliages. Parmi ces expériences, une seule a servi de base à la simulation. C'est l'expérience pour laquelle El-Bealy a utilisé un acier  $0.53\text{C}-0.73\text{Mn}-0.23\text{Si}-0.015\text{S}-0.005\text{P}-0.14\text{Ni}-0.07\text{Cr}-0.003\text{Cu}-0.03\text{Mo}$  [%pds] qui a donné lieu à une simulation. Le refroidissement se décomposait en trois parties : (i) pour  $t = 0$  à  $20\text{ s}$  refroidissement par air puis (ii) refroidissement par air et eau jusque  $t = 40\text{ s}$  et enfin (iii) refroidissement par air jusqu'à la fin de l'expérience.

Le profil mesuré de ségrégation relative du carbone  $\langle w_C \rangle / w_{init C}$  est tracé à la figure IV.22. Aucune incertitude de mesure n'est donnée. Plus de données expérimentales seront présentées au chapitre suivant. La concentration moyenne n'est pas uniforme dans l'épais-



**Fig. IV.22:** Ségrégation du carbone en peau obtenue par El-Bealy [Elb00]

seur. Une ségrégation inverse est observée : forte ségrégation positive à la surface. Elle est suivie d'une ségrégation négative. La variation de la concentration moyenne a pour origine le changement des conditions de refroidissement. Une augmentation de l'extraction d'énergie entraîne une forte contraction du solide : le liquide interdendritique est empêché de compenser le retrait ce qui entraîne un appauvrissement en éléments chimiques. A l'inverse, une baisse d'extraction de chaleur entraîne une macroségrégation positive.

## Conclusion partielle

Les expériences décrites dans ce chapitre donneront lieu à des simulations numériques. Pour la macroségrégation à solide fixe, l'expérience de Hebditch & Hunt a été retenue. L'expérience TEXUS a servi pour la simulation de la déformation car la vidéo permet de



suivre la déformation de la goutte au cours de sa solidification. Enfin, la macroségrégation en peau à solide déformable a été simulée pour l'expérience TEXUS, bien qu'aucun résultat expérimental significatif n'ait été obtenu, et pour celle de El-Bealy. Les simulations ainsi que la comparaison des résultats numériques et expérimentaux sont présentées au chapitre suivant.





# Simulation numérique des macroségrégations en peau à solide déformable

La démarche adoptée pour parvenir à la simulation numérique des macroségrégations en peau à solide déformable a été présentée au chapitre III. Elle se décompose en trois étapes. Pour chacune de ces étapes, la simulation vise à reproduire une expérience afin de confronter les résultats numériques aux résultats expérimentaux. Cette démarche permet de s'assurer progressivement de la bonne résolution des équations. La mise en place des simulations et la comparaison des résultats numériques et expérimentaux sont présentées dans ce chapitre. La première étape consiste à simuler les macroségrégations sans déformation, la deuxième à simuler uniquement la déformation du solide et enfin la dernière correspond à la réunion des deux précédentes. Toutes ces étapes mettront en jeu des alliages binaires. La solidification d'un alliage ternaire dans une configuration simple sera présentée à la fin de ce chapitre.



## Sommaire

---

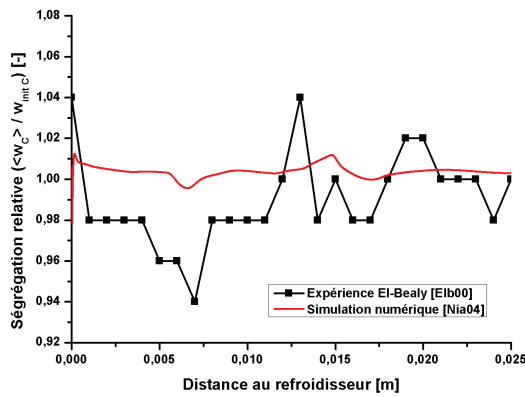
V.1	Etat de l'art des simulations . . . . .	<b>109</b>
V.2	Macroségrégation à solide fixe et rigide . . . . .	<b>110</b>
V.2.1	Equations à résoudre . . . . .	110
V.2.2	Schéma de résolution . . . . .	112
V.2.3	Confrontation simulation-expérience . . . . .	112
V.3	Déformation du premier voile solidifié . . . . .	<b>120</b>
V.3.1	Thercast® . . . . .	120
V.3.2	Confrontation simulation - expérience . . . . .	122
V.4	Macroségrégation en peau à solide déformable . . . . .	<b>131</b>
V.4.1	Rappel des équations à résoudre . . . . .	131
V.4.2	Schéma de résolution . . . . .	132
V.4.3	Application à l'expérience TEXUS . . . . .	134
V.4.4	Application à l'expérience de El-Bealy . . . . .	140
V.5	Cas de solidification d'un alliage ternaire . . . . .	<b>147</b>
V.5.1	Rappel des équations à résoudre . . . . .	147
V.5.2	Mise en donnée numérique . . . . .	148
V.5.3	Résultats . . . . .	148

---

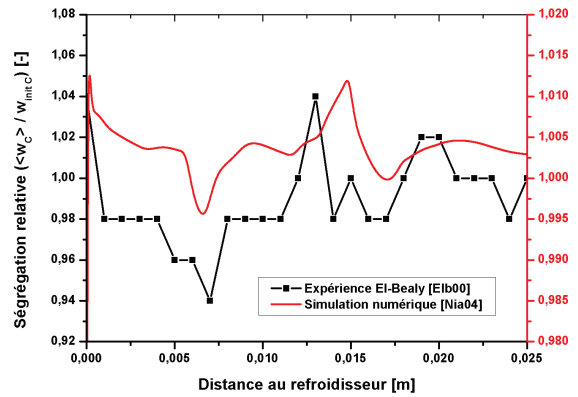


## V.1 Etat de l'art des simulations

Dans le domaine de la solidification et des macroségrégations, les simulations numériques portent essentiellement sur l'étude des macroségrégations à solide fixe et rigide, c'est-à-dire sans déformation du solide, comme dans [Ahm98], [Gou07] et [Liu05]. Lorsque la macroségrégation est couplée avec une déformation du solide, c'est pour étudier numériquement la macroségrégation centrale en coulée continue. Diverses approches de ce couplage peuvent se trouver dans [Fac06], [Kaj01] et [Nic05]. Les études numériques des macroségrégations en peau à solide déformable sont rares dans la littérature. Deux études ont été effectuées par El-Bealy [Elb00] et Niane [Nia04] [Nia06]. Elles avaient pour but de retrouver la ségrégation observée dans l'expérience de El-Bealy décrite à la section IV.3 du chapitre précédent. Pour ces deux cas, le modèle utilisé était unidimensionnel et le comportement du solide était simplement thermo-élastique. Les détails du modèle utilisé par El-Bealy se trouvent dans [Elb00] et ceux de celui de Niane dans [Nia04] et [Nia06]. Les résultats numériques obtenus par Niane sont comparés aux résultats expérimentaux de El-Bealy à la figure V.1 où sont représentés les profils de ségrégation relative  $\langle w_C \rangle / w_{init C}$  suivant la distance au refroidisseur.



(a) Même échelle



(b) Echelle différente

**Fig. V.1:** Comparaison des profils de ségrégation relative  $\langle w_C \rangle / w_{init C}$  entre l'expérience de El-Bealy [Elb00] et la simulation numérique de Niane [Nia04]

Le profil simulé suit la même tendance que celui de l'expérience. Cependant l'intensité de la ségrégation obtenue est beaucoup plus faible dans le cas numérique que dans l'expérience. En effet, les mesures expérimentales indiquent une ségrégation relative variant entre 0.92 et 1.04. La simulation de Niane prévoit une ségrégation relative entre 0.995 et 1.01, soit une variation dix fois inférieure.

L'objectif de nos travaux est de parvenir à simuler les macroségrégations en peau à solide déformable en se basant sur deux expériences : l'expérience TEXUS du projet CCEMLCC et celle de El-Bealy. Dans ces deux cas, le domaine de calcul sera tridimensionnel et le comportement rhéologique du métal sera représenté par des lois élasto-viscoplastique ou viscoplastique. Pour atteindre cet objectif, trois étapes ont été néces-



saires comme évoqué au chapitre III. La première étape a consisté à simuler la macroségrégation à solide fixe et rigide et la deuxième étape a servi à étudier uniquement la déformation du solide. La dernière étape correspond à la fusion des deux premières étapes afin de simuler la macroségrégation à solide déformable. Le détail des différentes étapes fait l'objet des sections suivantes. Les matériaux utilisés sont modélisés comme des alliages binaires. En fin de chapitre, un calcul de solidification d'un alliage ternaire sur un cas simple sera donné.

## V.2 Macroségrégation à solide fixe et rigide

La simulation de la macroségrégation à solide fixe et rigide se base sur l'expérience de Hebditch & Hunt décrite à la section IV.1 du chapitre IV. Les équations à résoudre pour ce cas sont présentées puis le schéma de résolution des équations est détaillé. Enfin les résultats expérimentaux et numériques sont comparés. La simulation a été effectuée grâce à la librairie scientifique éléments finis CimLib®.

### V.2.1 Equations à résoudre

Avant de donner les équations à résoudre dans le cadre de la simulation de la macroségrégation à solide fixe et rigide, les principales hypothèses du modèle de macroségrégation établies au chapitre II sont brièvement rappelées :

1. solidification colonnaire (pas de grains équiaxes) ;
2. température uniforme dans le VER à l'échelle microscopique ;
3. milieu saturé (pas de porosités) ;
4. Equilibre thermodynamique à l'interface solide-liquide ;
5. diffusion infinie dans chacune des phases à l'échelle microscopique ;
6. diffusion nulle dans le solide à l'échelle macroscopique ;
7. la zone pâteuse est considérée comme un milieu poreux avec une perméabilité isotrope donnée par la relation de Carman-Kozeny (expression II.2.16) ;
8. la diffusion thermique suit la loi de Fourier, la diffusion chimique la loi de Fick.

A ces hypothèses sont ajoutées celles du problème de macroségrégation à solide fixe et rigide. Dans cette section, le solide est considéré comme fixe et rigide. La contraction thermique et le retrait à la solidification ne sont pas pris en compte. Les macroségrégations sont uniquement induites par la convection thermo-solutale. Les équations à résoudre, écrites au tableau V.1, sont dérivées de celles du tableau II.4 en appliquant les hypothèses et approximations supplémentaires suivantes :

1. Le solide est fixe et rigide ( $\mathbf{v}^s = 0 \text{ m.s}^{-1}$ ) :  $\langle \mathbf{v} \rangle = g^l \mathbf{v}^l = \langle \mathbf{v}^l \rangle$ .
2. Le liquide est supposé incompressible, c'est-à-dire  $\rho^l = \text{cte} = \rho_0$ . Dans ce cas,  $\nabla \cdot \langle \mathbf{v}^l \rangle = 0$

3. Le liquide est considéré comme newtonien, ce qui donne [Gan90] [Ni91] :

$$\langle \mathbf{s}^l \rangle = 2\mu^l \dot{\mathbf{e}}(\langle \mathbf{v}^l \rangle) = \mu^l (\nabla \langle \mathbf{v}^l \rangle + {}^T \nabla \langle \mathbf{v}^l \rangle)$$

avec la viscosité dynamique du liquide  $\mu^l$  prise constante.

4. Les masses volumiques sont prises égales et constantes pour le solide et le liquide ( $\rho^l = \rho^s = \langle \rho \rangle = \rho_0 = \text{cste}$ ). L'approximation de Boussinesq est appliquée dans le terme de gravité de l'équation de conservation de la quantité de mouvement :

$$\rho^l = \rho_0 \left( 1 - \beta_T(T - T_{ref}) - \sum_{i=1}^{neltall} \beta_{w_i}(w_i^l - w_{ref_i}) \right) \quad (\text{V.2.1})$$

avec  $neltall$  le nombre total d'éléments d'alliage ( $neltall \in \mathbb{N}$ ).

Comme  $\rho^l = \rho^s$ , les fractions massiques et volumiques sont confondues :  $f^s = g^s$  et  $f^l = g^l$ .

5. La chaleur massique et la conductivité thermique sont prises constantes et égales pour le solide et le liquide. Par conséquent  $c_p^l = c_p^s = \langle c_p \rangle = c_p = \text{cste1}$  et  $\kappa^l = \kappa^s = \langle \kappa \rangle = \kappa = \text{cste2}$ .

6. Le terme  $\rho_0 \nabla \cdot (g^l \mathbf{v}^l \times \mathbf{v}^l) = \rho_0 \nabla \cdot \left( \frac{1}{g^l} \langle \mathbf{v}^l \rangle \times \langle \mathbf{v}^l \rangle \right)$  est approximé par :

$$\rho_0 \nabla \cdot \left( \frac{1}{g^l} \langle \mathbf{v}^l \rangle \times \langle \mathbf{v}^l \rangle \right) \approx \frac{\rho_0}{g^l} \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}^l \rangle \times \langle \mathbf{v}^l \rangle)$$

De plus, du fait de l'incompressibilité,  $\nabla \cdot (\langle \mathbf{v}^l \rangle \times \langle \mathbf{v}^l \rangle) = [\nabla \langle \mathbf{v}^l \rangle] \langle \mathbf{v}^l \rangle$ .

7. A l'échelle macroscopique, la diffusion des espèces chimiques dans la phase solide est négligée :  $\forall i \in [1, \dots, neltall] D_i^s = 0 \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$

8. Seuls des alliages binaires sont considérés dans cette partie. L'indice  $i$  correspond alors uniquement à  $i = 1$ . Il sera donc omis par la suite pour alléger l'écriture des équations.

**Tab. V.1:** Equations macroscopiques à solide fixe et rigide

Quantité de mouvement	$\rho_0 \frac{\partial \langle \mathbf{v}^l \rangle}{\partial t} + \frac{\rho_0}{g^l} [\nabla \langle \mathbf{v}^l \rangle] \langle \mathbf{v}^l \rangle - \mu^l \nabla \cdot (\nabla \langle \mathbf{v}^l \rangle) + g^l \nabla p^l - g^l \rho^l \mathbf{g} + \frac{\mu^l}{K_{perm}} g^l \langle \mathbf{v}^l \rangle = 0$
Masse	$\nabla \cdot \langle \mathbf{v}^l \rangle = 0$
Energie	$\rho_0 \left( \frac{\partial \langle h \rangle_m}{\partial t} + c_p \nabla T \cdot \langle \mathbf{v}^l \rangle \right) - \nabla \cdot (\kappa \nabla T) = 0$
Soluté	$\frac{\partial \langle w \rangle_m}{\partial t} + \langle \mathbf{v}^l \rangle \cdot \nabla w^l - \nabla \cdot (g^l D^l \nabla w^l) = 0$

Les équations du tableau V.1 sont des équations couplées. En effet, la vitesse  $\langle \mathbf{v}^l \rangle$  intervient dans le calcul du champ d'enthalpie moyenne  $\langle h \rangle_m$  et de concentration moyenne  $\langle w \rangle_m$ . La fraction liquide  $g^l$ , la température  $T$  et la concentration dans le liquide  $w^l$  qui dépendent de l'enthalpie moyenne  $\langle h \rangle_m$  et de la concentration moyenne  $\langle w \rangle_m$  interviennent dans le calcul du champ de vitesse  $\langle \mathbf{v}^l \rangle$ . Pour prendre en compte ce couplage, un schéma de résolution est mis en place. Il est décrit au paragraphe suivant.

### V.2.2 Schéma de résolution

Le schéma de résolution mis en œuvre est un schéma dit de couplage faible avec utilisation des valeurs les plus récentes des variables. A chaque incrément de temps, les équations ne sont résolues qu'une seule fois avec mise à jour de  $g^l$ ,  $T$  et  $w^l$  dès qu'elles sont calculées. Le déroulement d'un incrément de temps, illustré à la figure V.2, se divise en six étapes :

au temps  $t$  :

1. Résolution de la conservation de l'énergie avec  $\langle \mathbf{v}^l \rangle^{t-\Delta t}$ . Obtention de  $\langle h \rangle_m^t$  ;
2. Résolution de la conservation du soluté avec  $\langle \mathbf{v}^l \rangle^{t-\Delta t}$ . Obtention de  $\langle w \rangle_m^t$  ;
3. Résolution du modèle de microségrégation connaissant  $\langle h \rangle_m^t$  et  $\langle w \rangle_m^t$ . Obtention de  $T^t$ ,  $g^t$ ,  $w^t$  et  $\frac{\partial T}{\partial \langle h \rangle_m}^t$  ;
4. Mise à jour de la masse volumique :  $\rho^t = \rho_0 (1 - \beta_T(T^t - T_{ref}) - \beta_w(w^t - w_{ref}))$  ;
5. Résolution de la conservation de la quantité de mouvement et de la masse pour le liquide avec  $g^t$ ,  $\rho^t$  et  $K_{perm}(g^t) = \frac{\lambda_2^2 g^{t3}}{180(1-g^t)^2}$ . Obtention de  $\langle \mathbf{v}^l \rangle^t$ .
6. Incrémentation des variables.

Le couplage faible implique une légère discordance entre les variables calculées. En effet l'enthalpie moyenne et la concentration moyenne à l'instant  $t$  sont calculées avec la vitesse du liquide  $\langle \mathbf{v}^l \rangle^{t-\Delta t}$ . Un couplage fort permettrait de supprimer ce décalage. Dans ce cas, au cours d'un incrément de temps, les étapes 1 à 5 sont répétées afin que l'enthalpie moyenne et la concentration moyenne à l'instant  $t$  soient calculées à partir de  $\langle \mathbf{v}^l \rangle^t$ . Plusieurs itérations sont nécessaires pour aboutir à ce jeu cohérent de variables. Toutefois [Liu05] a montré qu'un couplage fort n'apportait pas de gain significatif sur les résultats et ralentissait les calculs du fait des itérations. C'est pour cela que seul un couplage faible a été mis en place.

La résolution de chacune des équations par la méthode des éléments finis a été détaillée au chapitre III. Le modèle de microségrégation utilisé ici est celui de la loi des leviers dont la résolution est présentée en annexe C.

### V.2.3 Confrontation simulation-expérience

Ce paragraphe présente les données et les paramètres utilisés pour la simulation ainsi que la comparaison des résultats obtenus avec les résultats expérimentaux de Hebditch et Hunt.

A l'instant  $t$  :

**1. Résolution de la conservation de l'énergie**

Résolution globale instationnaire avec méthode itérative de Newton-Raphson (chapitre III, section III.3)

$$\rho_0 \left( \frac{\partial \langle h \rangle_m}{\partial t} + c_p \nabla T \cdot \langle \mathbf{v}^l \rangle^{t-\Delta t} \right) - \nabla \cdot (\kappa \nabla T) = 0 \quad \Longrightarrow \langle h \rangle_m^t$$

**2. Résolution de la conservation du soluté**

Résolution globale instationnaire avec méthode de splitting de Voller-Prakash (chapitre III, section III.4)

$$\frac{\partial \langle w \rangle_m}{\partial t} + \langle \mathbf{v}^l \rangle^{t-\Delta t} \cdot \nabla w^l - \nabla \cdot (g^l D^l \nabla w^l) = 0 \quad \Longrightarrow \langle w \rangle_m^t$$

**3. Résolution du modèle de macroségrégation**

$$\Longrightarrow T^t, g^t, w^t, \frac{\partial T}{\partial \langle h \rangle_m}^t$$

**4. Calcul de la masse volumique**

$$\rho^{lt} = \rho_0 (1 - \beta_T (T^t - T_{ref}) - \beta_w (w^{lt} - w_{ref}))$$

**5. Résolution de la mécanique des fluides**

Résolution globale instationnaire avec terme de Darcy (chapitre III, section III.2)

$$\begin{cases} \rho_0 \frac{\partial \langle \mathbf{v}^l \rangle}{\partial t} + \frac{\rho_0}{g^{lt}} \nabla \langle \mathbf{v}^l \rangle \cdot \langle \mathbf{v}^l \rangle^{t-\Delta t} - \mu^l \nabla \cdot (\nabla \langle \mathbf{v}^l \rangle) \\ \quad + g^{lt} \nabla p^l - g^{lt} \rho^{lt} \mathbf{g} + \frac{\mu^l}{K_{perm}(g^{lt})} g^{lt} \langle \mathbf{v}^l \rangle = 0 \\ \nabla \cdot \langle \mathbf{v}^l \rangle = 0 \end{cases} \quad \Longrightarrow \langle \mathbf{v}^l \rangle^t, p^t$$

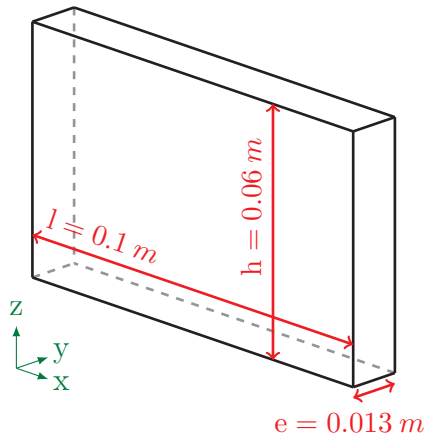
**6. Incrémentation des variables**

$t + \Delta t$

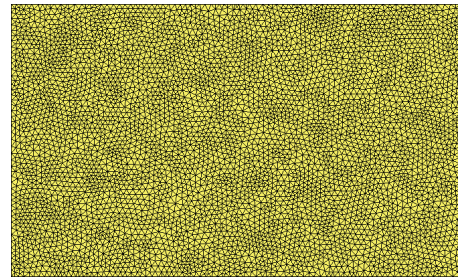
**Fig. V.2:** Schéma de résolution du couplage des équations pour la macroségrégation à solide fixe et rigide

### V.2.3.1 Mise en donnée numérique

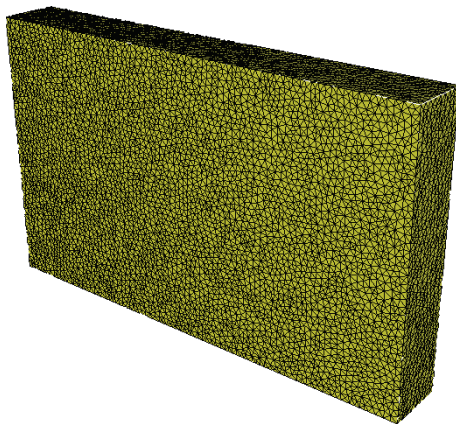
La résolution du cas de Hebditch et Hunt avec le schéma de couplage exposé dans la partie V.2.2 a été effectuée pour trois configurations :  $2D$ ,  $3D$  et  $3D$  avec plan de symétrie ( $3D_{sym}$ ). La géométrie du domaine de calcul pour le cas  $3D$  est directement obtenue par la géométrie du lingotin de l'expérience et est donnée à la figure V.3(a). Il s'agit d'un parallélépipède rectangle de  $0.1m$  de long, de  $1.3cm$  d'épaisseur et de  $6cm$  de haut. Les cas  $2D$  et  $3D$  avec plan de symétrie ont la même géométrie que celle du cas  $3D$  mais pour une épaisseur du lingotin de  $e = 0m$  et  $e = 0.0065m$ , respectivement. Chacun de ces domaines est maillé par des éléments triangulaires en dimension 2 et par des éléments tétraédriques en dimension 3. Les maillages sont homogènes et isotropes. Ils sont représentés pour chacune des configurations à la figure V.3. Leurs tailles de maille caractéristique sont sensiblement similaires :  $h_{2D} = 1.15 mm$ ,  $h_{3D} = 1.27 mm$  et  $h_{3D_{sym}} = 1.42 mm$ .



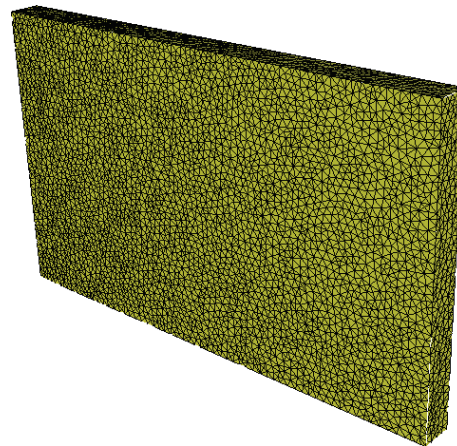
(a) Géométrie du cas 3D



(b) Maillage du cas 2D (5440 nœuds, 10601 éléments)



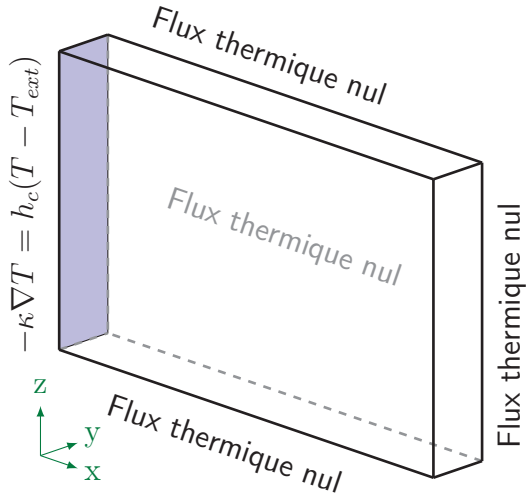
(c) Maillage du cas 3D (72594 nœuds, 379811 éléments)



(d) Maillage du cas 3D avec plan de symétrie (28767 nœuds, 139883 éléments)

**Fig. V.3:** Configurations et maillages pour le cas de Hebditch & Hunt

Les conditions aux limites imposées aux frontières du domaine sont tirées de l'expérience. Toutes les parois du lingot sont isolées thermiquement, exceptée l'une des petites faces verticales, celle de gauche, où un flux de type Fourier est appliqué. Une vitesse liquide nulle et un flux chimique nul sont imposés sur toutes les parois. Toutes les conditions aux limites sont illustrées à la figure V.4 pour le cas 3D.



- Conditions aux limites thermiques

Flux thermique nul sur toutes les parois sauf sur la paroi bleutée comme indiqué sur le dessin de gauche

- Condition aux limites mécaniques

$v^l = 0 \text{ m.s}^{-1}$  sur toutes les parois

- Condition aux limites chimiques

Flux chimique nul sur toutes les parois

**Fig. V.4:** Conditions aux limites (cas 3D) pour la simulation de l'expérience de Hebditch et Hunt

L'expérience de Hebditch et Hunt simulée est celle mettant en jeu un alliage binaire de Pb-48%pdsSn. Les propriétés sont récapitulées dans le tableau V.2 ainsi que certains paramètres de simulation. Les valeurs des critères d'arrêt des itérations de Newton-Raphson pour la résolution de l'équation de la conservation de l'énergie (section III.3 chapitre III) sont les suivantes :

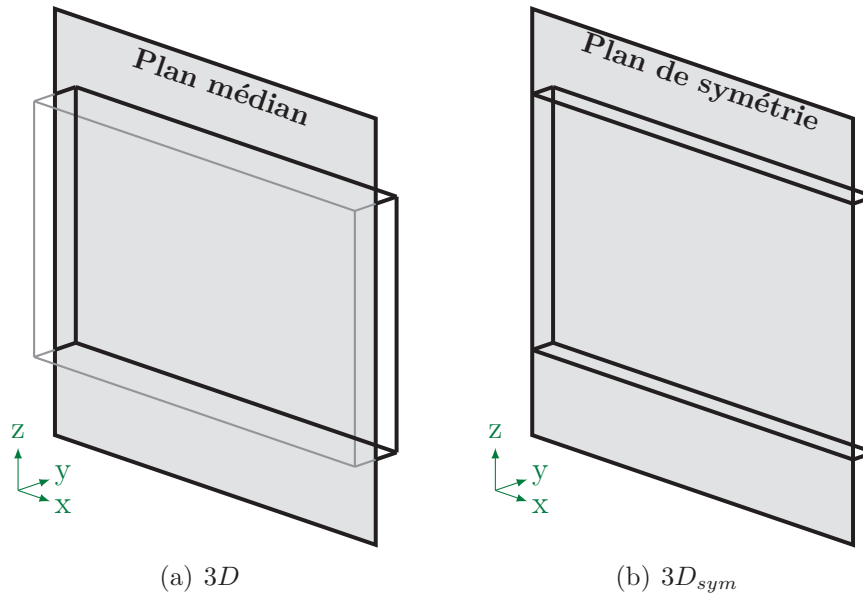
$$\begin{cases} \varepsilon_T & = 10^{-3} \text{ } ^\circ\text{C} \\ \varepsilon_H & = 5 \times 10^{-5} \\ IterNrMax & = 30 \end{cases}$$

### V.2.3.2 Résultats

Les simulations sont exécutées jusqu'à la solidification complète du domaine. Celle-ci a lieu aux environs de 1240 – 1250 s. Les cartes de macroségrégation obtenues à  $t = 1250 \text{ s}$  pour chacune des trois configurations sont montrées à la figure V.6. Les isoplèthes sont visualisées dans le plan de symétrie pour le cas  $3D_{sym}$  et dans le plan médian dans le cas 3D. Ces plans sont montrés à la figure V.5. Un calcul a également été effectué avec un autre logiciel, R2SOL, dans lequel la macroségrégation à solide fixe et rigide avait été implémentée par Weitao Liu au cours de sa thèse [Liu05]. Il s'agit d'un logiciel éléments finis 2D utilisant des méthodes de résolution similaires à celles décrites précédemment exceptées pour la mécanique des fluides, résolue grâce à la méthode Residual Free Bubble [Liu05].

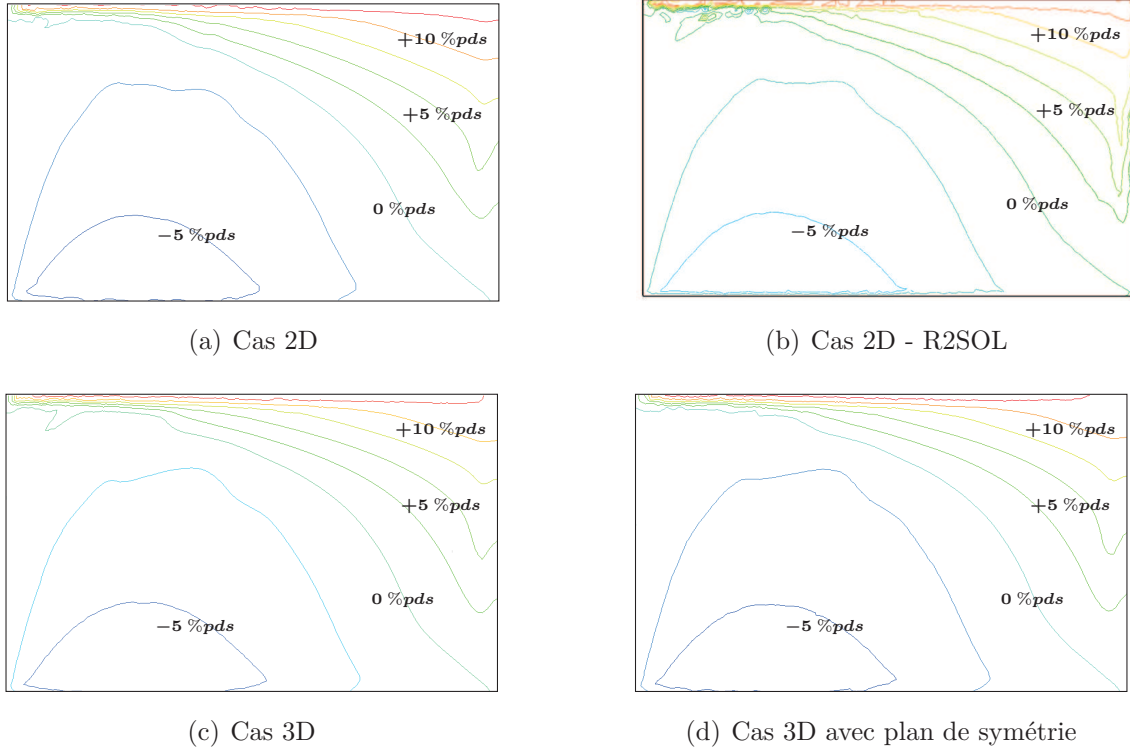
**Tab. V.2:** Propriétés du Pb-48%*pds*Sn et paramètres de simulation pour le cas Hebditch et Hunt

		Unités	Pb-48% <i>pds</i> Sn
<b>Diagramme de Phase</b>			
Température de fusion	$T_f$	°C	327.5
Température eutectique	$T_{eut}$	°C	183.0
Pente du liquidus	$m_{liq}$	°C.(% <i>pds</i> ) <sup>-1</sup>	-2.334
Coefficient de partition	$k$	-	0.307
Concentration eutectique	$w_{eut}$	% <i>pds</i>	61.9
<b>Propriétés matériau</b>			
Masse volumique	$\rho_0$	kg.m <sup>-3</sup>	9000
Conductivité thermique	$\kappa$	W.m <sup>-1</sup> .°C <sup>-1</sup>	50.0
Chaleur massique	$c_p$	J.kg <sup>-1</sup> .°C <sup>-1</sup>	200.0
Chaleur latente	$L$	J.kg <sup>-1</sup>	53550
Coefficient d'expansion thermique	$\beta_T$	°C <sup>-1</sup>	10 <sup>-4</sup>
Coefficient d'expansion solutale	$\beta_w$	(% <i>pds</i> ) <sup>-1</sup>	4.5 × 10 <sup>-3</sup>
Coefficient de diffusion dans le liquide (Sn dans le Pb liquide)	$D^l$	m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup>	10 <sup>-9</sup>
Viscosité dynamique	$\mu^l$	Pa.s	10 <sup>-3</sup>
Espacement interdendritique secondaire	$\lambda_2$	m	40 × 10 <sup>-6</sup>
<b>Autres paramètres</b>			
Température initiale	$T_{init}$	°C	216
Concentration initiale d'étain	$w_{Sn\ init}$	% <i>pds</i>	48.0
Température de référence	$T_{ref}$	°C	232
Concentration de référence	$w_{ref}$	% <i>pds</i>	48
Coefficient d'échange thermique	$h_c$	W.m <sup>-2</sup> .°C <sup>-1</sup>	400
Température extérieure	$T_{ext}$	°C	25
Gravité	$g$	m.s <sup>-2</sup>	9.81
Pas de temps	$\Delta t$	s	0.1


**Fig. V.5:** Plan médian pour le cas 3D et plan de symétrie pour le cas 3D<sub>sym</sub>



Le maillage utilisé est le même que celui du cas 2D illustré à la figure V.3(b). La carte des macroségrégations obtenues est reportée à la figure V.6(b).

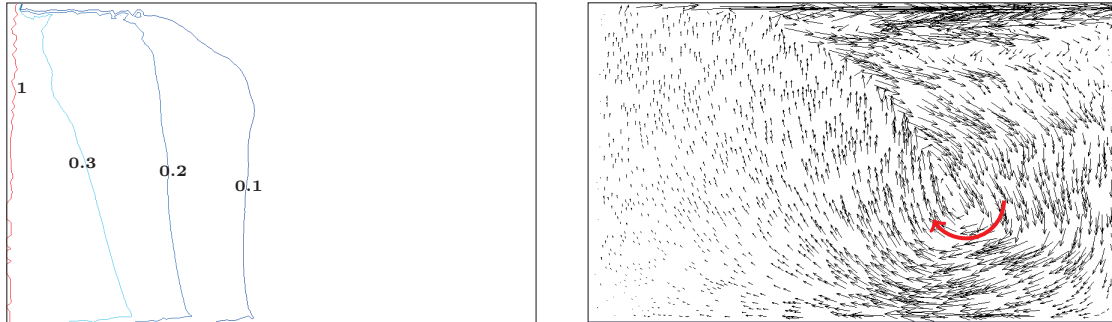


**Fig. V.6:** Isoplèthes de macroségrégation ( $\langle w_{Sn} \rangle - w_{init} S_n$ ) à  $t = 1250 s$

Pour chacune des simulations, la répartition des espèces chimiques est semblable. Une macroségrégation positive est obtenue en haut de la cavité et une macroségrégation négative en bas à gauche de la cavité. Cette distribution s'explique par la convection thermosolutale et la propagation des isothermes. Les isothermes sont globalement verticales et se propagent de gauche à droite. Le sens des mouvements de convection qui ont pour origine les variations de masse volumique, résulte de deux phénomènes concurrents. Dans l'expression V.2.1 de  $\rho^l$ , la baisse de température provoque une augmentation de la masse volumique et devrait engendrer un mouvement de convection anti-horaire. Or l'enrichissement du liquide en soluté provoque une diminution de la masse volumique et devrait engendrer un mouvement horaire. Ces deux phénomènes sont en compétition. Mais vu les valeurs des coefficients de dilatation thermique et solutale ( $\beta_w \approx 40 \beta_T$ ), la convection solutale l'emporte sur la convection thermique. Le liquide s'écoule donc dans le sens horaire comme montré à la figure V.7(b) Dans cette configuration d'un mouvement horaire de liquide et d'une propagation des isothermes de gauche à droite, en reprenant le raisonnement de la section I.3.2(chapitre I, page 25) avec  $\mathbf{v}_n = 0 m.s^{-1}$  (car  $\rho^l = \rho^s$ ), on aboutit à une macroségrégation positive en haut de la cavité (vitesse des isothermes et vitesse du liquide dans le même sens). En bas de la cavité, les isothermes et le liquide se propagent en sens contraire induisant une macroségrégation négative. Cette distribution



entraîne un retard à la solidification en haut de la cavité par rapport au bas de la cavité. Cette situation est illustrée à la figure V.7(a).



(a) Fraction volumique de solide  $g^s$

(b) Champ de vitesse  $\langle \mathbf{v}^l \rangle$  (la flèche indique le sens de circulation du liquide)

**Fig. V.7:** Fraction solide  $g^s$  et champ de vitesse  $\langle \mathbf{v}^l \rangle$  à  $t = 120$  s pour le calcul 2D

Pour une approche plus quantitative et afin de pouvoir comparer les résultats numériques avec les mesures de concentration réalisées par Hebditch et Hunt, les profils de ségrégation  $\langle w_{Sn} \rangle - w_{init} s_n$  sont tracés suivant la longueur du lingot (axe  $x$  sur la figure V.3(a)) et pour différentes hauteurs  $z$  à la figure V.8. Pour les cas 3D et 3D avec plan de symétrie, ces profils ont été tracés dans le plan médian et dans le plan de symétrie, respectivement.

Deux conclusions peuvent être tirées de la comparaison des profils : la première porte sur la concordance des calculs numériques entre eux et la seconde sur l'accord des résultats numériques par rapport aux résultats expérimentaux.

Le tracé des profils confirme la remarque faite au sujet des cartes de macroségrégation, à savoir que les solutions numériques obtenues sont proches les unes des autres. Les écarts les plus élevés sont localisés à la frontière droite ainsi qu'en haut du lingot. En dehors de ces deux zones, les écarts sont faibles. Entre les simulations 2D et 2D\_R2SOL, la différence de ségrégation est en moyenne de 0.015%*pds*. Entre les calculs 3D et 3D<sub>sym</sub>, l'écart moyen est de 0.03%*pds*. Enfin, seule 0.3%*pds* en moyenne de différence sont constatés entre les simulations 2D et 3D. A la frontière droite du lingot, les écarts les plus importants sont observés entre les simulations réalisées avec CimLib® (2D, 3D et 3D<sub>sym</sub>) et celle effectuée avec R2SOL. Ces différences peuvent venir à la fois de la méthode de résolution de la mécanique des fluides mais aussi de la gestion des conditions aux limites. En haut de la cavité ( $z = 55$  mm), les simulations présentent des différences plus marquées que pour les autres hauteurs ( $z = 5$  mm,  $z = 25$  mm et  $z = 35$  mm). Une des raisons possibles de ces écarts plus importants en haut de cavité est la présence de fortes variations de concentration sur une faible épaisseur comme visualisée sur les cartes de macroségrégation à la figure V.6 avec le resserrement des isoplèthes. Ces forts gradients rendent plus difficile la résolution des équations et la différence de taille de maille des maillages utilisés peut avoir un rôle. Comme l'a montré [Gou05], des calculs sur des maillages plus fins dans cette zone permettraient d'obtenir des résultats plus lisses et un meilleur accord entre les

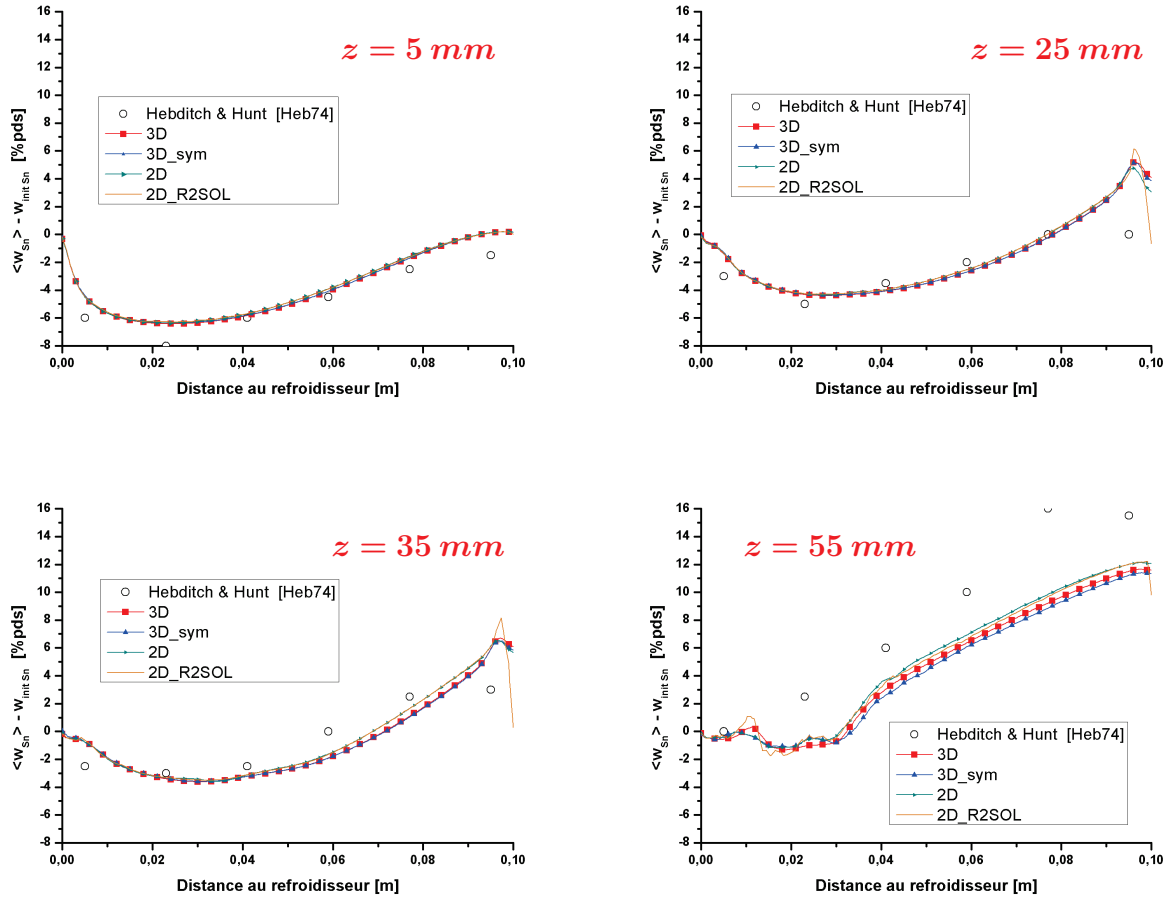


Fig. V.8: Profils de macroségrégation à différentes hauteurs de la cavité de Hebditch & Hunt pour l'alliage Pb-48%pdsSn

simulations.

La seconde conclusion concerne la comparaison des résultats numériques avec les résultats expérimentaux de Hebditch et Hunt. Les profils numériques de ségrégation suivent les mêmes tendances que les profils expérimentaux de Hebditch et Hunt. Des résultats semblables avaient été trouvés par Ahmad [Ahm98] en faisant des calculs par des méthodes éléments finis ou volumes finis. Toutefois, pour  $z = 55 \text{ mm}$ , le niveau de ségrégation obtenu par les codes numériques n'atteint pas celui de l'expérience. Cette différence peut provenir de la non prise en compte dans le modèle de la surfusion de croissance. En effet, Guillemot montre [Gui04] que la surfusion de croissance des structures dendritiques permet de retrouver les mêmes niveaux de ségrégation.

Ces premiers résultats obtenus concernant la macroségrégation à solide fixe et rigide sont donc satisfaisants. Quelle que soit la configuration (2D, 3D et 3D<sub>sym</sub>), les résultats numériques sont proches et concordent avec les mesures expérimentales. Des calculs supplémentaires pourront être lancés afin d'étudier l'influence de la taille de maille sur les résultats. Entre les simulations, le temps de calcul est significativement différent. Le calcul

2D a pris  $2500\text{ s} \approx 40\text{ mn}$  sur 20 processeurs, le calcul 3D  $71590\text{ s} \approx 20\text{ h}$  sur 48 processeurs et le calcul  $3D_{sym}$   $28767\text{ s} \approx 8\text{ h}$  sur 48 processeurs. Un remaillage automatique pourra être mis en œuvre afin de gagner en temps de calcul, notamment pour les calculs en dimension 3. L'étape de simulation des macroségrégations à solide fixe et rigide est considérée comme validée. La deuxième étape concernant la simulation de la déformation du solide est abordée à la section suivante.

## V.3 Déformation du premier voile solidifié

La simulation de la déformation du premier voile solidifié s'appuie sur l'expérience TEXUS décrite à la section IV.2 du chapitre IV. Pour réaliser cette simulation, le logiciel de simulation des procédés de solidification des métaux Theracast<sup>®</sup> a été utilisé. Avant de présenter les simulations, on revient brièvement sur les méthodes de résolution de la conservation de l'énergie (solveur énergétique) et de la quantité de mouvement et de la masse (solveur mécanique) dans Theracast<sup>®</sup>.

### V.3.1 Theracast<sup>®</sup>

#### V.3.1.1 Solveur énergétique

L'équation de conservation de l'énergie dans Theracast<sup>®</sup> s'écrit sous la forme suivante :

$$\langle \rho \rangle c_{eff} \frac{dT}{dt} - \nabla \cdot (\kappa \nabla T) - S_T = 0 \quad (\text{V.3.1})$$

avec  $c_{eff}$  la chaleur massique effective et  $S_T$  une source interne de chaleur (nulle dans les cas que nous avons étudiés).

La chaleur massique effective  $c_{eff}$  est définie par :

$$c_{eff} = \frac{\partial h}{\partial T} \quad (\text{V.3.2})$$

La résolution de l'équation V.3.1 se fait grâce à la méthode des éléments finis accompagnée de la méthode de linéarisation de Zlamal [Zla71]. Le détail de la résolution de l'équation de conservation de l'énergie se trouve dans la thèse de Frédéric Costes [Cos04].

#### V.3.1.2 Solveur mécanique

La résolution de la conservation de la quantité de mouvement et de la masse a été précisée à la section III.5 du chapitre III. Les points principaux de la résolution sont rappelés ici :

1. Le comportement rhéologique du métal est modélisé par des lois de comportement élasto-viscoplastique en-dessous d'une température critique  $T_C$  et viscoplastique au-dessus de  $T_C$ .
2. La résolution se fait par la méthode des éléments finis [Jao98] [Ali00] [Cos04].
3. Le maillage se déplace suite à la déformation du solide et cela nécessite une étape de transport des variables de l'ancien vers le nouveau maillage. Le transport se fait grâce à la méthode ALE (arbitrairement langrangienne eulérienne).

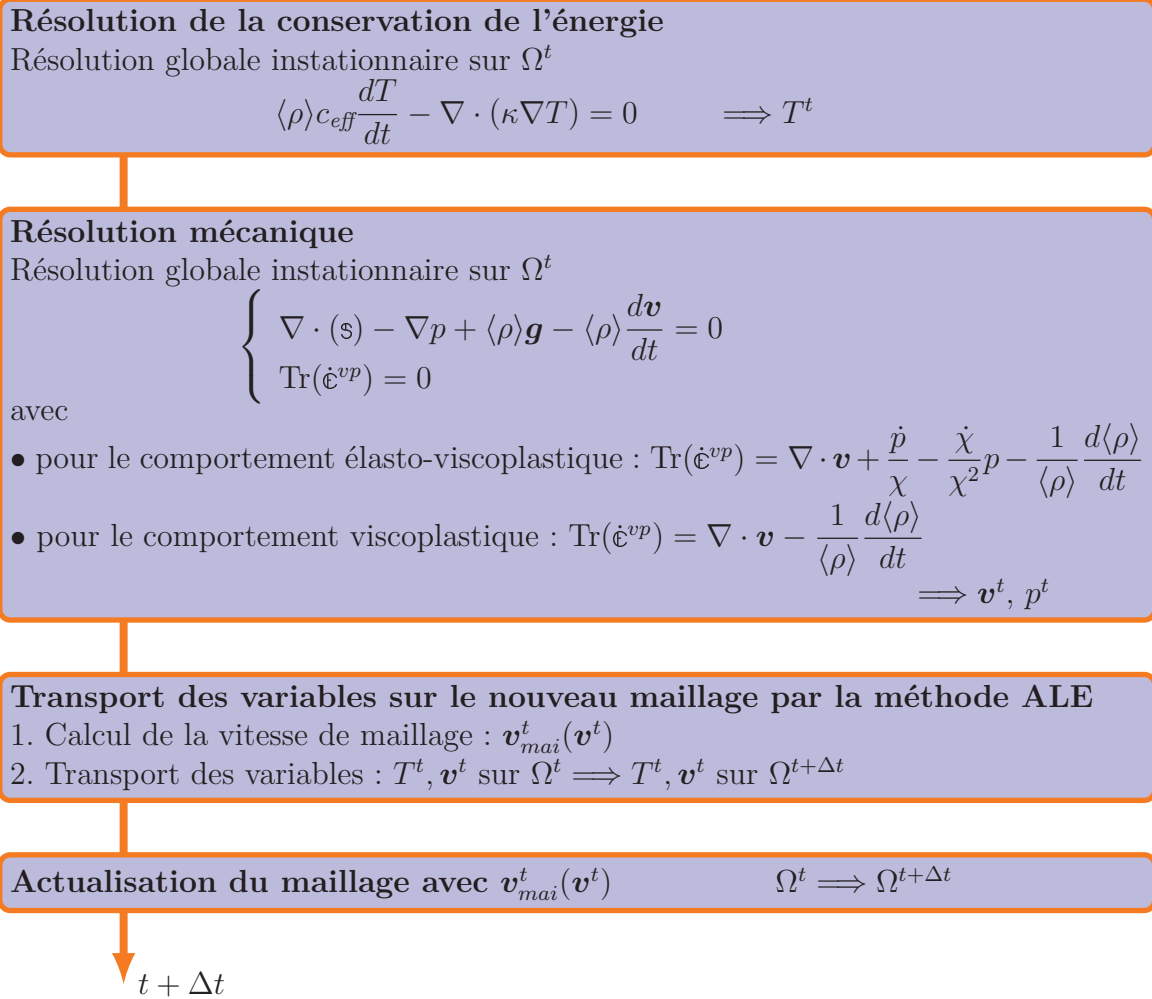
### V.3.1.3 Schéma de résolution

Les équations à résoudre sont couplées. La température influence les propriétés mécaniques du matériau qui agissent en retour sur la distribution de température. Le schéma de résolution du couplage des équations se fait au temps  $t$  de la manière suivante dans Theracast<sup>®</sup> :

1. Résolution de la conservation de l'énergie : obtention de  $T^t$ .
2. Résolution de la conservation de la quantité de mouvement et de la masse : obtention de  $\mathbf{v}^t$  et  $p^t$ .
3. Transport des variables par la méthode ALE après le calcul de la vitesse de maillage  $\mathbf{v}_{mai}^t(\mathbf{v}^t)$ .
4. Actualisation du maillage avec  $\mathbf{v}_{mai}^t(\mathbf{v}^t)$ .

Le déroulement d'un incrément de temps est illustré à la figure V.9.

A l'instant  $t$  :



**Fig. V.9:** Schéma de résolution du couplage des équations dans Theracast<sup>®</sup> pour le calcul de la déformation du solide

Les équations, leur résolution et leur couplage ayant été précisés, la section suivante est consacrée à la modélisation numérique et à la simulation de l'expérience TEXUS avec confrontation des résultats numériques et expérimentaux.

### V.3.2 Confrontation simulation - expérience

Le but ici est de reproduire numériquement la déformation de la goutte observée lors de l'expérience TEXUS. L'expérience TEXUS, décrite à la section IV.2 du chapitre précédent, consiste à mettre en contact une goutte de métal liquide avec un refroidisseur. Le contact provoque la solidification de la goutte qui entraîne une déformation. Une première hypothèse de modélisation peut être formulée en s'intéressant aux images de l'expérience TEXUS (figure IV.15, page 96). Le refroidisseur ne se déforme pratiquement pas au cours de l'expérience. Il sera donc considéré comme un solide indéformable. En conséquence, seul un calcul thermique sera effectué pour le refroidisseur alors qu'un calcul thermomécanique sera effectué pour la goutte. Après cette considération générale sur la modélisation, plusieurs aspects pratiques requièrent d'être précisés : 1. la géométrie initiale et le maillage, 2. les propriétés matériaux, 3. les conditions aux limites thermiques et mécaniques et 4. les paramètres de simulation.

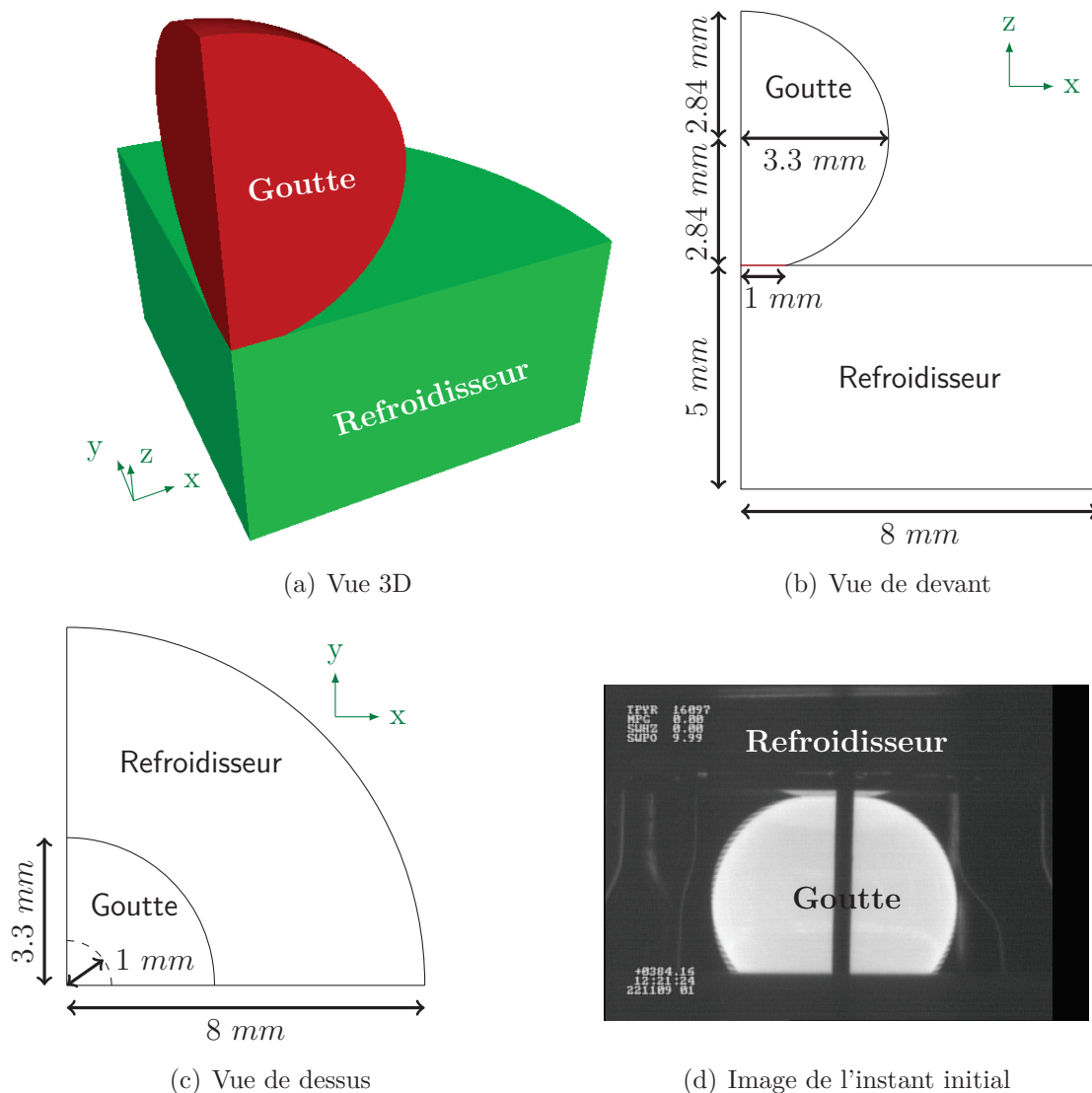
#### V.3.2.1 Géométrie initiale et maillage

L'instant initial ( $t = 0$  s) correspond à la fin du déplacement du refroidisseur vers la goutte. Tous les événements précédant ce contact ne sont pas pris en compte. La géométrie initiale de la goutte est déterminée à partir de la première image issue de la vidéo de l'expérience TEXUS (figure IV.15, page 96). La goutte est initialement une sphère légèrement aplatie aux pôles. La zone de contact entre la goutte et le refroidisseur est un disque de rayon estimé à environ 1 mm (section IV.2 du chapitre IV). La goutte ainsi que le refroidisseur sont représentés à  $t = 0$  s à la figure V.10. Pour des raisons de symétrie, le domaine de calcul correspond à un quart de la goutte et du refroidisseur. Leur géométrie connue, la goutte et le refroidisseur sont ensuite maillés comme montré à la figure V.11. Ils sont constitués par des tétraèdres isotropes et sont raffinés près de la surface de contact.

#### V.3.2.2 Propriétés matériaux

La goutte qui a servi pour l'expérience TEXUS est celle en alliage b1 dont la composition a été donnée au tableau IV.1. Les propriétés thermophysiques (masse volumique, conductivité thermique, capacité calorifique, chaleur latente) et thermomécaniques (consistance, coefficient de sensibilité à la vitesse de déformation, coefficient d'écroutissage, module d'Young et coefficient de Poisson) de l'alliage b1 nécessaires au calcul thermomécanique de la goutte sont données en annexe E. Les données thermophysiques ont été obtenues grâce à Thermocalc<sup>®</sup> et la base de données TCFE6 excepté pour la conductivité thermique qui a été reprise de Paccini [Pac02]. Les données thermomécaniques sont calculées à partir du modèle II de Kozlowski [Koz92]. Toutefois, pour se rapprocher de

l'expérience, l'évolution de la fraction solide et la masse volumique en fonction de la température ont été modifiées par rapport aux valeurs originales de Thermocalc<sup>®</sup>. En effet, le principal moteur de la déformation de la goutte est le retrait à la solidification. Comme on peut le voir sur les images de l'expérience TEXUS (figure IV.15, page 96), c'est au passage du front de solidification que se produit la déformation. Pour maximiser la déformation dans la simulation, une surfusion a été prise en compte afin de réduire l'intervalle de solidification et par conséquent de concentrer la déformation sur une faible épaisseur de zone pâteuse. La solidification ne débute alors qu'à la température de 1493°C au lieu de 1523°C. Ce changement a été répercuté sur l'évolution de la masse volumique. Ces modifications sont illustrées à la figure V.12.



**Fig. V.10:** Géométrie initiale de la goutte et du refroidisseur pour simuler l'expérience TEXUS

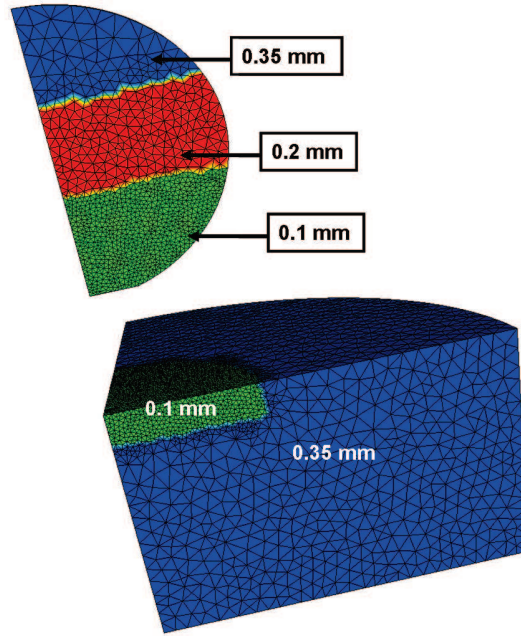
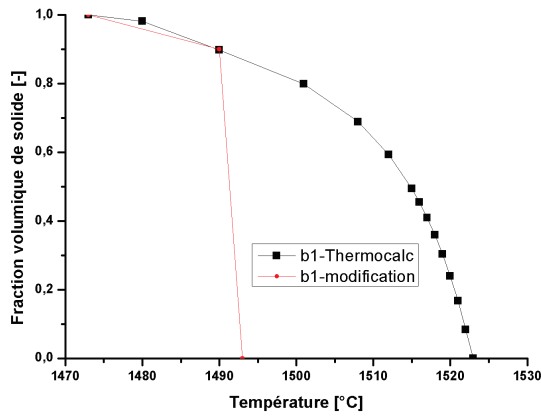
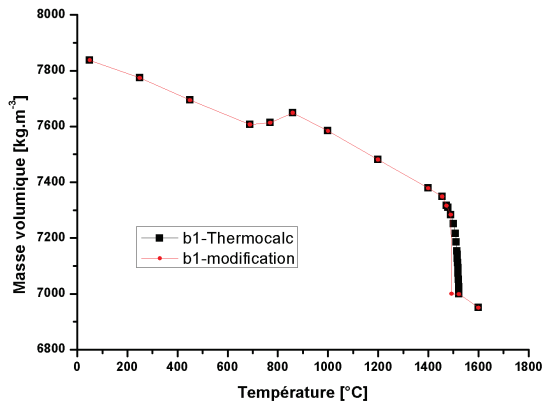


Fig. V.11: Maillages et taille de maille pour la goutte et le refroidisseur



(a) Fraction volumique de solide



(b) Masse volumique

Fig. V.12: Modifications de l'évolution de la fraction volumique de solide et de la masse volumique en fonction de la température pour l'alliage b1



La température critique  $T_C$  à laquelle s'effectue la transition entre un comportement élasto-viscoplastique et viscoplastique est fixée à un degré au-dessus de la température du liquidus de l'alliage b1, c'est-à-dire  $T_C = T_{liq} + 1 = 1494^\circ\text{C}$ .

Le refroidisseur est en nitrure de silicium  $Si_3N_4$ . Pour le refroidisseur, seul un calcul thermique est réalisé, ses déformations étant négligeables par rapport à celles de la goutte. Seules la masse volumique, la conductivité thermique et la capacité calorifique sont nécessaires au calcul. Les propriétés du  $Si_3N_4$  sont prises constantes et sont récapitulées ci-dessus [Gan09] :

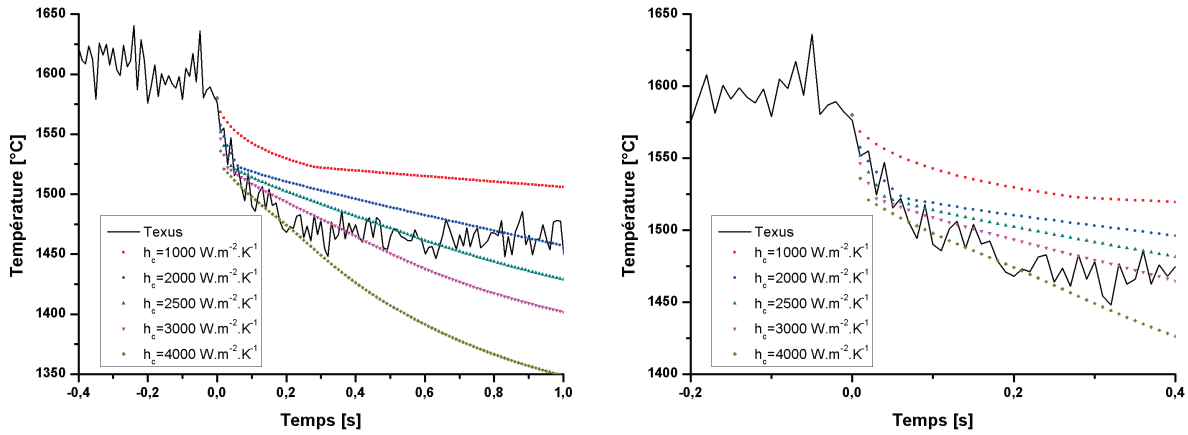
$$\begin{cases} \rho_{Si_3N_4} &= 3200 \text{ kg.m}^{-3} \\ c_{pSi_3N_4} &= 700 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1} \\ \kappa_{Si_3N_4} &= 50 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1} \end{cases}$$

### V.3.2.3 Conditions aux limites

Pour les conditions aux limites mécaniques, une condition de contact bilatéral collant est imposée à l'interface goutte/substrat. Les autres faces sont laissées libres. Ces conditions ont été choisies car d'après les images de l'expérience TEXUS (figure IV.15, page 96), la goutte et le substrat semble rester en permanence en contact pendant le refroidissement et sur les autres frontières, la goutte est libre de se déformer. Le contact bilatéral collant à l'interface goutte/substrat peut se justifier également par le fait que le déplacement de la surface libre est prépondérant par rapport à un éventuel décollement de la goutte. En ce qui concerne les conditions aux limites thermiques, l'énergie est principalement extraite au niveau de l'interface goutte/refroidisseur. Le coefficient de transfert thermique à l'interface goutte/substrat a donc été déterminé. On suppose que celui-ci est constant et on le prend égal à sa valeur initiale. La détermination du coefficient a été faite en procédant par calage thermique. Grâce au pyromètre axial de l'expérience TEXUS (figure IV.5 page 89), l'évolution de la température à l'interface goutte/substrat est connue. Plusieurs simulations ont été lancées en faisant varier le coefficient de transfert afin de déterminer celui qui entraîne une évolution de température ayant le meilleur accord avec la courbe expérimentale dans les premiers instants de refroidissement. Pour ces simulations, aucun calcul mécanique n'a été effectué pour la goutte. Seul le champ de température était calculé. Les propriétés thermophysiques de l'alliage ne prenaient pas en compte la surfusion. Pour les parois de la goutte en contact avec le gaz environnant, le transfert thermique est de type radiatif avec une émissivité de 0.3 et une température extérieure  $T_{ext}$  de  $20^\circ\text{C}$ . La température initiale de la goutte  $T_{init\ goutte}$  est de  $1580^\circ\text{C}$  et celle du refroidisseur  $T_{init\ refroidisseur}$  de  $25^\circ\text{C}$ . Le pas de temps est fixé constant à  $0.001\text{ s}$ . Les courbes obtenues sont montrées à la figure V.13. La valeur de  $2500\text{ W.m}^{-2}.\text{C}^{-1}$  pour le coefficient de transfert a été retenue.

Pour le calcul de la déformation de la goutte au cours de son refroidissement, les conditions aux limites thermiques ont été ajustées pour s'adapter au mieux à l'expérience. En dehors de la zone de contact, des échanges thermiques ont été ajoutés sur la surface latérale de la goutte. La figure V.14 montre les nouvelles conditions aux limites thermiques.

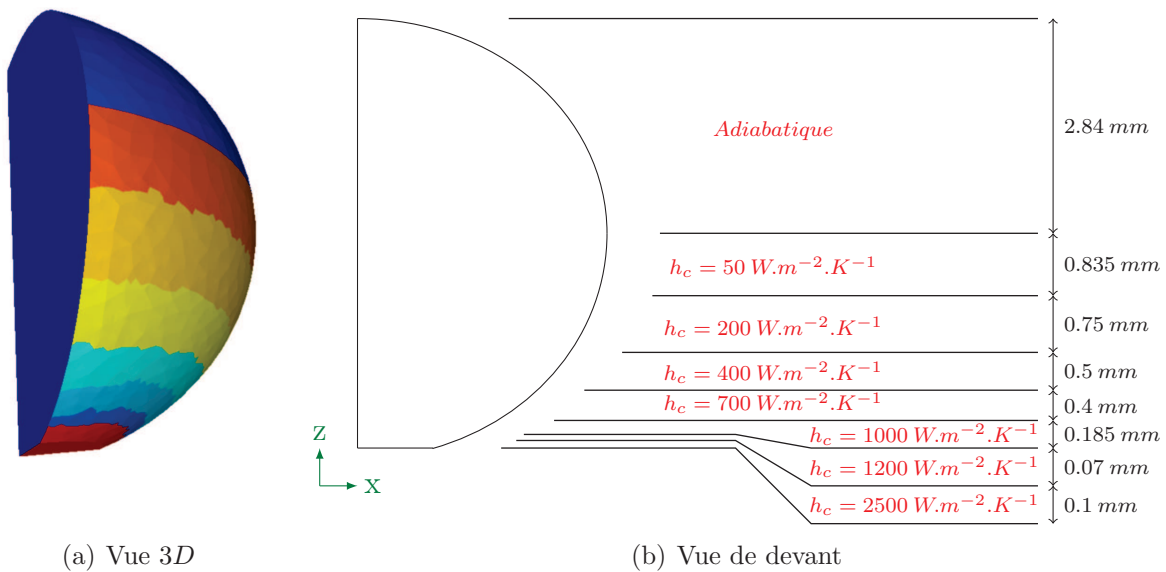




(a) Evolution entre  $-0.4$  s et  $1$  s

(b) Agrandissement entre  $-0.2$  s et  $0.4$  s

**Fig. V.13:** Evolution de la température du centre de la surface de la goutte en contact avec le refroidisseur en fonction du temps pour différentes valeurs du coefficient de transfert



(a) Vue 3D

(b) Vue de devant

**Fig. V.14:** Conditions aux limites thermiques pour la simulation de la déformation de la goutte de l'expérience TEXUS

### V.3.2.4 Paramètres de simulations

Pour la simulation, le pas de temps a été fixé à  $\Delta t = 0.01$  s et est constant tout le long de la simulation. La température initiale de la goutte est de  $1580^{\circ}\text{C}$ , celle du refroidisseur de  $25^{\circ}\text{C}$  et celle du gaz extérieur de  $20^{\circ}\text{C}$ . L'expérience TEXUS a été réalisée

en microgravité, le vecteur gravité  $\mathbf{g}$  a été pris à  $-10^{-7}\mathbf{z}$  [ $m.s^{-2}$ ],  $\mathbf{z}$  étant indiqué à la figure V.14. Les critères de convergence des itérations de Newton-Raphson du solveur thermique ont été choisis à :

$$\begin{cases} \max|T^{(n)} - T^{(n-1)}| & = 0.1^\circ\text{C} \\ \text{IterNrMax} & = 20 \end{cases}$$

avec  $(n)$  la  $n$ -ième itération de Newton-Raphson et  $\text{IterNrMax}$  le nombre maximal d'itérations de Newton-Raphson.

Les critères de convergence pour le solveur mécanique sont les suivants [Cos04] :

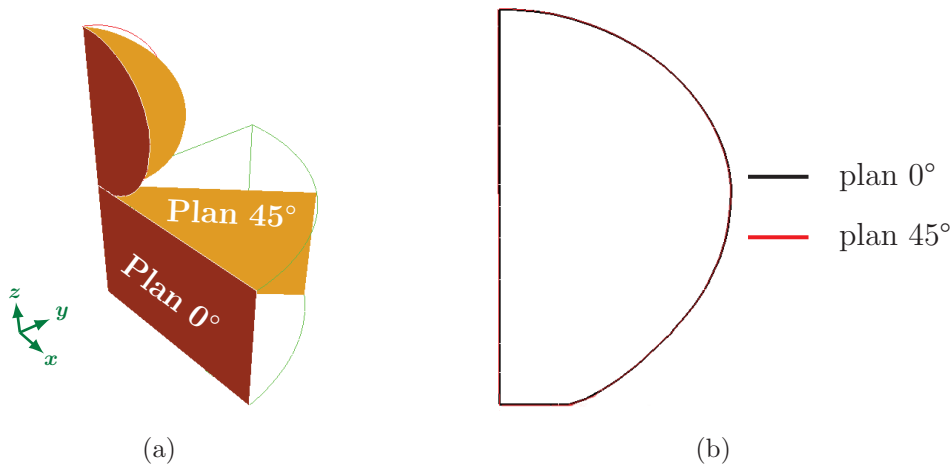
$$\begin{cases} \|R(\mathbf{v}, p)^{(n)}\| & = 10^{-9} N \\ \left\| \frac{R(\mathbf{v}, p)^{(n)} - R(\mathbf{v}, p)^{(n-1)}}{R(\mathbf{v}, p)^{(n-1)}} \right\| & = 10^{-6} \\ \text{IterNrMax} & = 100 \end{cases}$$

avec  $R(\mathbf{v}, p)^{(n)}$  le résidu en vitesse/pression à l'itération de Newton-Raphson  $(n)$ .

### V.3.2.5 Résultats

Le calcul a convergé thermiquement et, pour la mécanique, seuls trois incréments de temps ont nécessité d'aller jusqu'au nombre maximal d'itérations (100) car la convergence relative était de  $0.2 \times 10^{-5}$  au lieu de  $10^{-6}$ . A l'exception de ces trois pas de temps, le nombre moyen d'itérations mécaniques est de 5 lorsque la goutte présente une zone pâteuse, et une seule itération est nécessaire lorsque la goutte est complètement solide.

Avant de confronter les résultats numériques et expérimentaux, une première comparaison est faite sur la forme de la goutte après solidification totale dans deux plans différents comme montré à la figure V.15. Les plans sont le plan de symétrie de normale  $-\mathbf{y}$  (plan  $0^\circ$ ) et le plan formant un angle de  $45^\circ$  avec ce dernier.



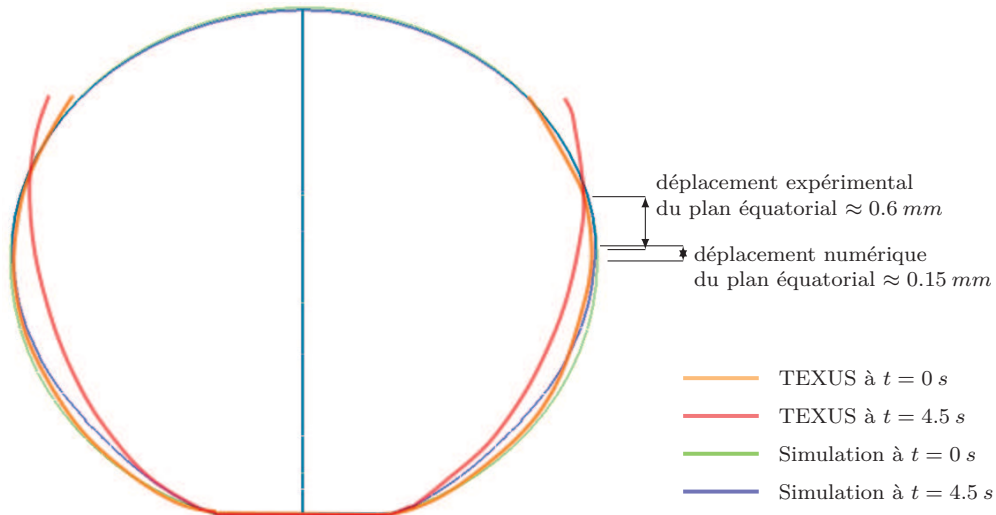
**Fig. V.15:** Plans en (a) pour lesquels sont superposées en (b) les formes de la goutte après solidification totale à  $t = 7 s$

Les différences morphologiques sont minimales. Les profils de la goutte sont quasi-identiques, ce qui était attendu du fait de la symétrie du problème. De ce fait, la comparaison des résultats numériques et expérimentaux pourra se faire pour un seul plan. Le plan  $0^\circ$  a été choisi.

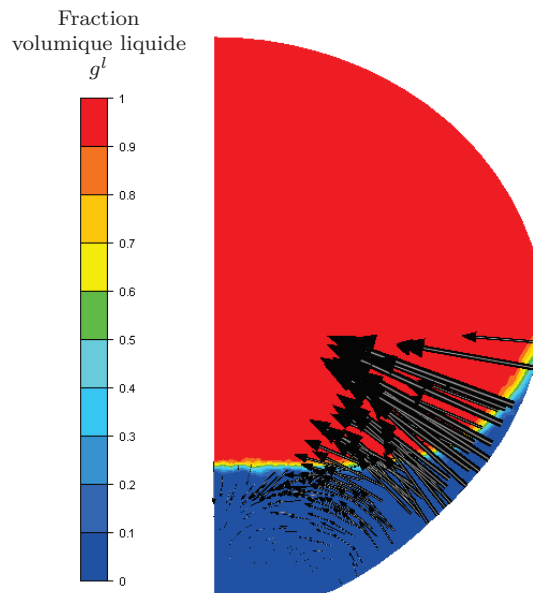
La confrontation des résultats numériques et expérimentaux se fait sur la déformation de la goutte à  $t = 4.5 \text{ s}$  comme illustrée à la figure V.16. Ce temps a été pris car c'est à cet instant que l'on dispose de la dernière image exploitable de l'expérience TEXUS. On constate que la déformation numérique de la goutte suit la même tendance que la déformation expérimentale. Grâce à l'ajout des conditions aux limites thermiques à la frontière avec l'extérieur ainsi qu'aux propriétés thermophysiques et thermomécaniques de l'alliage, le champ de vitesse  $g^s \mathbf{v}$  visualisé à la figure V.17 est orienté vers l'intérieur de la goutte. La goutte se contracte alors vers le centre avec un allongement dans le sens de l'axe  $z$ . Toutefois, le déplacement se concentre dans la partie basse de la goutte avec une intensité inférieure à celle de l'expérience. Ceci se traduit par un allongement vertical moindre de la goutte numérique. Ne disposant pas de la forme complète de la goutte au cours de l'expérience, nous prenons comme indicateur de l'allongement vertical le déplacement selon  $z$  du plan équatorial horizontal comme montré à la figure V.16. L'allongement vertical mesuré à  $0.6 \text{ mm}$  dans l'expérience est de  $0.15 \text{ mm}$  dans la simulation.

Les différences d'amplitudes peuvent avoir plusieurs origines. Tout d'abord, la géométrie numérique initiale de la goutte ne se superpose pas parfaitement à celle de l'expérience. La goutte expérimentale semble déjà plus allongée à l'instant initial. De plus, certains paramètres de l'expérience ne sont pas pris en compte ou connus. En particulier, il n'est pas tenu compte dans la simulation de la tension de surface. Le vecteur gravité n'est pas connu pour l'expérience et a été arbitrairement choisi tel que  $\mathbf{g} = -10^{-7} \mathbf{z} [m.s^{-2}]$ . Son intensité pourrait être plus élevée et surtout le vecteur pourrait être orienté vers les  $z$  positifs, ce qui contribuerait à favoriser l'allongement numérique de la goutte. Enfin, il existe d'autres modèles pour déterminer les coefficients des lois de comportement notamment celui de K.H. Kim [Kim96] ou celui de K. Harste [Har92]. Enfin, une autre source d'amélioration concerne l'évolution thermique de la goutte. A la figure V.18, sont comparées les températures mesurées au cours de l'expérience Texus et celles obtenues par la simulation numérique. Les points 1 et 2 correspondent respectivement aux endroits où sont mesurées les températures par les pyromètres axial et latéral. Les températures simulées sont proches de celles de l'expérience jusqu'à environ  $t = 0.5 \text{ s}$ , au-delà de cet instant la température simulée décroît plus rapidement. Un coefficient de transfert thermique variant dans le temps serait à même de mieux représenter les échanges thermiques à la surface. Du fait de cette décroissance thermique plus rapide, la solidification de la goutte est accélérée par rapport à l'expérience. Les évolutions expérimentale et simulée du front de solidification sont comparées à la figure V.19. Les mesures de la distance du front de solidification par rapport au refroidisseur en fonction du temps ont été effectuées par les chercheurs du centre aérospatial allemand, partenaire du projet, grâce aux images de l'expérience TEXUS. Pour la simulation, le front de solidification est choisi coïncidant avec la position de l'isovaleur 0.5 de la fraction volumique de liquide. La position a été relevée au centre de la goutte ainsi qu'à la frontière avec l'extérieur. La propagation numérique du front est plus rapide. Le front se déplace à une vitesse d'environ  $0.7 \text{ mm.s}^{-1}$  expérimentalement alors qu'elle est en moyenne de  $0.85 \text{ mm.s}^{-1}$  numériquement. L'ajout

de conditions thermiques à la frontière entraîne une accélération de la solidification à cet endroit jusqu'à mi-hauteur de la goutte. A partir de ce point, la goutte est isolée thermiquement, ce qui ralentit la propagation. La position du front à la frontière se rapproche de celle du centre de la goutte. Un nouveau calage thermique pourrait être envisagé.



**Fig. V.16:** Comparaison morphologique de la goutte après 4.5 s de refroidissement entre la simulation numérique (plan  $0^\circ$ ) et l'expérience TEXUS



**Fig. V.17:** Champ de vitesse  $g^s \mathbf{v}$  et de fraction volumique liquide  $g^l$  à 1.5 s de refroidissement ( $\max \|g^s \mathbf{v}\| = 5.5 \times 10^{-5} \text{ m.s}^{-1}$ )

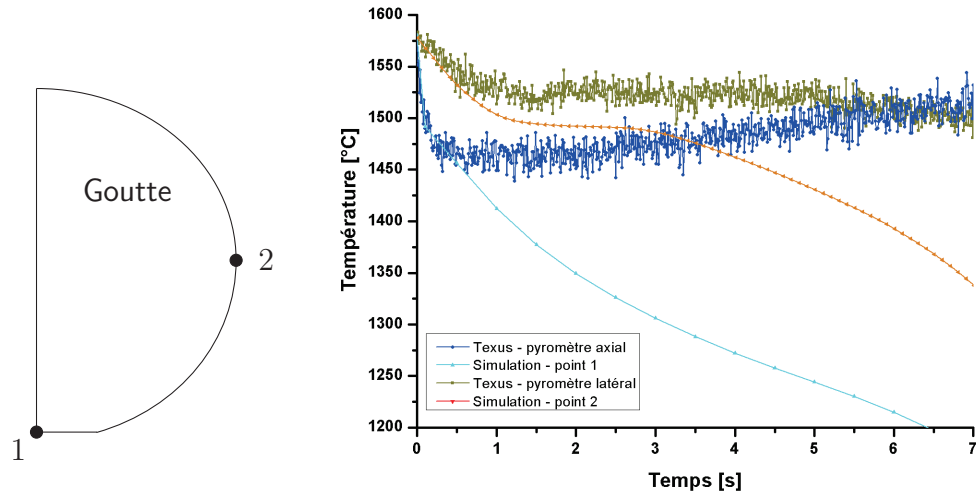


Fig. V.18: Comparaison entre les températures mesurées au cours de l'expérience Texas et celles obtenues par la simulation numérique

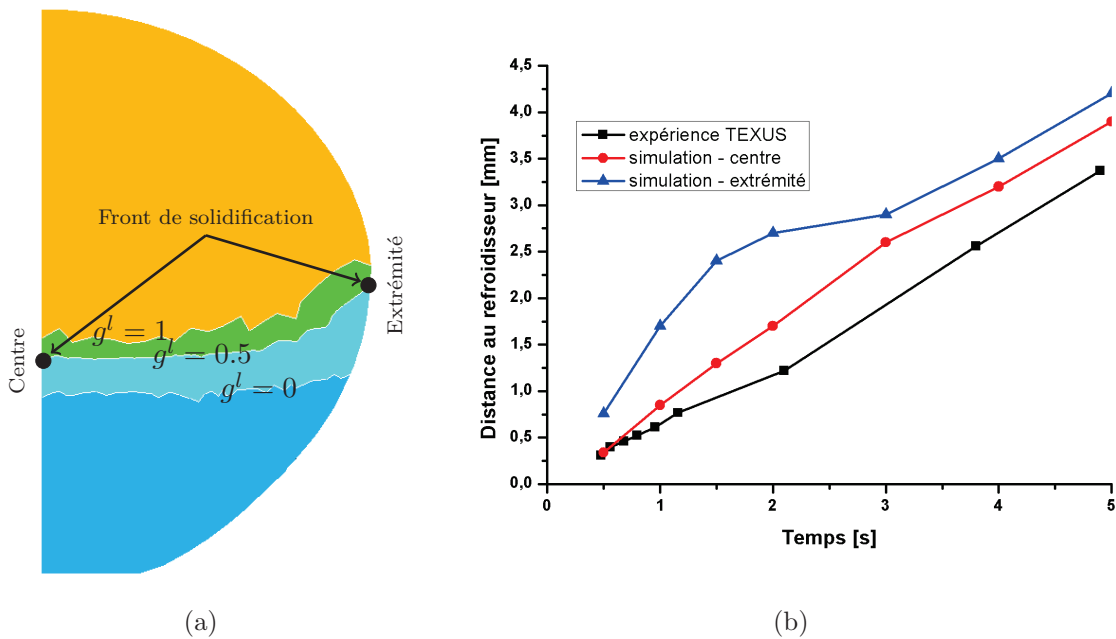


Fig. V.19: Isoplèthes de fraction volumique de liquide  $g^l$  à  $t = 2.5$  s en (a). Comparaison de la position du front de solidification au cours du temps en (b). Pour la simulation, la position du front est relevée au centre ou à l'extrémité de la goutte comme indiquée par les points noirs en (a).

Bien que la déformation numérique obtenue pour la goutte ne reproduise que partiellement et avec une intensité moindre la déformation expérimentale, nous allons ajouter à ce calcul de déformation la résolution de la macroségrégation.

## V.4 Macroségrégation en peau à solide déformable

Cette section a pour objet la simulation de la macroségrégation en peau induite par une déformation du solide. Le calcul sera tout d'abord appliqué à l'expérience TEXUS puis à celle de El-Bealy. Avant de détailler ces simulations, les équations à résoudre ainsi que le schéma de résolution du couplage de celles-ci sont présentés.

### V.4.1 Rappel des équations à résoudre

Les équations à résoudre sont celles du tableau II.4 (page 42). Pour résoudre ce système d'équations, comme montré à la figure III.3 page 51, l'étape 1 de la macroségrégation à solide fixe est combinée avec l'étape 2 de la déformation du solide. Cette approche implique la résolution d'un système d'équations qui diffère quelque peu du système initial du tableau II.4. On détaille ci-après les équations résolues.

#### Conservation de l'énergie

L'équation de conservation de l'énergie est présentée ci-dessous (section III.3 du chapitre III) :

$$\langle \rho \rangle \frac{\partial \langle h \rangle_m}{\partial t} + \langle \rho \mathbf{v} \rangle \cdot \nabla \langle h \rangle_m + L f^s f^l \langle \rho \rangle \nabla \cdot (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) - \nabla \cdot (\langle \kappa \rangle \nabla T) = 0 \quad (\text{V.4.1})$$

#### Conservation des espèces chimiques

L'équation de conservation des espèces chimiques est rappelée ci-dessous (section III.4 du chapitre III) :

$$\begin{aligned} \langle \rho \rangle \frac{\partial \langle w_i \rangle_m}{\partial t} + \langle \rho \mathbf{v} \rangle \cdot \nabla \langle w_i \rangle_m + (1 - k_i) f^s f^l \langle \rho \rangle w_i^l \nabla \cdot (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) \\ + (1 - k_i) f^s f^l \langle \rho \rangle (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) \cdot \nabla w_i^l - \nabla \cdot (g^l D_i^l \rho^l \cdot \nabla w_i^l) = 0 \end{aligned} \quad (\text{V.4.2})$$

#### Mécanique des fluides

Le système d'équations résolu pour la conservation de la quantité de mouvement et de la masse pour le liquide est le suivant :

$$\begin{cases} \rho_{liq} \frac{\partial \langle \mathbf{v}^l \rangle}{\partial t} + \frac{\rho_{liq}}{g^l} [\nabla \langle \mathbf{v}^l \rangle] \langle \mathbf{v}^l \rangle - \mu^l \nabla \cdot (\nabla \langle \mathbf{v}^l \rangle) \\ \quad + g^l \nabla p^l - g^l \rho^l \mathbf{g} + \frac{\mu^l}{K_{perm}} g^l (\langle \mathbf{v}^l \rangle - g^l \mathbf{v}^s) = 0 \\ \nabla \cdot \langle \mathbf{v}^l \rangle = 0 \end{cases} \quad (\text{V.4.3})$$

Par rapport au système résolu pour la macroségrégation à solide fixe et rigide, la masse volumique du liquide  $\rho^l$  a été prise constante et égale à  $\rho_{liq}$  où  $\rho_{liq}$  est la masse volumique du liquide à la température du liquidus sauf dans le terme de gravité où  $\rho^l$  est donnée par l'expression V.4.5. De plus l'équation V.4.3 de conservation de la quantité de mouvement dans le liquide diffère également de celle résolue en macroségrégation à solide fixe par le terme supplémentaire  $-\frac{\mu^l}{K_{perm}} g^l (g^l \mathbf{v}^s)$ .

### Mécanique du solide

En ce qui concerne la mécanique du solide, on résout sur l'ensemble du domaine  $\Omega^t$  le système suivant (section III.5 du chapitre III) :

$$\begin{cases} \nabla \cdot (\mathbb{s}) - \nabla p + \langle \rho \rangle \mathbf{g} - \langle \rho \rangle \frac{d\mathbf{v}}{dt} = 0 \\ \text{Tr}(\dot{\mathbf{e}}^{vp}) = 0 \end{cases} \quad (\text{V.4.4})$$

avec

- pour le comportement élasto-viscoplastique :

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\dot{\mathbf{e}}^{vp}) &= \text{Tr}(\dot{\mathbf{e}}) - \text{Tr}(\dot{\mathbf{e}}^{el}) - \text{Tr}(\dot{\mathbf{e}}^{th}) \\ &= \nabla \cdot \mathbf{v} + \frac{\dot{p}}{\chi} - \frac{\dot{\chi}}{\chi^2} p - \frac{1}{\langle \rho \rangle} \frac{d\langle \rho \rangle}{dt} \end{aligned}$$

- pour le comportement viscoplastique :

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\dot{\mathbf{e}}^{vp}) &= \text{Tr}(\dot{\mathbf{e}}) - \text{Tr}(\dot{\mathbf{e}}^{th}) \\ &= \nabla \cdot \mathbf{v} - \frac{1}{\langle \rho \rangle} \frac{d\langle \rho \rangle}{dt} \end{aligned}$$

La résolution de toutes ces équations se fait grâce à la méthode des éléments finis à laquelle sont adjointes des méthodes de stabilisation. Les détails de la résolution pour chacune de ces équations ont été présentés au chapitre III. A l'issue de cette résolution, les variables  $\mathbf{v}$  et  $p$  sont connues. Pour le couplage, elles seront assimilées respectivement à  $\mathbf{v}^s$  et  $p^s$  dans les zones solide et pâteuse. Dans la zone liquide,  $\mathbf{v}$  et  $p$  ne sont pas retenues car la vitesse et la pression du liquide sont calculées à l'étape précédente de mécanique des fluides.

### V.4.2 Schéma de résolution

Le système d'équations à résoudre dans le cadre de la macroségrégation à solide déformable est un système couplé. Comme dans le cas de la macroségrégation à solide fixe et rigide, le couplage mis en place est un couplage faible avec utilisation des valeurs les plus récentes des variables. A chaque incrément de temps, les équations ne sont résolues qu'une fois avec mise à jour de  $g^l$ ,  $T$  et  $w_i^l$  dès qu'elles sont calculées. Le déroulement d'un incrément de temps, illustré à la figure V.20, se fait en sept étapes :

au temps  $t$ , sur le domaine  $\Omega^t$  :

1. Conservation de l'énergie :  $\langle h \rangle_m^t$  ;
2. Conservation des espèces chimiques :  $\langle w_i \rangle_m^t$  ;
3. Résolution du modèle de microségrégation :  $T^t$ ,  $g^t$ ,  $w_i^t$  et  $\frac{\partial T}{\partial \langle h \rangle_m}{}^t$  ;
4. Mise à jour de la masse volumique :

$$\rho^{lt} = \rho_{liq} \left( 1 - \beta_T(T^t - T_{ref}) - \sum_{i=1}^{neltall} \beta_{w_i}(w_i^t - w_{ref_i}) \right) \quad (\text{V.4.5})$$

A l'instant  $t$ , sur le domaine  $\Omega^t$  :

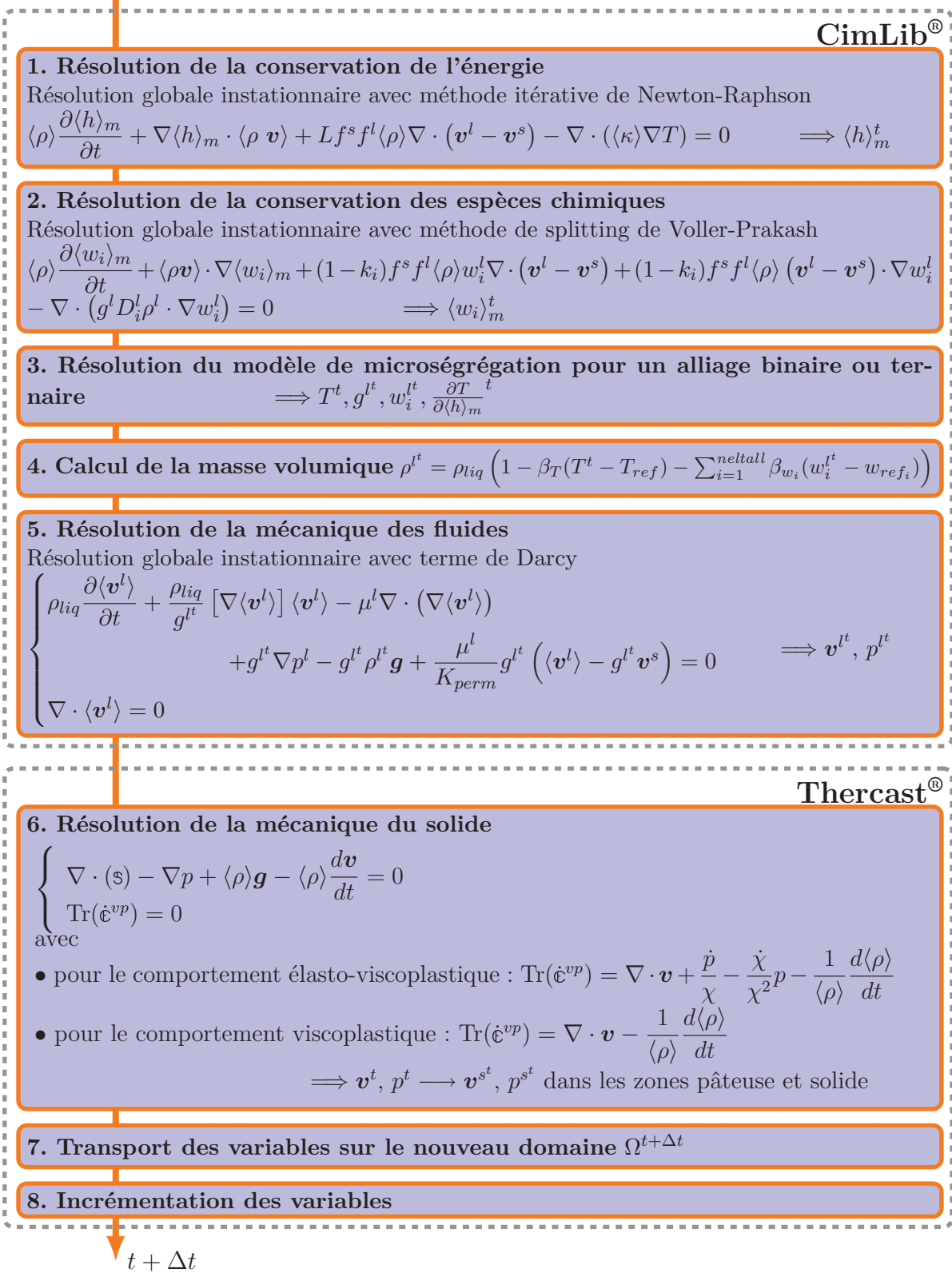


Fig. V.20: Schéma de résolution du couplage des équations pour le calcul de la macroségrégation à solide déformable



5. Résolution de la mécanique des fluides :  $\mathbf{v}^t, p^t$  ;
6. Résolution de la mécanique du solide :  $\mathbf{v}^t, p^t \longrightarrow \mathbf{v}^{st}, p^{st}$  dans les zones pâteuse et solide ;
7. Transport des variables et actualisation du maillage par la méthode ALE ;
8. Incrémentation des variables.

Ce schéma de couplage présente deux particularités :

- a. La première particularité est qu'il fait appel à deux plateformes de calcul. Les étapes 1 à 5 sont gérées par CimLib<sup>®</sup> alors que les étapes 6 à 8 sont régies par Theracast<sup>®</sup>.
- b. La seconde particularité est qu'il mélange des équations écrites en formulation lagrangienne (mécanique du solide) avec des équations écrites en formulation eulérienne (énergie, espèces chimiques et mécanique des fluides). Cette hétérogénéité soulève une difficulté concernant le transport des variables. En effet, suite à la déformation du solide, le maillage est actualisé par la méthode ALE présentée à la section III.5.2 du chapitre III. Les nœuds EVP se déplacent à la vitesse  $\mathbf{v}$  tandis que les nœuds VP se déplacent à la vitesse  $\mathbf{v}_{mai}$ . Les variables lagrangiennes ne sont dans ce cas transportées que pour les nœuds VP à la vitesse  $\mathbf{v}_{mai}$ . Ce schéma ne peut pas s'appliquer aux variables eulériennes qui doivent être transportées sur tout le maillage : à la vitesse  $\mathbf{v}$  pour les nœuds EVP et à la vitesse  $\mathbf{v}_{mai}$  pour les nœuds VP. La méthode de transport a donc été adaptée afin de prendre en compte cette particularités pour les variables eulériennes.

### V.4.3 Application à l'expérience TEXUS

Dans cette section, le couplage entre macroségrégation et déformation du solide est appliqué à l'expérience TEXUS. Les informations concernant la modélisation numérique ainsi que les résultats obtenus sont présentés ci-après.

#### V.4.3.1 Modélisation numérique et paramètres de simulation

La mise en donnée numérique est similaire à celle utilisée pour la déformation du solide. Le même maillage de tétraèdres a été pris pour la goutte et le refroidisseur (figure V.11). Les mêmes conditions mécaniques et thermiques ont été appliquées aux frontières. Des conditions solutales ont été ajoutées : flux nul d'espèces chimiques sur toutes les parois de la goutte.

Le matériau utilisé est également l'alliage b1 mais pour lequel un seul élément d'alliage a été considéré. L'alliage b1 est donc pris pour ce calcul en tant qu'alliage binaire : Fe-0.105%pdsC. De ce fait, les propriétés thermomécaniques et thermophysiques utilisées diffèrent de celles prises pour la simulation de la section précédente. Les valeurs des propriétés et leur évolution avec la température sont données en annexe F. Le choix des valeurs de ces propriétés est plus délicat dans le cas du calcul couplé macroségrégation-déformation. En effet, le calcul couplé requiert d'utiliser deux plateformes : Theracast<sup>®</sup> qui gère la mécanique du solide et CimLib<sup>®</sup> qui gère l'énergie, la ségrégation et la mécanique

du liquide. Cette dualité génère une particularité dans la mise en donnée. En effet, les données à fournir à Theracast<sup>®</sup> doivent être fixées avant le calcul, c'est-à-dire comme s'il n'y avait pas de macroségrégation. Or notre calcul couplé prévoit ces macroségrégations. Pour la résolution de mécanique du solide par Theracast<sup>®</sup>, il n'y aura donc pas d'influence de la macroségrégation sur les propriétés thermophysiques et thermomécaniques. Seule la dépendance avec la température peut être prise en compte. Ceci s'applique notamment pour la masse volumique dont on doit connaître l'évolution y compris dans l'intervalle de solidification, la consistance qui dépend de la teneur en carbone d'après le modèle de Kozłowski II [Koz92] et pour la température critique ( $T_C = T_{liq} + 1$ ) de transition entre le comportement élasto-viscoplastique et purement viscoplastique qui dépend de la température du liquidus et donc de la ségrégation. Afin d'éliminer cette dépendance en concentration de carbone pour pouvoir entrer les données et faire le calcul de mécanique du solide, une concentration en carbone de référence pour Theracast<sup>®</sup> doit être fixée. Cette concentration de référence est choisie égale à la concentration initiale de l'alliage, soit 0.105%*pdsC*. Ceci permet directement de calculer la consistance (cf. annexe F). La masse volumique et la température critique sont déterminées grâce à Thermocalc<sup>®</sup> en supposant la solidification en système fermé, c'est-à-dire sans macroségrégation, de l'alliage binaire Fe-0.105%*pdsC* en loi des leviers. La température du liquidus est de 1530°C et donc la température critique  $T_C = T_{liq} + 1$  est de 1531°C. L'évolution thermique de la masse volumique est donnée en annexe F. Les masses volumiques au liquidus  $\rho_{liq}$  et au solidus  $\rho_{sol}$  intervenant dans les équations de l'énergie, du soluté et la mécanique du liquide sont donc de 7025  $kg.m^{-3}$  et 7306  $kg.m^{-3}$  respectivement. Cependant, pour la résolution de la mécanique du liquide,  $\rho^l$  aura bien la forme indiquée par l'égalité V.4.5, c'est-à-dire que pour la mécanique du liquide, il y a bien influence de la concentration sur la masse volumique via l'approximation de Boussinesq.

Le calcul de la macroségrégation requiert une chaleur massique constante. Elle a été prise égale à 661  $J.kg^{-1}.°C^{-1}$ . La conductivité a également été prise constante à 42  $W.m^{-1}.°C^{-1}$  par souci de simplification.

Les paramètres suivants de simulation ont été pris : pas de temps constant  $\Delta t = 0.001s$  et gravité  $\mathbf{g} = -10^{-7} \mathbf{z} [m.s^{-2}]$ . Les critères de convergence mécanique sont les suivants :

$$\left\{ \begin{array}{l} \|R(\mathbf{v}, p)^{(n)}\| = 10^{-9} N \\ \left\| \frac{R(\mathbf{v}, p)^{(n)} - R(\mathbf{v}, p)^{(n-1)}}{R(\mathbf{v}, p)^{(n-1)}} \right\| = 10^{-5} \\ IterNrMax = 50 \end{array} \right.$$

Comme le solveur énergétique utilisé (résolution en enthalpie) n'est pas le même que celui de la simulation précédente (résolution en température), les critères de convergence sont ceux évoqués à la section III.3 du chapitre III. Les valeurs suivantes ont été prises :

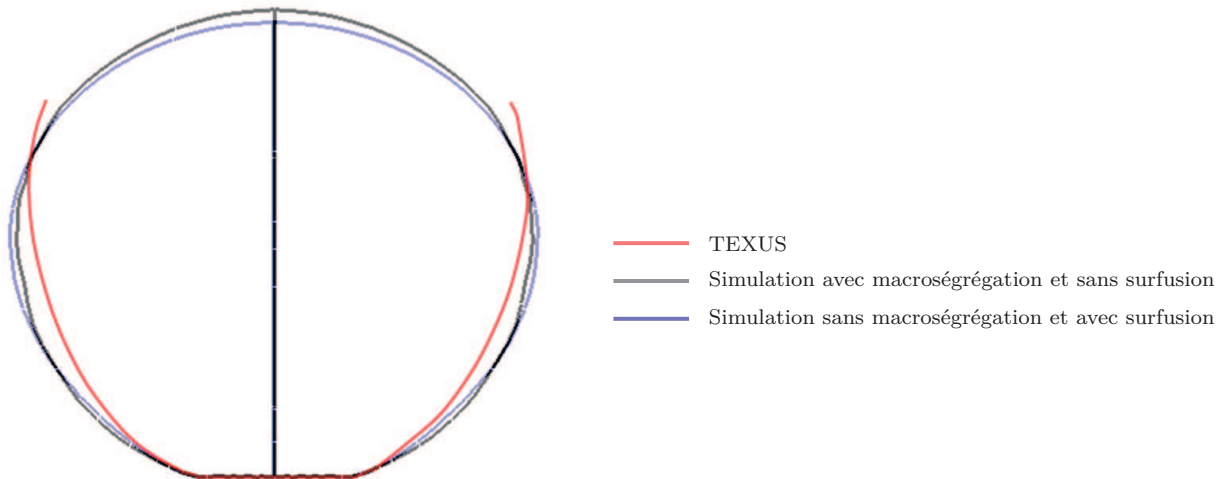
$$\left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_T = 10^{-3} °C \\ \varepsilon_H = 10^{-5} \\ IterNrMax = 30 \end{array} \right.$$

### V.4.3.2 Résultats

Le calcul s'est bien déroulé avec convergence mécanique et thermique à chaque pas de temps. Il faut en moyenne 3 itérations de Newton-Raphson pour converger en thermique et en moyenne 2 itérations pour converger mécaniquement.

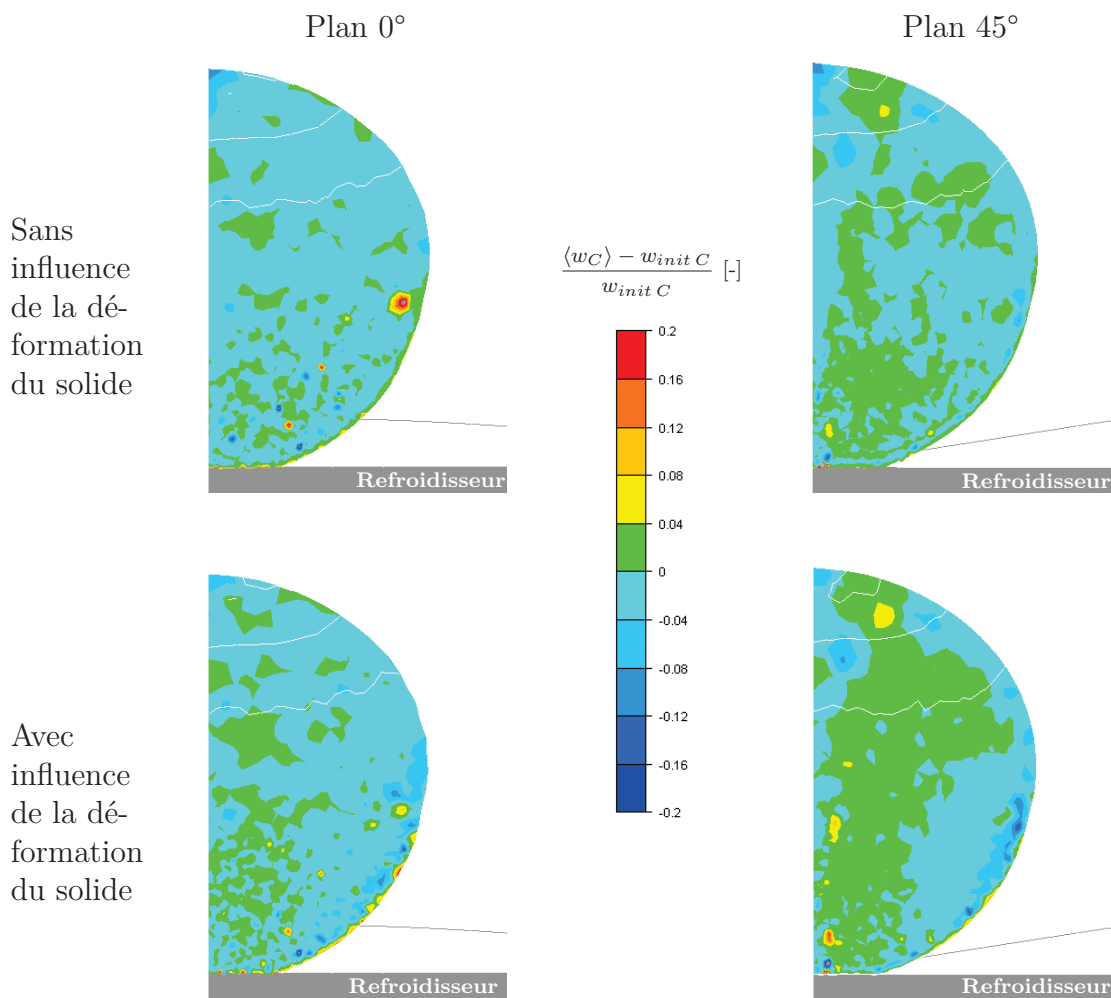
Dans le but d'étudier l'influence de la déformation du solide sur la macroségrégation, deux simulations ont été lancées : une avec effet de la déformation et une sans effet. La première simulation consiste à résoudre les équations telles qu'elles ont été présentées à la section V.4.1. La deuxième simulation concernant le calcul de la macroségrégation sans effet de la déformation a consisté à fixer  $\mathbf{v}^s = 0 \text{ m.s}^{-1}$  dans les équations de l'énergie, des espèces chimiques et de la vitesse liquide.

Avant de regarder les cartes de macroségrégation, on s'intéresse tout d'abord à la déformation de la goutte. A la figure V.21, la morphologie de la goutte est comparée à sa forme expérimentale ainsi qu'à celle obtenue à la simulation précédente (sans macroségrégation) à  $t = 4.5 \text{ s}$ . Ce nouveau calcul, comme le précédent, suit la tendance expérimentale mais avec une intensité moindre. Cependant il a permis de déformer la partie centrale de la goutte de manière plus importante et de pouvoir ainsi surélever le sommet de la goutte, la partie basse de la goutte s'étant moins déplacée. Les deux simulations semblent se compléter. Un calcul avec macroségrégation et surfusion permettrait d'obtenir de meilleurs résultats. L'ajout de la surfusion dans le modèle de macroségrégation fait l'objet actuellement d'une thèse au CEMEF.



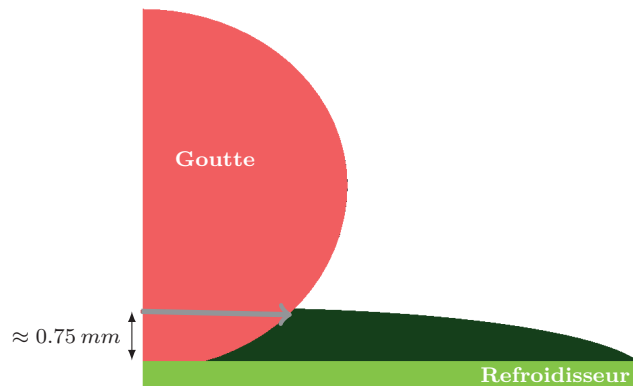
**Fig. V.21:** Comparaison à  $t = 4.5 \text{ s}$  de la forme de la goutte entre l'expérience, la simulation sans macroségrégation et avec surfusion, et avec macroségrégation et sans surfusion

La comparaison des résultats avec et sans influence de la déformation se fait au travers des cartes de ségrégation du carbone ( $\frac{\langle w_C \rangle - w_{init C}}{w_{init C}}$ ) illustrées à la figure V.22. Les cartes de macroségrégation sont présentées dans le plan de symétrie d'axe normal  $-\mathbf{y}$  (plan  $0^\circ$ ) et dans le plan formant un angle de  $45^\circ$  avec ce dernier (figure V.15(a)). On constate que la ségrégation est perturbée et que les cartes de ségrégation sont différentes. Les oscillations peuvent venir de la méthode de transport des variables ou encore du maillage pas assez raffiné. Toutefois, une macroségrégation plus élevée semble présente vers le centre de la goutte dans le cas où la déformation du solide est prise en compte. Pour mieux se rendre compte de l'influence de la déformation sur la macroségrégation, des profils de ségrégations sont tracés suivant la distance à l'axe central de la goutte. Ils sont représentés à la figure V.23.

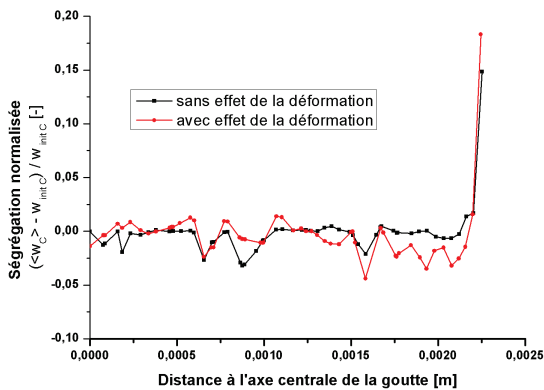


**Fig. V.22:** Cartes de ségrégation normalisée  $\frac{\langle w_C \rangle - w_{init C}}{w_{init C}}$  [-] à  $t = 5.6$  s pour le calcul de macroségrégations avec ou sans influence de la déformation du solide. Les trois lignes blanches correspondent aux trois isovaleurs de la fraction volumique de solide : de bas en haut,  $g^s = 1$ ,  $g^s = 0.5$  et  $g^s = 0$ .

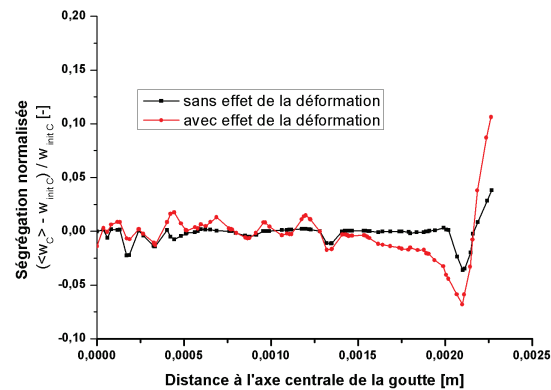
Les profils obtenus dans le plan à  $0^\circ$  et à  $45^\circ$ , avec ou sans influence de la déformation du solide, suivent la même tendance. Ils présentent le profil caractéristique de la ségrégation inverse, c'est-à-dire une ségrégation positive en surface suivie d'une ségrégation négative. Toutefois l'intensité de ces ségrégations diffère pour les deux calculs. Elle est plus importante dans le cas où la déformation est prise en compte et la ségrégation négative s'étend sur une plus grande zone. Ces différences peuvent se comprendre en observant les champs de vitesse solide et liquide montrés à la figure V.24. Un champ horaire de vitesse liquide d'intensité équivalente à celle de la vitesse du solide se développe sous l'effet de la déformation du solide, ce qui entraîne un "lavage" dans la zone pâteuse. Les espèces chimiques sont transportées vers le centre de la goutte accentuant ainsi la ségrégation au niveau de la surface. Dans le cas où la déformation du solide n'est pas prise en compte, le liquide ne s'écoule pas puisque le solide n'agit pas sur le liquide et la gravité étant trop faible, aucun mouvement de convection n'apparaît.



(a) Ligne suivant laquelle sont tracés les profils de ségrégation

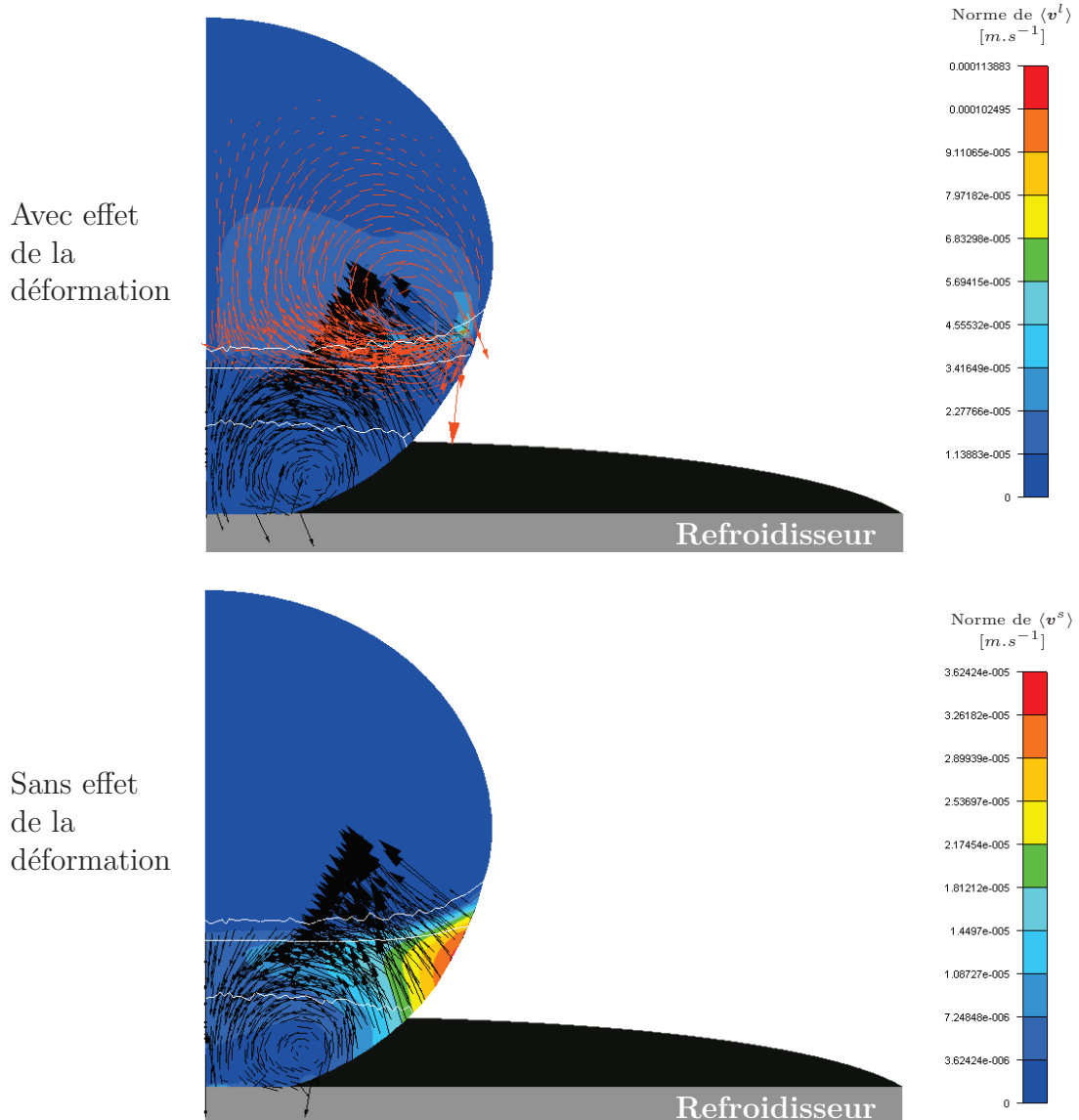


(b) Plan  $0^\circ$



(c) Plan  $45^\circ$

**Fig. V.23:** Profils de ségrégation du carbone suivant la distance à l'axe central de la goutte (flèche grise dans (a)) avec ou sans influence de la déformation du solide



**Fig. V.24:** Champ de vitesse solide  $\langle v^s \rangle$  (couleur noire) et liquide  $\langle v^l \rangle$  (couleur orange) à  $t = 1.5$  s pour le calcul de macroségrégations avec ou sans influence de la déformation. Les trois lignes blanches correspondent aux trois isovaleurs de la fraction volumique de solide : de bas en haut,  $g^s = 1$ ,  $g^s = 0.5$  et  $g^s = 0$ .

En effectuant ces deux simulations avec et sans influence de la déformation du solide, des différences de ségrégations apparaissent. Cependant les analyses chimiques des gouttes présentées à la section IV.3 du chapitre précédent ne nous permettent pas de confronter les résultats numériques avec les résultats expérimentaux. Pour lever cet obstacle, un calcul a été lancé afin de reproduire l'expérience de El-Bealy pour laquelle des mesures de concentration ont été effectuées après solidification totale du lingotin. Ceci fait l'objet du paragraphe suivant.

#### V.4.4 Application à l'expérience de El-Bealy

Dans cette section, le détail de la modélisation numérique ainsi que la confrontation des résultats avec l'expérience de El-Bealy sont présentés.

##### V.4.4.1 Modélisation numérique

La modélisation de l'expérience de El-Bealy est reprise de la modélisation 1D de Niane [Nia04] et adaptée pour un calcul 3D.

##### Géométrie initiale et maillage

Puisque l'expérience visait à produire une solidification unidirectionnelle, l'ensemble du lingotin (12 cm de haut, 8 cm de large et 10 cm de long, figure IV.21 du chapitre précédent) n'est pas représenté. Seule une tranche du lingotin constitue le domaine de calcul, la plus grande dimension étant suivant l'axe de propagation de la solidification. Le domaine de calcul est représenté avec son maillage à la figure V.25. Il s'agit d'un parallélépipède rectangle de section carrée  $10 \times 10 \text{ mm}^2$  et d'une hauteur de 109 mm. La solidification se produit suivant l'axe  $z$  de bas en haut. Pour maintenir cette colonne droite au cours du calcul, Thercast<sup>®</sup> permet d'ajouter des moules virtuels autour de la barre. Les moules virtuels sont des objets similaires à des moules normaux mais dans lesquels aucun calcul thermique et mécanique n'est effectué. Ils ne sont pas maillés et seules les conditions de contact thermique, solutal et mécanique entre les moules virtuels et le métal doivent être définies.

##### Conditions aux limites

Dans cette section, les conditions aux limites appliquées entre le métal et les moules virtuels ainsi qu'entre le métal et l'extérieur sont définies et illustrées à la figure V.26. Au cours de la simulation, quatre équations doivent être résolues pour obtenir les valeurs de  $\langle h \rangle_m$ ,  $\langle w \rangle_m$ ,  $\langle \mathbf{v}^l \rangle$  et  $\langle \mathbf{v}^s \rangle$ . Pour résoudre chacune de ces équations, les conditions aux limites suivantes sont appliquées :

- *Conditions aux limites thermiques*

Dans l'expérience de El-Bealy, le refroidissement du lingotin se fait de  $t = 0$  à 20 s par air puis refroidissement par air et eau jusqu'à  $t = 40$  s et enfin refroidissement par air jusqu'à la fin de l'expérience. Au cours de ce refroidissement, le métal se contracte et une lame d'air se crée entre le métal et la plaque où est appliquée le refroidissement. Cette lame d'air varie au cours du temps. La variation d'extraction

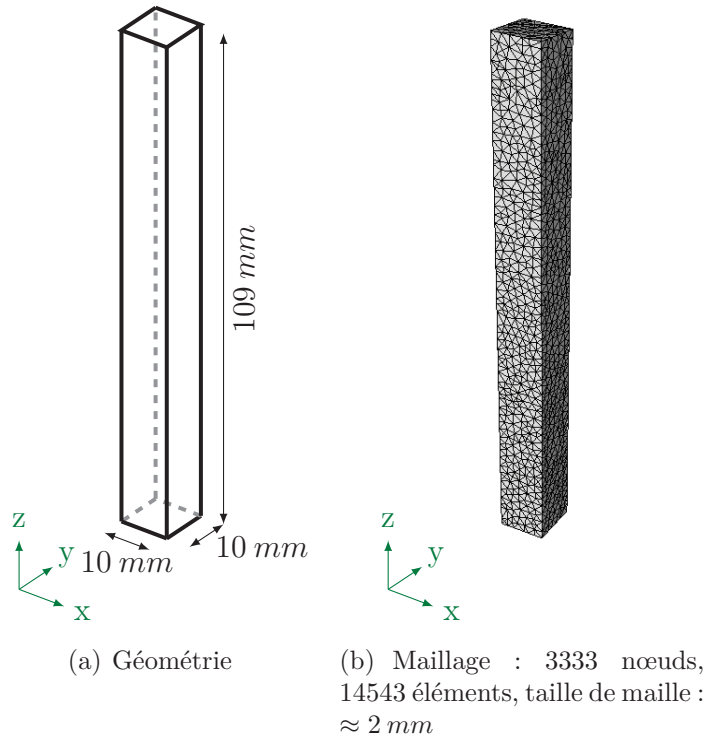


Fig. V.25: Géométrie et maillage pour la simulation de l'expérience de El-Bealy

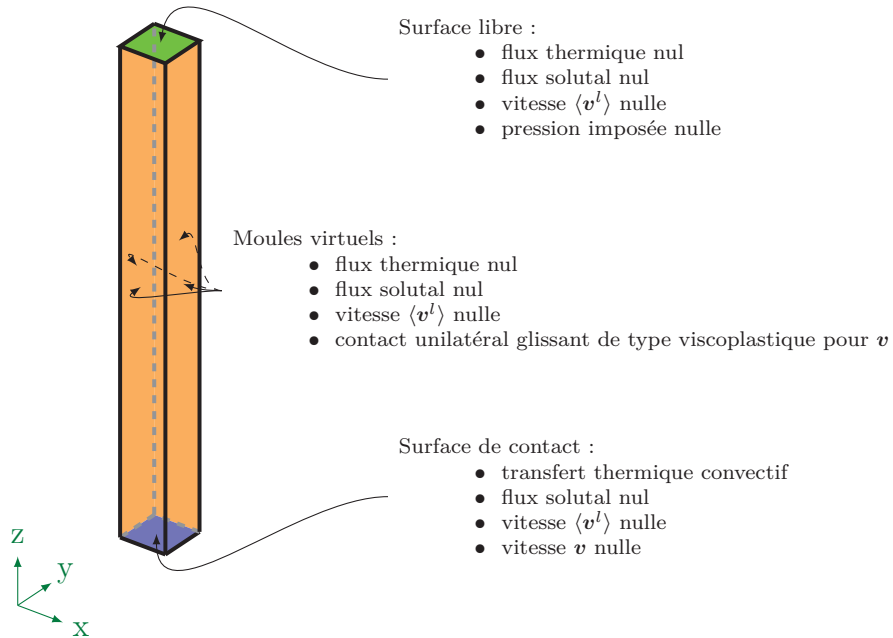
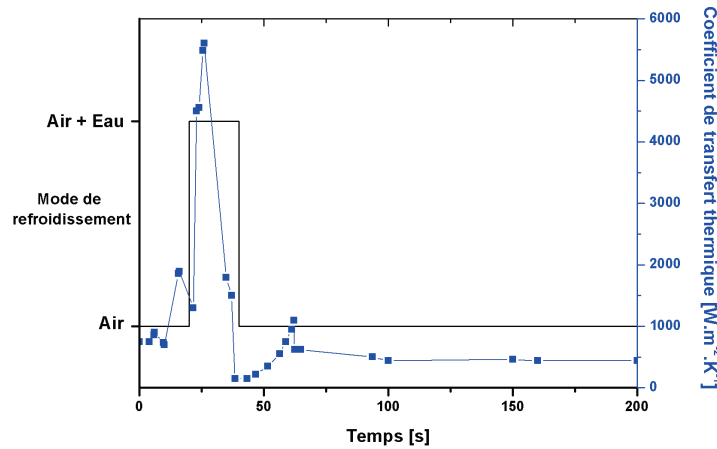


Fig. V.26: Conditions aux limites appliquées pour la simulation de l'expérience de El-Bealy





**Fig. V.27:** Evolution temporelle du coefficient de transfert thermique pour la simulation numérique de l'expérience de El-Bealy superposée au mode de refroidissement expérimental

d'énergie causée par le mode de refroidissement et l'épaisseur de la lame d'air est schématisé par Niane par un unique coefficient de transfert thermique. Ce coefficient de transfert thermique varie au cours du temps et son évolution, représentée à la figure V.27, a été déterminée par Niane afin que les courbes numériques de température soient au plus proche de celles mesurées par les thermocouples. Ce transfert thermique convectif est appliqué sur la paroi inférieure de la barre. Toutes les autres parois, c'est-à-dire celles en contact avec les moules virtuels et celle de la paroi supérieure, sont isolées thermiquement.

- *Conditions aux limites mécaniques pour calculer  $\mathbf{v}$*

Un contact unilatéral glissant de type viscoplastique entre les moules virtuels et le métal a été choisi. Au niveau de la paroi inférieure, là où est appliqué le refroidissement, la vitesse est imposée nulle :  $\mathbf{v} = 0 m.s^{-1}$ . Aucune lame d'air ne peut être créée. Au niveau de la paroi supérieure (surface libre), une pression nulle est imposée.

- *Conditions aux limites mécaniques pour calculer  $\langle \mathbf{v}^l \rangle$*

Sur chacune des parois de la barre, la condition  $\langle \mathbf{v}^l \rangle = 0 m.s^{-1}$  est imposée.

- *Conditions aux limites solutales*

Un flux solutal nul est appliqué sur chacune des parois.

## Matériaux

L'acier utilisé pour l'expérience est l'alliage binaire  $Fe - 0.53\%pd$  dont les propriétés thermophysiques et thermomécaniques sont données en annexe G. Les données thermomécaniques sont calculées à partir du modèle II de [Koz92] de la même manière que pour l'alliage b1 (Annexe E). Les valeurs des données thermophysiques ont été reprises de la simulation de Niane [Nia04]. La conductivité thermique et la chaleur spécifique ont été prises constantes égales à  $32 W.m^{-1}.^{\circ}C^{-1}$  et à  $700 J.kg^{-1}.^{\circ}C^{-1}$  respectivement. Le traite-

ment de la masse volumique est plus délicat. En effet Niane considère la masse volumique de la manière suivante :

- pour le solide :  $\rho^s = \rho_0^s(1 + \beta_T^s(T_{ref}^s - T))$
- pour le liquide :  $\rho^l = \rho_0^l(1 + \beta_T^l(T_{ref}^l - T) + \beta_w^l(w_{ref}^l - w^l))$
- dans l'intervalle de solidification :  $\langle \rho \rangle = g^s \rho^s + g^l \rho^l$

avec les valeurs suivantes :  $\rho_0^s = 7298 \text{ kg.m}^{-3}$ ,  $\rho_0^l = 7060 \text{ kg.m}^{-3}$ ,  $\beta_T^s = 5.33 \times 10^{-5} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$ ,  $\beta_T^l = 8.82 \times 10^{-5} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$ ,  $\beta_w^l = 1.983 \times 10^{-3} (\% \text{pds})^{-1}$ ,  $T_{ref}^s = 1349.48 \text{ }^\circ\text{C}$ ,  $T_{ref}^l = 1538 \text{ }^\circ\text{C}$ ,  $w_{ref}^l = 0.53 \% \text{pds}$

Or, comme évoqué à la section V.4.3.1 de ce chapitre, la masse volumique à entrer dans Thercast<sup>®</sup> (masse volumique servant au calcul de la mécanique du solide) ne peut pas prendre en compte une dépendance en concentration. Une concentration  $w^l$  arbitraire doit être choisie pour éliminer la dépendance en concentration dans la calcul de  $\rho^l$ . Cette concentration a été fixée à la concentration initiale de l'alliage. Grâce à Thermocalc<sup>®</sup>, le chemin de solidification en système fermé de l'alliage binaire  $Fe - 0.53 \% \text{pds}C$  en loi des leviers est déterminé et permet à Thercast<sup>®</sup> de calculer la masse volumique dans l'intervalle de solidification. La température critique de transition EVP-VP est égale à la température du liquidus  $T_C = T_{liq} = 1484 \text{ }^\circ\text{C}$ . Comme précisé à la section V.4.3.1 de ce chapitre, pour la simulation, le chemin de solidification ne sera évidemment pas connu à l'avance et sera calculé via le modèle de microségrégation. De plus, pour la mécanique du liquide,  $\rho^l$  aura la même forme que celle de Niane.

Le calcul de la macroségrégation nécessite la connaissance de données supplémentaires. Ces données sont récapitulées dans le tableau V.3. Certaines données ont été adaptées à notre modèle. Niane a pris le coefficient de partage à  $k = 0.27$  car son modèle devait forcément passé par un eutectique pour bien se dérouler. Ceci n'est pas obligatoire dans notre cas et à cette teneur en carbone, il n'y a physiquement pas d'eutectique. Pour ces raisons, nous avons pris un coefficient de partage de  $k = 0.287$ . Le coefficient de diffusion solutale de Niane varie avec la température de la manière suivante :  $D^l = D_0^l \exp(-Q/RT)$  avec  $Q$  l'énergie d'activation et  $R$  la constante des gaz parfaits. Dans notre cas, le coefficient de diffusion solutale est constant fixé à  $D^l = D_0^l = 6 \times 10^{-7} \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$ . Enfin, Niane ne considère pas de contribution due à la perméabilité. Pour ce qui nous concerne, nous avons repris l'expression de Carman-Kozeny avec l'espace interdendritique secondaire  $\lambda_2$  pris à  $40 \times 10^{-6} \text{ m}$ .

**Tab. V.3:** Données matériaux pour l'alliage binaire  $Fe - 0.53 \% \text{pds}$

Température de fusion	$T_f$	1538	$^\circ\text{C}$
Température de référence	$T_{ref}$	1538	$^\circ\text{C}$
Pente du liquidus	$m_{liq}$	-101.9	$^\circ\text{C}(\% \text{pds})^{-1}$
Coefficient de partition	$k$	0.287	-
Coefficient de diffusion solutale	$D^l$	$6 \times 10^{-7}$	$\text{m}^2.\text{s}^{-1}$
Espace interdendritique secondaire	$\lambda_2$	$40 \times 10^{-6}$	$\text{m}$
Viscosité dynamique du liquide	$\mu^l$	$5. \times 10^{-3}$	$\text{Pa.s}$

### Autres paramètres de simulation

Le pas de temps est constant tout au long de la simulation, égal à  $\Delta t = 0.01$  s. La température initiale du métal est de  $1490^\circ\text{C}$ , soit une surchauffe de  $6^\circ\text{C}$ . Dans le calcul 1D de Niane, il n'y a pas de gravité. La gravité est donc prise nulle dans notre simulation. Les critères de convergence des itérations de Newton-Raphson pour la mécanique du solide sont les suivants :

$$\begin{cases} \|R(\mathbf{v}, p)^{(n)}\| & = 10^{-9} N \\ \left\| \frac{R(\mathbf{v}, p)^{(n)} - R(\mathbf{v}, p)^{(n-1)}}{R(\mathbf{v}, p)^{(n-1)}} \right\| & = 10^{-6} \\ \text{IterNrMax} & = 100 \end{cases}$$

et pour les critères thermiques :

$$\begin{cases} \varepsilon_T & = 10^{-3} \text{ }^\circ\text{C} \\ \varepsilon_H & = 10^{-5} \\ \text{IterNrMax} & = 30 \end{cases}$$

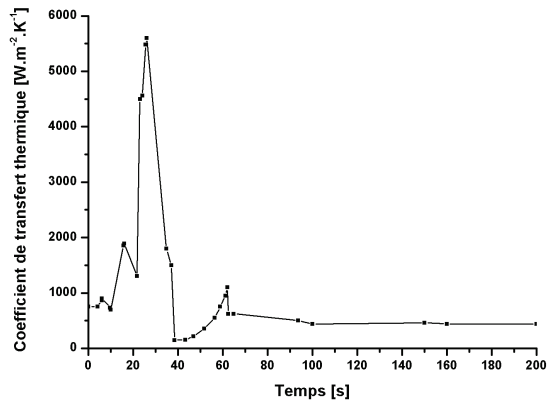
#### V.4.4.2 Résultats

La simulation a été lancée jusqu'à  $t = 200$  s. Elle a été réalisée sur un processeur et 4 jours ont été nécessaires pour atteindre le temps final. Le calcul s'est bien déroulé : en moyenne 2 itérations sont nécessaires pour converger en thermique et en mécanique.

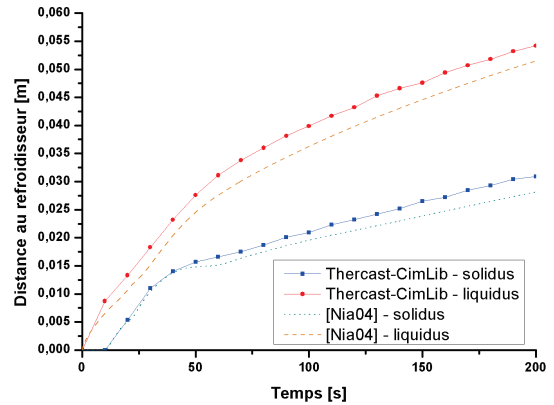
Aux figures V.28(b) et V.28(c), sont tracés l'évolution temporelle des frontières de la zone pâteuse ainsi que le profil de ségrégation relative  $\langle w_C \rangle / w_{init C}$  à  $t = 200$  s le long de la barre (axe  $z$ ). Ces évolutions sont établies pour un des plans de la barre représenté à la figure V.28(d). Le plan choisi ici est celui qui donne les résultats les plus significatifs. Le profil numérique est comparé à celui de Niane et aux mesures expérimentales de El-Bealy. Les ségrégations obtenues dans notre cas sont du même ordre de grandeur que les mesures expérimentales mais la simulation numérique parvient difficilement à capter toutes les variations expérimentales de concentration. On identifie le puits de macroségrégation négative dû à l'augmentation rapide du coefficient de transfert thermique vers  $t = 25$  s. Cette augmentation entraîne une accélération de la contraction du métal ce qui empêche le liquide, riche en soluté, de pénétrer dans la zone pâteuse. Par conséquent, il y a appauvrissement en espèces chimiques. A l'inverse, la brutale réduction du transfert thermique est à l'origine de la remontée de la concentration des espèces chimiques. La valeur du pic de macroségrégation positive est toutefois supérieure à celle mesurée expérimentalement. Les extrémas de ségrégation ne se situent pas exactement aux endroits expérimentaux. Cependant, la distance entre les deux extrémas est sensiblement la même que pour l'expérience ( $\approx 6$  mm).

Ce décalage suppose que le coefficient de transfert thermique ajusté par Niane pour son modèle pourrait être mieux adapté à notre modèle afin de translater les extrémas. Grâce aux thermocouples, les évolutions de la température à une distance de  $2\text{mm}$ ,  $4\text{mm}$ ,  $12\text{mm}$  et  $24\text{mm}$  du refroidisseur sont connues. Elles sont comparées à l'évolution numérique à ces mêmes points à la figure V.29. Les évolutions numériques de température aux thermocouples diffèrent de celles de Niane et des mesures expérimentales. Au thermocouple  $T1$  situé à  $2\text{mm}$  du refroidisseur, la température décroît plus rapidement dans l'expérience que dans les simulations. A l'inverse, pour les trois autres positions, la température

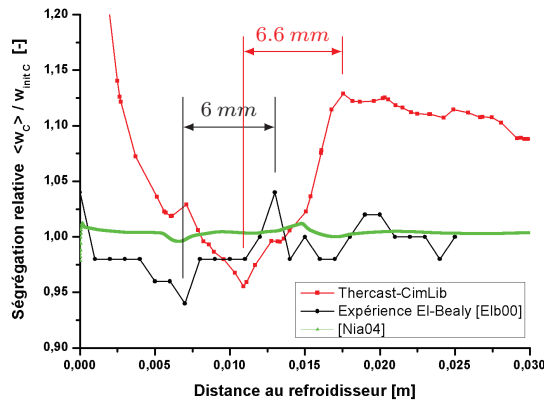
numérique décroît plus rapidement que dans l'expérience. Un nouveau calage thermique pourrait être envisagé afin de mieux faire correspondre les évolutions de la température aux thermocouples.



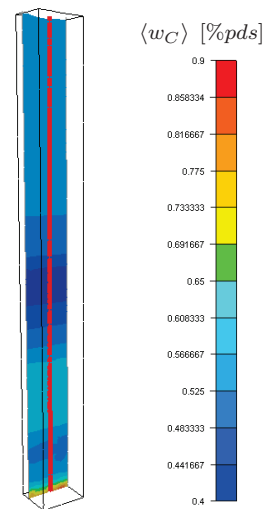
(a)



(b)

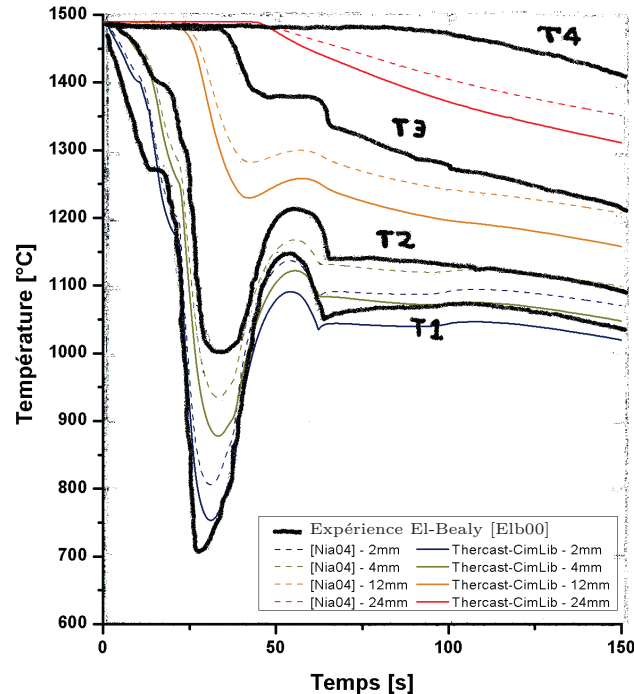


(c)



(d)

**Fig. V.28:** (a) Evolution temporelle du coefficient de transfert thermique, (b) Evolution temporelle de la position du solidus et du liquidus, (c) Comparaison des profils expérimentaux et numériques de ségrégation relative  $\langle w_C \rangle / w_{init\ C}$  le long de la barre à  $t = 200\ s$  suivant la ligne rouge tracée en (d), (d) Carte de concentration moyenne dans un des plans de la barre.



**Fig. V.29:** Evolutions temporelles expérimentales et numériques de la température à une distance de  $2\text{mm}$  (T1),  $4\text{mm}$  (T2),  $12\text{mm}$  (T3) et  $24\text{mm}$  (T4) du refroidisseur pour le cas de El-Bealy

Pour pouvoir discuter de l'influence d'une déformation sur la répartition de la ségrégation, une deuxième simulation a été effectuée. Cette simulation est similaire à la précédente exceptée que les moules virtuels ont été remplacés par des plans de symétrie. Les conditions aux limites sur les parois latérales sont donc changées. Les plans de symétrie impliquent de ne plus avoir de contraction latérale, éliminant la déformation dans cette direction. Les profils de ségrégation relative sont comparés à la figure V.30, profils tracés dans le même plan. Comme dans le cas des gouttes, l'influence de la déformation sur la macroségrégation existe mais dans une faible proportion. Bien que le coefficient de transfert thermique utilisé pour la simulation ne soit pas optimal, il semble que la déformation que l'on engendre suite au refroidissement ne soit pas suffisante pour modifier les variations de concentration. Une possibilité est de modifier les valeurs des paramètres de la loi de comportement ainsi que celle de la température critique de transition.

Une dernière remarque pour cette simulation concerne le maillage. La taille de maille moyenne du maillage utilisé dans les simulations est de  $\approx 2\text{mm}$  ce qui est du même ordre de grandeur que les distances sur lesquelles les variations sont observées. Un calcul sur un maillage plus fin pourra être effectué après le nouveau calage thermique. Enfin, la simulation que nous avons effectuée s'est inspirée de celle de Niane. Au lieu de rester dans cette configuration barre, il pourrait être intéressant de reproduire l'expérience El-Bealy en

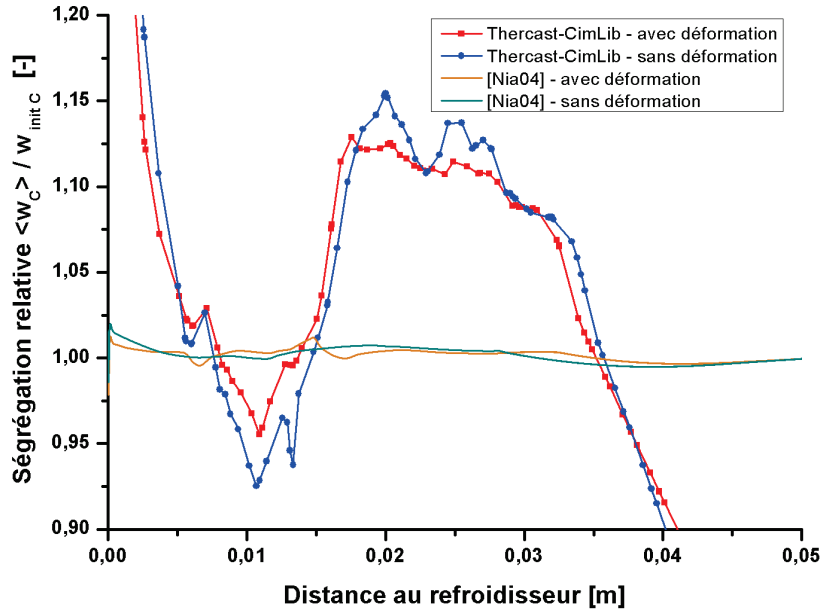


Fig. V.30: Comparaison des profils de ségrégation relative  $\langle w_C \rangle / w_{init C}$  avec et sans déformation suivant la ligne rouge tracée à la figure V.28(d).

prenant en compte tout le lingotin et en faisant varier le coefficient de transfert thermique suivant le même mode que le refroidissement expérimental. La lame d'air, obtenue par le calcul mécanique, suivant son épaisseur, jouerait le rôle de variateur d'extraction de l'énergie.

## V.5 Cas de solidification d'un alliage ternaire

Toutes les simulations présentées jusqu'à maintenant ont concerné la solidification d'alliages binaires. Une extension a été apportée afin de pouvoir simuler la solidification d'alliages ternaires. Ce calcul a été réalisé sur un cas simple, c'est-à-dire sans déformation du solide. La présentation du cas ainsi que les résultats sont exposés dans cette section.

### V.5.1 Rappel des équations à résoudre

Le cas simple de solidification d'un alliage ternaire correspond à une solidification à solide fixe et rigide. Les équations à résoudre sont les mêmes que celles présentées à la section V.2 de ce chapitre. Cependant, comme le matériau considéré présente deux éléments d'alliages, il est nécessaire de résoudre deux fois l'équation de conservation des espèces chimiques, une pour chaque élément. De plus, la masse volumique intervenant dans le terme de gravité pour la résolution de la quantité de mouvement et de la masse pour le liquide a la forme suivante :

$$\rho^l = \rho_0 (1 - \beta_T(T - T_{ref}) - \beta_{w_1}(w_1^l - w_{ref_1}) - \beta_{w_2}(w_2^l - w_{ref_2}))$$

Enfin, la résolution du modèle de macroségrégation ne se fait pas de la même façon que pour les alliages binaires. Pour les alliages ternaires, des chemins de solidification sont préalablement tabulés grâce à Thermocalc<sup>®</sup> en supposant la loi des leviers. Au cours de la simulation, une interpolation entre ces chemins est effectuée. L'annexe C détaille la résolution du modèle de macroségrégation pour les alliages binaires et ternaires.

### V.5.2 Mise en donnée numérique

La solidification numérique d'un alliage ternaire a été simulée sur un cas simple 2D. Le domaine de calcul est un carré de 0.1 m de côté. Il est maillé avec des triangles isotropes, raffiné au niveau des parois latérales gauche et droite. La géométrie ainsi que le maillage sont représentés à la figure V.31. Les conditions aux limites appliquées sont les suivantes :

- vitesse liquide  $\langle \mathbf{v}^l \rangle$  nulle sur toutes les parois ;
- flux de soluté nul sur toutes les parois ;
- flux thermique nul sur toutes les parois sauf sur la paroi gauche où un flux constant de  $-50000 \text{ W.m}^2$  est appliqué.

L'alliage ternaire choisi pour ce cas est un acier Fe-0.6%pdsMn-0.38%pdsC. Ces propriétés physiques utilisées pour la simulation sont récapitulées au tableau V.4. Sa température initiale est de 1510°C.

Le pas de temps est constant et égal à  $\Delta t = 0.1 \text{ s}$ . Les critères de convergence des itérations de Newton-Raphson pour la résolution de l'énergie sont :

$$\begin{cases} \varepsilon_T & = 10^{-3} \text{ }^\circ\text{C} \\ \varepsilon_H & = 10^{-5} \\ \text{IterNrMax} & = 30 \end{cases}$$

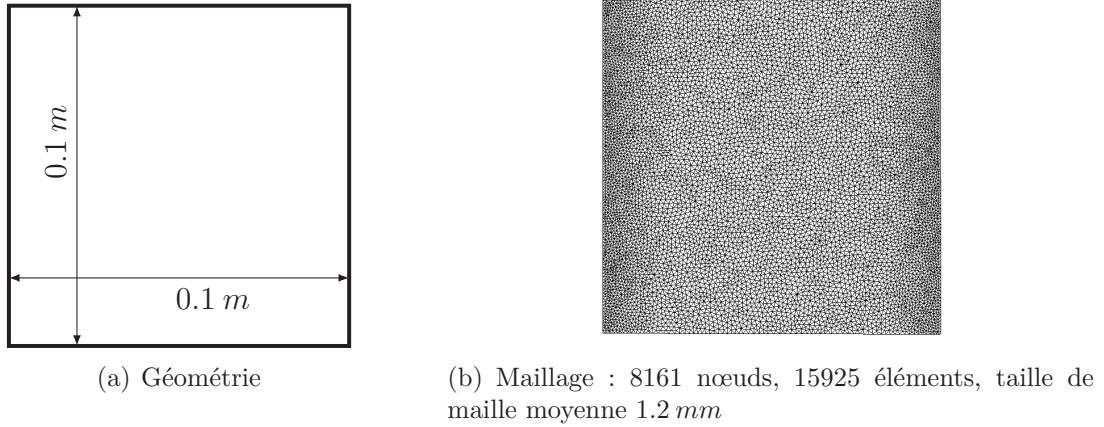
### V.5.3 Résultats

Les résultats de la simulation sont donnés à la figure V.32. Il s'agit des cartes de ségrégation pour le carbone et le manganèse. Le haut de la cavité s'enrichit en éléments d'alliage alors que le bas s'en appauvrit. Comme dans le cas de Hebditch et Hunt, la convection d'origine solutale l'emporte sur la convection d'origine thermique entraînant le liquide dans le sens horaire. Comme les isothermes se propagent de gauche à droite de la cavité, on observe la macroségrégation positive en haut de la cavité et une macroségrégation négative en bas.

La similarité des répartitions provient du fait que les espèces chimiques sont advectées par la même vitesse liquide  $\langle \mathbf{v}^l \rangle$  et qu'elles ont les mêmes coefficients de diffusion. Cependant, les intensités de ségrégation sont différentes. Pour le carbone, la ségrégation varie entre 0.343%pds et 0.486%pds pour une concentration initiale de 0.38%pds, soit une variation totale d'environ 37.6%. La concentration en manganèse varie entre 0.581%pds et 0.654%pds pour une concentration initiale de 0.6%pds, soit une variation totale d'environ 12.2%.

L'intérêt de cette résolution réside dans la possibilité de prédire les phases apparaissant au cours de la solidification suivant la répartition locale des espèces chimiques. Deux

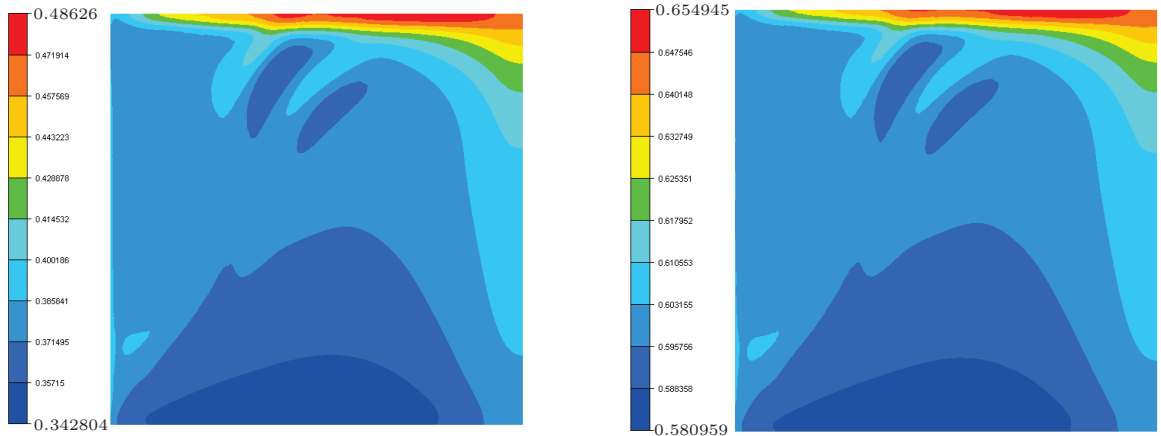




**Fig. V.31:** Géométrie et maillage pour le cas de solidification d'un alliage ternaire

**Tab. V.4:** Données matériaux utilisées pour le Fe-0.6%*pds*Mn-0.38%*pds*C

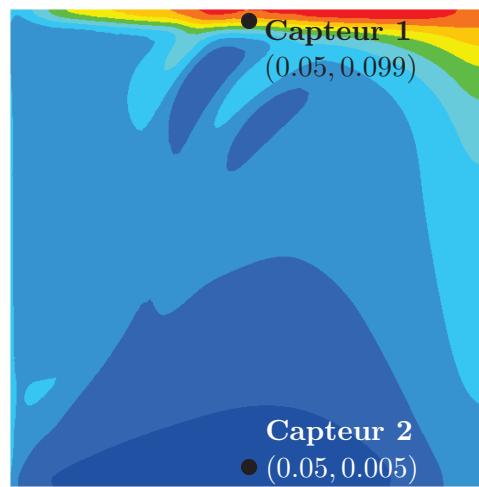
Masse volumique	$\rho_0$	7578	$kg.m^{-3}$
Chaleur massique	$c_p$	636	$J.kg^{-1}.^{\circ}C^{-1}$
Conductivité thermique	$\kappa$	35	$W.m^{-1}.^{\circ}C^{-1}$
Chaleur latente	$L$	309000	$J.kg^{-1}$
Coefficient de dilatation thermique	$\beta_T$	$6.76 \times 10^{-5}$	$^{\circ}C^{-1}$
Coefficient de dilatation solutale du carbone	$\beta_{w_C}$	0.0175	$(\%pds)^{-1}$
Coefficient de dilatation solutale du manganèse	$\beta_{w_{Mn}}$	0.0005	$(\%pds)^{-1}$
Température de référence	$T_{ref}$	1522	$^{\circ}C$
Concentration de référence en carbone	$w_{ref_C}$	0.38	$\%pds$
Concentration de référence en manganèse	$w_{ref_{Mn}}$	0.6	$\%pds$
Viscosité dynamique du liquide	$\mu^l$	$4.2 \times 10^{-3}$	$Pa.s$
Coefficient de diffusion solutale	$D^l$	$10^{-9}$	$m^2.s^{-1}$
Espace interdendritique secondaire	$\lambda^2$	$10^{-4}$	$m$



**Fig. V.32:** Cartes de ségrégation en carbone et manganèse pour le cas de solidification d'un alliage ternaire à  $t = 5810$  s



capteurs ont été positionnés comme montré à la figure V.33 : un où il y a macroségrégation positive et un autre où il y a macroségrégation négative. L'évolution des phases à ces capteurs est représentée à la figure V.34 ainsi que l'évolution des phases dans le cas où il n'y a pas de macroségrégation et où les concentrations restent constantes à leur valeur nominale. Ce cas sera dénommé cas-témoin dans la suite de cette section. L'évolution des phases est en accord avec le diagramme de phase de l'alliage d'acier Fe-0.6%pdsMn-0.38%pdsC. Les chemins de solidification suivis par les capteurs 1 et 2 sont situés sur le diagramme à la figure V.35. Par commodité, le diagramme binaire Fe-C est représenté mais ceci reste valable pour le diagramme ternaire Fe-C-Mn. Dans la région où la macroségrégation est positive (capteur 1), la solidification est retardée par rapport au cas-témoin. Moins de phase ferritique est formée puis transformée en austénite. Le cas contraire se produit dans la zone où il y a macroségrégation négative. La solidification est avancée par rapport au cas-témoin. Plus de ferrite apparaît puis est transformée en austénite.



**Fig. V.33:** Position des capteurs

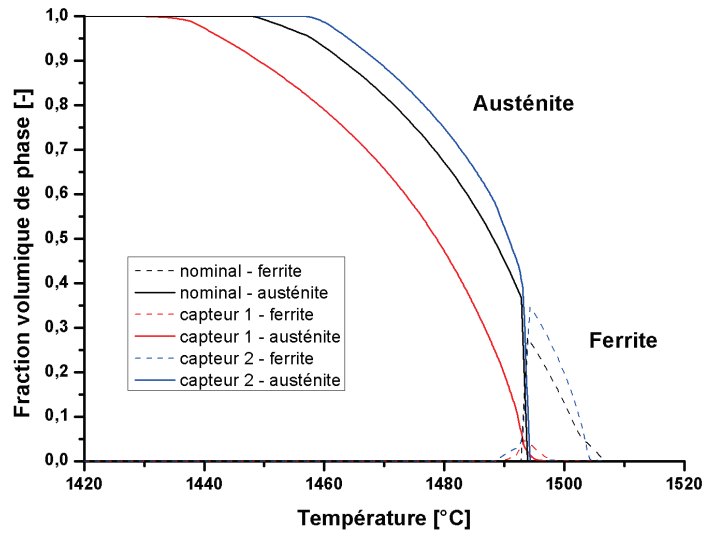


Fig. V.34: Evolution des phases aux capteurs dont la position est donnée à la figure V.33

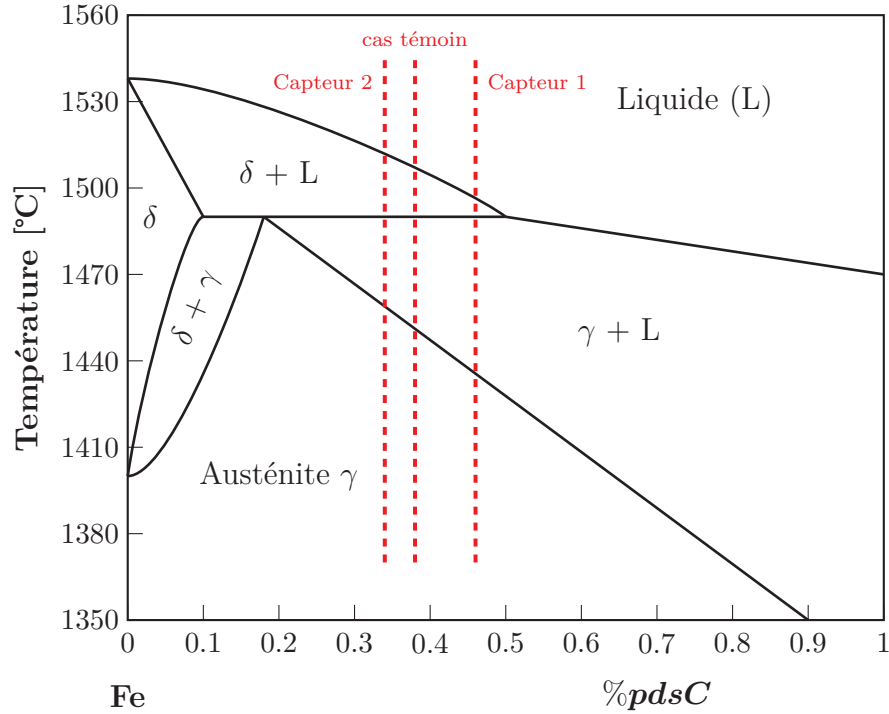


Fig. V.35: Représentation schématique de la partie supérieure gauche du diagramme de phase du Fe-C. La ferrite est symbolisée par la lettre grec  $\delta$ .



# Conclusion générale et perspectives

La macroségrégation est un des défauts majeurs affectant les produits sidérurgiques coulés en continu. C'est une répartition non uniforme des espèces chimiques au sein des produits coulés. Elles sont présentes soit à la surface (macroségrégation en peau) soit au cœur (macroségrégation centrale) des produits. Cette hétérogénéité chimique entraîne des disparités dans les propriétés mécaniques qui peuvent aboutir à des ruptures catastrophiques en service. La macroségrégation est un phénomène complexe qui apparaît au cours de la solidification d'alliages métalliques. Elle résulte de l'interaction de phénomènes à la fois microscopiques et macroscopiques. Une différence de répartition des espèces chimiques se crée à l'échelle microscopique (typiquement  $10^{-6} m - 10^{-4} m$ ), différence qui est ensuite distribuée à l'échelle macroscopique (typiquement  $10^{-4} m - 1 m$ ) notamment par les mouvements de convection ou par déformation du solide en formation. La macroségrégation ne peut être que faiblement réduite par des traitements mécaniques ou thermiques ultérieurs. C'est pourquoi l'étude de la macroségrégation dans le but de la limiter dès la solidification représente un gain substantiel pour la qualité des produits. C'est dans cette thématique de recherche que se place le projet de l'Agence Spatiale Européenne "CCEMLCC" (*Chill Cooling for the Electro-Magnetic Levitator in relation with Continuous Casting of steel*), dans lequel ces travaux de thèse s'inscrivent. Il avait pour but d'étudier la macroségrégation en peau induites par déformations thermomécaniques. L'intérêt industriel sous-jacent est l'étude de la macroségrégation présente en peau apparaissant à la suite de déformations causées par le refroidissement en lingotière. Pour cette raison, le groupe sidérurgique ArcelorMittal participait à ce projet.

Le projet CCEMLCC comportait deux volets. Le premier volet était expérimental. Il s'agissait de mettre en place une expérience avec un refroidissement et une déformation qualitativement représentatifs de ceux ayant lieu en lingotière afin de caractériser les

macroségrégations. Ce dispositif expérimental a été élaboré par les équipes du centre aérospatial allemand basé à Cologne. Il permet à une goutte de métal liquide de se refroidir au contact d'un substrat froid. Les expériences ont été effectuées en gravité réduite (soit au cours de vols paraboliques soit au cours du vol d'une fusée-sonde) afin de limiter les autres sources potentielles de macroségrégation, notamment les mouvements de convection. Le second volet correspond à la simulation numérique de ces macroségrégations. Ceci est l'objet des travaux qui ont été présentés dans ce manuscrit.

La simulation numérique des macroségrégations en peau induites par déformations thermomécaniques n'est pas immédiate. Plusieurs étapes sont nécessaires. La première concerne la modélisation mathématique du phénomène, c'est-à-dire le passage du phénomène physique aux équations mathématiques qui le régissent. Ces équations correspondent à la conservation de l'énergie, de la quantité de mouvement, de la masse et de la masse des espèces chimiques, auxquelles est adjoint un modèle de microségrégation. Pour obtenir ce modèle de macroségrégation, des hypothèses de modélisation ont dû être faites. Une fois le modèle posé commence la deuxième étape, celle de la résolution numérique du modèle. Cette résolution est réalisée grâce à la méthode des éléments finis. Les équations du modèle sont couplées. Avant de résoudre ce couplage, des tests simples ont permis de vérifier la résolution individuelle de chaque équation afin de s'assurer de la bonne implémentation des méthodes numériques. Ces tests ayant donné des résultats satisfaisants par rapport aux solutions de référence, des tests plus complexes mettant en jeu le couplage des équations ont été mis en place. Le couplage des équations a été progressif. Tout d'abord a été simulée la macroségrégation à solide fixe et rigide, c'est-à-dire sans déformation du solide, puis seule la déformation du solide au cours du refroidissement a été résolue. Enfin, la simulation des macroségrégations en peau à solide déformable a été obtenue en fusionnant les deux étapes précédentes. Ce découpage a été choisi car chaque étape se base sur une expérience qui permet de comparer les résultats numériques et expérimentaux.

Le premier cas est la simulation des macroségrégations à solide fixe et rigide. Elle se base sur l'expérience de Hebditch & Hunt réalisée en 1974. L'expérience consiste à refroidir par une de ses parois un lingotin rempli de Pb-48%<sub>pds</sub>Sn. Les résultats numériques de ségrégation sont comparés aux mesures expérimentales. Les résultats numériques suivent les mêmes tendances que ceux de l'expérience. Pour aller plus loin dans la simulation des macroségrégations à solide fixe, une étude de sensibilité des résultats à la taille de maille pourra être effectuée. De plus, les simulations étant relativement longues, la mise en place du remaillage adaptatif permettrait de réduire les temps de calcul. Enfin une expérience récente, copie de celle de Hebditch et Hunt, a été réalisée par les équipes du laboratoire SIMaP [Wan06] [Wan07] [Wan09]. Des calculs ont déjà été effectués par d'autres codes de calcul (R2sol, Solid,...) dans le cadre du projet SMACS (*Simulation of Macrosegregation and Structures*) afin de comparer préalablement les résultats numériques sur un cas de référence [Bel09b] [Bel10] mais également de confronter les résultats des codes de calcul avec les résultats expérimentaux. Une étude similaire pourrait être réalisée avec CimLib<sup>®</sup>.

Le deuxième cas est celui de la simulation de la déformation de la goutte lors de sa solidification par contact avec un refroidisseur. Les expériences du projet CCEMLCC qui se sont déroulées lors d'un vol d'une fusée sonde ou lors d'un vol parabolique, c'est-à-

dire en microgravité, ont servi de base à la simulation. Ces expériences ont permis de montrer qu'une fois le contact avec le refroidisseur établi, la goutte s'allonge dans la direction normale au refroidisseur. La simulation numérique avait pour but de reproduire cet allongement lors de l'expérience TEXUS. Pour cela, les propriétés thermophysiques et thermomécaniques ont été ajustées ainsi que les conditions aux limites thermiques. Il a été tenu compte pour ce calcul d'une surfusion. La déformation numérique obtenue se rapproche de la déformation expérimentale mais avec une intensité plus faible. La simulation est perfectible. L'orientation et l'intensité de la gravité ne sont pas connues. Elle a été arbitrairement fixée à  $10^{-7}m.s^{-2}$  et orientée de la goutte vers le refroidisseur. Elle pourrait être plus élevée et orientée en sens opposé, ce qui favoriserait l'allongement. De plus, la tension de surface n'a pas été prise en compte. Enfin, les lois de comportement pourraient être changées ou leurs paramètres modifiés pour avoir un meilleur comportement mécanique.

Le dernier cas correspond à la simulation des macroségrégations en peau à solide déformable. Des simulations reprenant la modélisation de l'étape précédente (expérience TEXUS) ont été effectuées mais, pour ce calcul, il n'était pas possible de prendre en compte une surfusion. Afin d'étudier l'influence de la déformation, deux simulations ont été réalisées en prenant en compte ou non la déformation. Des différences dans la répartition des espèces chimiques sont constatées. La déformation a eu tendance à accentuer la macroségrégation. Le point faible de cette expérience est qu'on ne dispose pas de mesures expérimentales de concentration afin de pouvoir les comparer aux résultats numériques. Pour cela, l'expérience de El-Bealy pour laquelle des mesures ont été effectuées a été simulée. La macroségrégation obtenue numériquement est influencée par la déformation mais faiblement. En comparant avec les mesures expérimentales, on constate que la simulation a du mal à capturer proprement toutes les variations de concentration. Pour cette simulation, plusieurs pistes d'améliorations sont envisageables. Tout d'abord, le calage thermique pourrait être amélioré afin de mieux faire correspondre les évolutions numérique et expérimentale de la température à l'endroit des thermocouples. De plus, la taille de maille du maillage utilisé est assez grossière par rapport aux distances sur lesquelles se produisent les variations de concentration. Un calcul avec un maillage plus fin pourrait être réalisé. Enfin, le dernier point concerne la modélisation. Le calcul effectué ne s'intéressait qu'à une tranche du lingotin en simplifiant les conditions aux limites. Un calcul sur l'ensemble du lingot avec des conditions aux limites plus représentatives du refroidissement expérimental pourrait être envisagé.

Toutes les simulations précédentes ont été effectuées pour des alliages binaires. Une extension afin de pouvoir simuler la solidification d'un alliage ternaire a été réalisée. Un calcul de macroségrégation sur une configuration simple (sans déformation du solide) a été fait. Outre le calcul de la répartition des espèces chimiques, cette simulation permet de suivre l'apparition ou la disparition de certaines phases (ferrite, austénite) au cours du refroidissement en chaque point du domaine.

Ces travaux de thèse ont permis de mettre en place des outils donnant la possibilité de simuler les macroségrégations avec ou sans déformation du solide pour des alliages binaires ou ternaires. Ces outils ont été mis en œuvre afin de reproduire numériquement des expériences et des améliorations sont à apporter afin de retrouver complètement les

profils expérimentaux. La mise en place de la combinaison de la macroségrégation avec une déformation du solide a consisté à coupler la résolution CimLib<sup>®</sup> de la conservation de l'énergie, de la masse des espèces chimiques, de la masse et de la quantité de mouvement du liquide avec la résolution mécanique de Thercast<sup>®</sup>. Cette approche a ses limites. Tout d'abord le recours à deux plateformes de résolution engendre des disparités dans la mise en données, notamment pour celle de la masse volumique. De plus, dans notre approche, le calcul de la mécanique est divisé en deux étapes : la première étape consiste à calculer la vitesse liquide  $\mathbf{v}^l$  sur tout le domaine et en imposant  $\mathbf{v}^l$  nulle sur les parois. De ce premier calcul, on ne retient que  $\mathbf{v}^l$  dans les zones liquide et pâteuse. La seconde étape revient à calculer une vitesse  $\mathbf{v}$  avec Thercast<sup>®</sup> sur tout le domaine avec déformation possible de ce dernier. On ne retient de ce calcul que  $\mathbf{v}$  dans les zones solide et pâteuse. On l'assimile alors à  $\mathbf{v}^s$ . Le champ de vitesse moyenne peut être alors reconstruit tel que : dans le liquide  $\langle \mathbf{v} \rangle = \mathbf{v}^l$ , dans le solide  $\langle \mathbf{v} \rangle = \mathbf{v}^s$  et dans le pâteux  $\langle \mathbf{v} \rangle = g^l \mathbf{v}^l + g^s \mathbf{v}^s$ . Cette reconstruction pose un problème en ce qui concerne l'influence du retrait à la solidification. En effet, dans notre modèle, c'est la vitesse  $\mathbf{v}$  calculée par Thercast<sup>®</sup> qui contient à elle-seule toute l'information du retrait à la solidification. On note que l'utilisation de la vitesse solide  $\mathbf{v}^s$  dans la résolution de la mécanique des fluides n'intervient que dans le terme de Darcy et non dans l'équation de conservation de la masse. En prenant en compte le retrait de la solidification dans l'équation conservation de la masse, l'écoulement du liquide serait mieux décrit. Cette approche plus complète fait l'objet des travaux de thèse d'Okba Boughanmi par la mise en place de la méthode Level Set [Cou06] pour décrire la surface libre. Cette thèse a aussi pour objectif de mettre en place dans CimLib<sup>®</sup> un solveur mécanique du solide afin de n'utiliser que CimLib<sup>®</sup> dans le calcul de macroségrégation à solide déformable. Ceci permettra d'uniformiser la mise en données.

Bien que partielle, l'approche que nous avons développée est en cours d'intégration dans la version commerciale de Thercast<sup>®</sup>. Une première simulation dans le contexte industriel de la coulée continue sera alors possible. Le modèle de macroségrégation que nous avons utilisé dès le départ faisait abstraction du calcul de la structure de grains. Cette limitation est en passe d'être levée grâce à la mise en place du couplage CAFE (*C*ellular *A*utomaton-*F*inite *E*lement) dans le cadre de la thèse MINES ParisTech de Tommy Carozzani au cours de sa thèse. Ceci permet de suivre la germination et la croissance des grains au cours de la solidification. Les zones surfondues pourront ainsi être suivies, modifiant les écoulements et les ségrégations associées. C'est le couplage thermomécanique, macroségrégation et structures des grains qu'il faudra réussir à mettre au point pour progresser davantage dans la compréhension de la mise en place des ségrégations chimiques. Des projets sont en gestation pour y arriver, également en tenant compte du transport des grains équiaxes par convection et sédimentation.







# Annexes



## Annexe A

# Equivalence des équations de conservation des espèces chimiques

Montrons que l'expression de l'équation de conservation des éléments chimiques écrites sous la forme :

$$\frac{\partial \langle \rho w \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \langle \rho w \mathbf{v} \rangle = 0 \quad (\text{A.0.1})$$

est équivalente à l'expression suivante [Les03] :

$$\frac{d \langle w \rangle_m}{dt} = \frac{w^l - \langle w \rangle_m}{m} \left[ \rho^l \left( V^s \frac{1}{\rho^s} \frac{d\rho^s}{dt} + V^l \frac{1}{\rho^l} \frac{\partial \rho^l}{\partial t} \right) + \frac{\rho^s - \rho^l}{\rho^s} \frac{dm^s}{dt} + \rho^l \frac{dV}{dt} \right] - \frac{1}{m} \rho^l V^l \mathbf{v}^{l-s} \cdot \nabla w^l \quad (\text{A.0.2})$$

où  $V^s = g^s V$  et  $V^l = g^l V$  avec  $V$  le volume du VER,  $m = \langle \rho \rangle V$  est la masse totale du VER.

Rappelons tout d'abord quelques expressions utiles pour la démonstration :

1. Définition de la composition moyenne

$$\langle w \rangle_m = f^s w^s + f^l w^l \quad (\text{A.0.3})$$

Dans la suite de cette annexe, la composition moyenne  $\langle w \rangle_m$  sera notée  $\langle w \rangle$ .

2. Définition de la fraction massique d'une phase  $\alpha$

$$f^\alpha = \frac{\rho^\alpha g^\alpha}{\langle \rho \rangle} \quad (\text{A.0.4})$$

3. Hypothèse de milieu saturé (absence de porosité) :

$$f^s + f^l = 1 \quad \text{et} \quad g^s + g^l = 1 \quad (\text{A.0.5})$$

4. Expression de  $\langle \rho w \rangle$  :

$$\langle \rho w \rangle = \langle \rho \rangle \langle w \rangle \quad (\text{A.0.6})$$

où  $\langle \rho \rangle = g^l \rho^l + g^s \rho^s$ .

5. Expression de  $\langle \rho w \mathbf{v} \rangle$  :

$$\begin{aligned} \mathbf{v}^s \langle w \rangle &= \mathbf{v}^s \frac{g^s \rho^s w^s}{\langle \rho \rangle} + \mathbf{v}^s \frac{g^l \rho^l w^l}{\langle \rho \rangle} \\ &= \mathbf{v}^s \frac{g^s \rho^s w^s}{\langle \rho \rangle} + \mathbf{v}^s \frac{g^l \rho^l w^l}{\langle \rho \rangle} + \mathbf{v}^l \frac{g^l \rho^l w^l}{\langle \rho \rangle} - \mathbf{v}^l \frac{g^l \rho^l w^l}{\langle \rho \rangle} \\ &= \frac{\langle \rho \mathbf{v} w \rangle}{\langle \rho \rangle} + \frac{g^l \rho^l w^l (\mathbf{v}^s - \mathbf{v}^l)}{\langle \rho \rangle} \end{aligned} \quad \begin{array}{l} \pm \mathbf{v}^l \frac{g^l \rho^l w^l}{\langle \rho \rangle} \\ \text{factorisation} \end{array}$$

D'où

$$\langle \rho w \mathbf{v} \rangle = \langle \rho \rangle \mathbf{v}^s \langle w \rangle - \rho^l g^l w^l (\mathbf{v}^s - \mathbf{v}^l) \quad (\text{A.0.7})$$

6. Divergence du produit d'un scalaire  $a$  par un vecteur  $\mathbf{b}$  :

$$\nabla \cdot (a\mathbf{b}) = a \nabla \cdot \mathbf{b} + \mathbf{b} \cdot \nabla a \quad (\text{A.0.8})$$

7. Conservation de la masse :

$$\frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \langle \rho \mathbf{v} \rangle = 0 \quad (\text{A.0.9})$$

avec  $\langle \rho \mathbf{v} \rangle = g^s \rho^s \mathbf{v}^s + g^l \rho^l \mathbf{v}^l$

En multipliant l'équation A.0.9 par  $w^l$  et en utilisant la définition de  $\langle \rho \mathbf{v} \rangle$ , on déduit facilement l'égalité suivante :

$$w^l \nabla \cdot (g^l \rho^l (\mathbf{v}^s - \mathbf{v}^l)) = w^l \frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial t} + w^l \nabla \cdot (\langle \rho \rangle \mathbf{v}^s) \quad (\text{A.0.10})$$

D'après A.0.6 et A.0.7, l'équation A.0.1

$$\frac{\partial \langle \rho w \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \langle \rho w \mathbf{v} \rangle = \frac{\partial \langle \rho \rangle \langle w \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle \rho \rangle \mathbf{v}^s \langle w \rangle - g^l \rho^l w^l (\mathbf{v}^s - \mathbf{v}^l)) = 0$$

D'après A.0.8,

$$\nabla \cdot (\langle \rho \rangle \mathbf{v}^s \langle w \rangle - g^l \rho^l w^l (\mathbf{v}^s - \mathbf{v}^l)) = \langle \rho \rangle \mathbf{v}^s \cdot \nabla \langle w \rangle + \langle w \rangle \nabla \cdot (\langle \rho \rangle \mathbf{v}^s) - g^l \rho^l (\mathbf{v}^s - \mathbf{v}^l) \cdot \nabla w^l - w^l \nabla \cdot (g^l \rho^l (\mathbf{v}^s - \mathbf{v}^l))$$

et en utilisant l'expression de  $\frac{\partial \langle \rho \rangle \langle w \rangle}{\partial t} = \langle \rho \rangle \frac{\partial \langle w \rangle}{\partial t} + \langle w \rangle \frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial t}$ , on obtient alors :

$$\langle \rho \rangle \frac{\partial \langle w \rangle}{\partial t} + \langle \rho \rangle \mathbf{v}^s \cdot \nabla \langle w \rangle = - \langle w \rangle \frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial t} - \langle w \rangle \nabla \cdot (\langle \rho \rangle \mathbf{v}^s) + g^l \rho^l (\mathbf{v}^s - \mathbf{v}^l) \cdot \nabla w^l + w^l \nabla \cdot (g^l \rho^l (\mathbf{v}^s - \mathbf{v}^l))$$

D'après A.0.10,

$$\langle \rho \rangle \frac{\partial \langle w \rangle}{\partial t} + \langle \rho \rangle \mathbf{v}^s \cdot \nabla \langle w \rangle = - \langle w \rangle \frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial t} - \langle w \rangle \nabla \cdot (\langle \rho \rangle \mathbf{v}^s) + g^l \rho^l (\mathbf{v}^s - \mathbf{v}^l) \cdot \nabla w^l + w^l \frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial t} + w^l \nabla \cdot (\langle \rho \rangle \mathbf{v}^s)$$

En divisant par  $\langle \rho \rangle$  puis en regroupant certains termes :

$$\frac{\partial \langle w \rangle}{\partial t} + \mathbf{v}^s \cdot \nabla \langle w \rangle = \frac{w^l - \langle w \rangle}{\langle \rho \rangle} \left[ \frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle \rho \rangle \mathbf{v}^s) \right] - \frac{g^l \rho^l (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) \cdot \nabla w^l}{\langle \rho \rangle}$$

On a par définition de  $\langle \rho \rangle$  et en utilisant A.0.5 :  $\langle \rho \rangle = g^s \rho^s + g^l \rho^l = g^s (\rho^s - \rho^l) + \rho^l$  et donc  $\frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial t} = g^s \frac{\partial \rho^s}{\partial t} + g^l \frac{\partial \rho^l}{\partial t} + (\rho^s - \rho^l) \frac{\partial g^s}{\partial t}$ .

D'où

$$\frac{\partial \langle w \rangle}{\partial t} + \mathbf{v}^s \cdot \nabla \langle w \rangle = \frac{w^l - \langle w \rangle}{\langle \rho \rangle} \left[ g^s \frac{\partial \rho^s}{\partial t} + g^l \frac{\partial \rho^l}{\partial t} + (\rho^s - \rho^l) \frac{\partial g^s}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle \rho \rangle \mathbf{v}^s) \right] - \frac{g^l \rho^l (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) \cdot \nabla w^l}{\langle \rho \rangle}$$

De plus comme  $\langle \rho \rangle = g^s \rho^s + g^l \rho^l = g^s (\rho^s - \rho^l) + \rho^l$ , on a :

$$\nabla \cdot (\langle \rho \rangle \mathbf{v}^s) = \nabla \cdot ((g^s (\rho^s - \rho^l) + \rho^l) \mathbf{v}^s) = \nabla \cdot (g^s (\rho^s - \rho^l) \mathbf{v}^s) + \nabla \cdot (\rho^l \mathbf{v}^s)$$

On en déduit :

$$\frac{\partial \langle w \rangle}{\partial t} + \mathbf{v}^s \cdot \nabla \langle w \rangle = \frac{w^l - \langle w \rangle}{\langle \rho \rangle} \left[ g^s \frac{\partial \rho^s}{\partial t} + g^l \frac{\partial \rho^l}{\partial t} + (\rho^s - \rho^l) \frac{\partial g^s}{\partial t} + \nabla \cdot (g^s (\rho^s - \rho^l) \mathbf{v}^s) + \nabla \cdot (\rho^l \mathbf{v}^s) \right] - \frac{g^l \rho^l (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) \cdot \nabla w^l}{\langle \rho \rangle} \quad (\text{A.0.11})$$

Or, d'après A.0.8,  $\nabla \cdot (\rho^l \mathbf{v}^s) = \rho^l \nabla \cdot \mathbf{v}^s + \mathbf{v}^s \cdot \nabla \rho^l$  et  $\nabla \cdot (g^s (\rho^s - \rho^l) \mathbf{v}^s) = (\rho^s - \rho^l) \nabla \cdot (g^s \mathbf{v}^s) + g^s \mathbf{v}^s \cdot \nabla (\rho^s - \rho^l)$   
D'où

$$\frac{\partial \langle w \rangle}{\partial t} + \mathbf{v}^s \cdot \nabla \langle w \rangle = \frac{w^l - \langle w \rangle}{\langle \rho \rangle} \left[ g^s \frac{\partial \rho^s}{\partial t} + g^l \frac{\partial \rho^l}{\partial t} + (\rho^s - \rho^l) \frac{\partial g^s}{\partial t} + (\rho^s - \rho^l) \nabla \cdot (g^s \mathbf{v}^s) \right] + g^s \mathbf{v}^s \cdot \nabla (\rho^s - \rho^l) + \rho^l \nabla \cdot \mathbf{v}^s + \mathbf{v}^s \cdot \nabla \rho^l - \frac{g^l \rho^l (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) \cdot \nabla w^l}{\langle \rho \rangle} \quad (\text{A.0.12})$$

De même  $\nabla \cdot (g^s \mathbf{v}^s) = g^s \nabla \cdot \mathbf{v}^s + \mathbf{v}^s \cdot \nabla g^s$  conduit à :

$$\frac{\partial \langle w \rangle}{\partial t} + \mathbf{v}^s \cdot \nabla \langle w \rangle = \frac{w^l - \langle w \rangle}{\langle \rho \rangle} \left[ g^s \frac{\partial \rho^s}{\partial t} + g^l \frac{\partial \rho^l}{\partial t} + (\rho^s - \rho^l) \frac{\partial g^s}{\partial t} + (\rho^s - \rho^l) g^s \nabla \cdot \mathbf{v}^s + (\rho^s - \rho^l) \mathbf{v}^s \cdot \nabla g^s \right] + g^s \mathbf{v}^s \cdot \nabla (\rho^s - \rho^l) + \rho^l \nabla \cdot \mathbf{v}^s + \mathbf{v}^s \cdot \nabla \rho^l - \frac{g^l \rho^l (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) \cdot \nabla w^l}{\langle \rho \rangle} \quad (\text{A.0.13})$$

En utilisant la dérivée lagrangienne  $\frac{d.}{dt} = \frac{\partial.}{\partial t} + \mathbf{v}^s \cdot \nabla.$ , on obtient :

$$\frac{d \langle w \rangle}{dt} = \frac{w^l - \langle w \rangle}{\langle \rho \rangle} \left[ g^s \frac{\partial \rho^s}{\partial t} + g^l \frac{\partial \rho^l}{\partial t} + (\rho^s - \rho^l) \frac{d g^s}{dt} + g^s (\rho^s - \rho^l) \nabla \cdot \mathbf{v}^s + g^s \mathbf{v}^s \cdot \nabla (\rho^s - \rho^l) + \rho^l \nabla \cdot \mathbf{v}^s + \mathbf{v}^s \cdot \nabla \rho^l \right] - \frac{g^l \rho^l (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) \cdot \nabla w^l}{\langle \rho \rangle}$$

En développant  $\nabla (\rho^s - \rho^l)$  et remarquant que  $\mathbf{v}^s \cdot \nabla \rho^l - g^s \mathbf{v}^s \cdot \nabla \rho^l = g^l \mathbf{v}^s \cdot \nabla \rho^l$  et que

$$g^s \frac{\partial \rho^s}{\partial t} + g^l \frac{\partial \rho^l}{\partial t} + (\rho^s - \rho^l) \left( \frac{d g^s}{dt} + g^s \nabla \cdot \mathbf{v}^s \right) = \rho^l \left( \frac{g^s \partial \rho^s}{\rho^s \partial t} + \frac{g^l \partial \rho^l}{\rho^l \partial t} \right) + \frac{\rho^s - \rho^l}{\rho^s} \left( g^s \frac{\partial \rho^s}{\partial t} + \rho^s \frac{d g^s}{dt} + g^s \rho^s \nabla \cdot \mathbf{v}^s \right)$$



on obtient :

$$\frac{d\langle w \rangle}{dt} = \frac{w^l - \langle w \rangle}{\langle \rho \rangle} \left[ \rho^l \left( \frac{g^s \partial \rho^s}{\rho^s \partial t} + \frac{g^l \partial \rho^l}{\rho^l \partial t} \right) + \frac{\rho^s - \rho^l}{\rho^s} \left( g^s \frac{\partial \rho^s}{\partial t} + \rho^s \frac{dg^s}{dt} + g^s \rho^s \nabla \cdot \mathbf{v}^s \right) + g^l \mathbf{v}^s \cdot \nabla \rho^l + \rho^l \nabla \cdot \mathbf{v}^s + g^s \mathbf{v}^s \cdot \nabla \rho^s \right] - \frac{g^l \rho^l (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) \cdot \nabla w^l}{\langle \rho \rangle}$$

Par définition  $\nabla \cdot \mathbf{v}^s = \frac{1}{V} \frac{dV}{dt}$  avec  $V$  le volume total du VER et en remarquant que  $\frac{d(g^s V)}{dt} = V \frac{dg^s}{dt} + g^s \frac{dV}{dt}$ , on a :

$$\frac{d\langle w \rangle}{dt} = \frac{w^l - \langle w \rangle}{\langle \rho \rangle} \left[ \rho^l \left( \frac{g^s \partial \rho^s}{\rho^s \partial t} + \frac{g^l \partial \rho^l}{\rho^l \partial t} \right) + \frac{\rho^s - \rho^l}{V \rho^s} \left( g^s V \frac{\partial \rho^s}{\partial t} + \rho^s \frac{d(g^s V)}{dt} \right) + \frac{\rho^l dV}{V dt} + g^s \mathbf{v}^s \cdot \nabla \rho^s + g^l \mathbf{v}^s \cdot \nabla \rho^l \right] - \frac{g^l \rho^l (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) \cdot \nabla w^l}{\langle \rho \rangle}$$

De plus  $\frac{d(g^s V)}{dt} = \frac{\partial(g^s V)}{\partial t} + \mathbf{v}^s \cdot \nabla(g^s V)$ , donc :

$$\frac{d\langle w \rangle}{dt} = \frac{w^l - \langle w \rangle}{\langle \rho \rangle} \left[ \rho^l \left( \frac{g^s \partial \rho^s}{\rho^s \partial t} + \frac{g^l \partial \rho^l}{\rho^l \partial t} \right) + \frac{\rho^s - \rho^l}{V \rho^s} \left( g^s V \frac{\partial \rho^s}{\partial t} + \rho^s \frac{\partial(g^s V)}{\partial t} + \rho^s \mathbf{v}^s \cdot \nabla(g^s V) \right) + \frac{\rho^l dV}{V dt} + g^s \mathbf{v}^s \cdot \nabla \rho^s + g^l \mathbf{v}^s \cdot \nabla \rho^l \right] - \frac{g^l \rho^l (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) \cdot \nabla w^l}{\langle \rho \rangle}$$

En constatant que  $g^s V \frac{\partial \rho^s}{\partial t} + \rho^s \frac{\partial(g^s V)}{\partial t} = \frac{\partial(g^s \rho^s V)}{\partial t}$ , l'expression devient :

$$\frac{d\langle w \rangle}{dt} = \frac{w^l - \langle w \rangle}{\langle \rho \rangle} \left[ \rho^l \left( \frac{g^s \partial \rho^s}{\rho^s \partial t} + \frac{g^l \partial \rho^l}{\rho^l \partial t} \right) + \frac{\rho^s - \rho^l}{V \rho^s} \left( \frac{\partial(g^s \rho^s V)}{\partial t} + \rho^s \mathbf{v}^s \cdot \nabla(g^s V) \right) + \frac{\rho^l dV}{V dt} + g^s \mathbf{v}^s \cdot \nabla \rho^s + g^l \mathbf{v}^s \cdot \nabla \rho^l \right] - \frac{g^l \rho^l (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) \cdot \nabla w^l}{\langle \rho \rangle}$$

En remarquant que  $\frac{\partial \rho^s}{\partial t} = \frac{d\rho^s}{dt} - \mathbf{v}^s \cdot \nabla \rho^s$  et  $\rho^s \nabla(g^s V) = \nabla(\rho^s g^s V) - g^s V \nabla \rho^s$ , on a :

$$\frac{d\langle w \rangle}{dt} = \frac{w^l - \langle w \rangle}{\langle \rho \rangle} \left[ \rho^l \left( \frac{g^s d\rho^s}{\rho^s dt} + \frac{g^l \partial \rho^l}{\rho^l \partial t} \right) + \frac{\rho^s - \rho^l}{V \rho^s} \left( \frac{\partial(g^s \rho^s V)}{\partial t} + \mathbf{v}^s \cdot \nabla(g^s \rho^s V) \right) + \rho^l \frac{1}{V} \frac{dV}{dt} + g^l \mathbf{v}^s \cdot \nabla \rho^l \right] - \frac{g^l \rho^l (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) \cdot \nabla w^l}{\langle \rho \rangle}$$

En factorisant par  $V$  et  $\frac{\partial (g^s \rho^s V)}{\partial t} + \mathbf{v}^s \cdot \nabla (g^s \rho^s V) = \frac{d(g^s \rho^s V)}{dt}$  :

$$\frac{d\langle w \rangle}{dt} = \frac{w^l - \langle w \rangle}{\langle \rho \rangle V} \left[ \rho^l \left( \frac{g^s V d\rho^s}{\rho^s dt} + \frac{g^l V \partial \rho^l}{\rho^l \partial t} \right) + \frac{\rho^s - \rho^l d(g^s \rho^s V)}{\rho^s dt} + \rho^l \frac{dV}{dt} + g^l V \mathbf{v}^s \cdot \nabla \rho^l \right] - \frac{g^l \rho^l V (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s)}{\langle \rho \rangle V} \cdot \nabla w^l$$

Par définition, on a  $V^s = g^s V$ ,  $V^l = g^l V$ ,  $m^s = g^s \langle \rho^s \rangle V$ ,  $m = \langle \rho \rangle V$  et  $\mathbf{v}^{l-s} = \mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s$ , l'équation se réécrit alors :

$$\frac{d\langle w \rangle}{dt} = \frac{w^l - \langle w \rangle}{m} \left[ \rho^l \left( \frac{V^s d\rho^s}{\rho^s dt} + \frac{V^l \partial \rho^l}{\rho^l \partial t} \right) + \frac{\rho^s - \rho^l dm^s}{\rho^s dt} + \rho^l \frac{dV}{dt} + g^l V \mathbf{v}^s \cdot \nabla \rho^l \right] - \frac{\rho^l V^l \mathbf{v}^{l-s}}{m} \cdot \nabla w^l$$

On retrouve le taux de macroségrégation de [Les03] accompagné d'un terme supplémentaire  $\frac{w^l - \langle w \rangle}{m} g^l V \mathbf{v}^s \cdot \nabla \rho^l$ . Pour arriver au taux de macroségrégation, Lesoult et al. considèrent que  $\rho^l$  est uniforme dans le VER et par conséquent le terme en  $\nabla \rho^l$  est négligé.



## Annexe B

# Réécriture des équations de conservation avec solide déformable

## Equation de conservation de l'énergie

L'équation de conservation de l'énergie s'écrit (tableau II.4 page 42) :

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \langle \rho h \rangle}_{\text{terme1}} + \underbrace{\nabla \cdot \langle \rho h \mathbf{v} \rangle}_{\text{terme2}} + \nabla \cdot \langle \mathbf{q} \rangle = 0 \quad (\text{B.0.1})$$

avec

$$\langle \rho h \rangle = g^l \rho^l h^l + g^s \rho^s h^s \quad (\text{B.0.2a})$$

$$\langle \rho h \mathbf{v} \rangle = g^l \rho^l h^l \mathbf{v}^l + g^s \rho^s h^s \mathbf{v}^s \quad (\text{B.0.2b})$$

$$\langle \mathbf{q} \rangle = -\langle \kappa \rangle \nabla T \quad (\text{B.0.2c})$$

### Expression du terme 1 :

L'égalité B.0.2a peut se réécrire de la façon suivante [Bel05a] :

$$\begin{aligned} \langle \rho h \rangle &= g^l \rho^l h^l + g^s \rho^s h^s && \text{définition de la fraction massique} \\ \langle \rho h \rangle &= f^l \langle \rho \rangle h^l + f^s \langle \rho \rangle h^s && \longleftarrow \\ \frac{\langle \rho h \rangle}{\langle \rho \rangle} &= f^l h^l + f^s h^s && \longleftarrow \div \langle \rho \rangle \\ &= \langle h \rangle_m && \longleftarrow \text{par définition de } \langle h \rangle_m \end{aligned}$$

Le terme 1 de l'équation B.0.1 peut alors se mettre sous la forme suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \rho h \rangle = \frac{\partial}{\partial t} (\langle \rho \rangle \langle h \rangle_m) = \langle \rho \rangle \frac{\partial \langle h \rangle_m}{\partial t} + \langle h \rangle_m \frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial t} \quad (\text{B.0.3})$$

Le terme  $\frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial t}$  peut s'exprimer en fonction de  $\langle \rho \mathbf{v} \rangle$  grâce à la conservation de la masse :

$$\frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \langle \rho \mathbf{v} \rangle = 0 \Leftrightarrow \frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial t} = -\nabla \cdot \langle \rho \mathbf{v} \rangle \quad (\text{B.0.4})$$

En combinant B.0.3 et B.0.4, on obtient alors :

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} \langle \rho h \rangle = \langle \rho \rangle \frac{\partial \langle h \rangle_m}{\partial t} - \langle h \rangle_m \nabla \cdot \langle \rho \mathbf{v} \rangle} \quad (\text{B.0.5})$$

### Expression du terme 2 :

Pour exprimer le terme 2 sous la forme d'un produit d'une vitesse et d'un gradient d'enthalpie, il est nécessaire d'écrire  $\langle \rho h \mathbf{v} \rangle$  d'une manière différente. On montre que (page suivante) [Bel05a] :

$$\langle \rho h \mathbf{v} \rangle = \langle h \rangle_m \langle \rho \mathbf{v} \rangle + L f^s f^l \langle \rho \rangle (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) \quad (\text{B.0.6})$$

L'équation de conservation de l'énergie B.0.1 s'écrit alors :

$$\boxed{\langle \rho \rangle \frac{\partial \langle h \rangle_m}{\partial t} + \nabla \langle h \rangle_m \cdot \langle \rho \mathbf{v} \rangle + L \nabla \cdot (f^s f^l \langle \rho \rangle (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s)) - \nabla \cdot (\langle \kappa \rangle \nabla T) = 0} \quad (\text{B.0.7})$$

Expression de  $\langle \rho h \mathbf{v} \rangle$  [Be105a] :

$$\begin{aligned}
 \langle \rho h \mathbf{v} \rangle &= g^s \rho^s h^s \mathbf{v}^s + g^l \rho^l h^l \mathbf{v}^l && \text{ajout et retrait de } \langle h \rangle_m \\
 &= g^s \rho^s \mathbf{v}^s \langle h \rangle_m + g^s \rho^s \mathbf{v}^s (h^s - \langle h \rangle_m) + g^l \rho^l \mathbf{v}^l \langle h \rangle_m + g^l \rho^l \mathbf{v}^l (h^l - \langle h \rangle_m) && \text{regroupement de terme} \\
 &= (g^s \rho^s \mathbf{v}^s + g^l \rho^l \mathbf{v}^l) \langle h \rangle_m + g^s \rho^s \mathbf{v}^s (h^s - \langle h \rangle_m) + g^l \rho^l \mathbf{v}^l (h^l - \langle h \rangle_m) && \text{définition de } \langle \rho \mathbf{v} \rangle \text{ et} \\
 &= \langle h \rangle_m \langle \rho \mathbf{v} \rangle + g^s \rho^s \mathbf{v}^s (h^s - f^l h^l - f^s h^s) + g^l \rho^l \mathbf{v}^l (h^l - f^l h^l - f^s h^s) && \text{de } \langle h \rangle_m \\
 &= \langle h \rangle_m \langle \rho \mathbf{v} \rangle + g^s \rho^s \mathbf{v}^s f^l (h^s - h^l) + g^l \rho^l \mathbf{v}^l f^s (h^l - h^s) && \text{utilisation de l'égalité} \\
 &= \langle h \rangle_m \langle \rho \mathbf{v} \rangle + L (g^l \rho^l \mathbf{v}^l f^s - g^s \rho^s \mathbf{v}^s f^l) && f^s + f^l = 1 \\
 &= \langle h \rangle_m \langle \rho \mathbf{v} \rangle + L (g^l \rho^l \mathbf{v}^l f^s - g^s \rho^s \mathbf{v}^s f^l) && L = h^l - h^s \\
 &= \langle h \rangle_m \langle \rho \mathbf{v} \rangle + L \left( g^l \rho^l \mathbf{v}^l \frac{g^s \rho^s}{\langle \rho \rangle} - g^s \rho^s \mathbf{v}^s \frac{g^l \rho^l}{\langle \rho \rangle} \right) && \text{par définition de } f^s \text{ et } f^l \\
 &= \langle h \rangle_m \langle \rho \mathbf{v} \rangle + L \frac{g^l \rho^l g^s \rho^s}{\langle \rho \rangle} (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) && \text{factorisation des termes communs} \\
 &= \langle h \rangle_m \langle \rho \mathbf{v} \rangle + L f^s f^l \langle \rho \rangle (\mathbf{v}^l - \mathbf{v}^s) = \frac{1}{\langle \rho \rangle} (f^l \langle \rho \rangle \cdot f^s \langle \rho \rangle) = f^s f^l \langle \rho \rangle
 \end{aligned}$$



## Annexe C

# Résolution du modèle de microségrégation



La résolution du modèle de microségrégation est essentielle pour le calcul en macroségrégations. Elle permet d'obtenir  $T$ ,  $f^l$ ,  $w^l$  et  $\frac{dT}{d\langle h \rangle_m}$ , variables nécessaires pour la résolution des équations macroscopiques. Par exemple  $T$  et  $w^l$  interviennent entre autres dans le calcul de  $\rho$  et  $\frac{dT}{d\langle h \rangle_m}$  dans les itérations de Newton-Raphson lors de la résolution de la conservation de l'énergie. Le modèle de microségrégation utilisé est celui de la loi des leviers. Deux cas sont à envisager : celui des alliages binaires et ceux des alliages multiconstitués (alliages ternaires et au-delà).

## C.1 Alliage binaire

Pour les alliages binaires, le modèle de microségrégation revient à résoudre le système d'équations suivant :

$$\begin{cases} \langle h \rangle_m &= c_p T + f^l L \\ \langle w \rangle_m &= f^l w^l + f^s w^s = w^l (f^l (1 - k) + k) \\ T &= T_f + m_{liq} w^l \end{cases}$$

où  $c_p$  a été supposée constante et le liquidus et le solidus du diagramme de phase ont été linéarisés.

La résolution de ce système consiste à déterminer en chacun des nœuds du maillage d'éléments finis  $T$ ,  $f^l$ ,  $w^l$  et  $\frac{dT}{d\langle h \rangle_m}$  à partir de  $\langle h \rangle_m$  et  $\langle w \rangle_m$  calculées préalablement grâce à la résolution éléments finis de la conservation de l'énergie et des espèces chimiques, respectivement. La procédure mise en place pour résoudre ce système est récapitulée à la figure C.1. Connaissant  $\langle w \rangle_m$ , la température du solidus  $T_{sol}$  et celle du liquidus  $T_{liq}$  sont calculées puis sont déterminées  $h_{sol}$ ,  $h_{liq}$  et  $h_{eut}$ . Quatre cas sont alors possibles suivant la valeur de  $\langle h \rangle_m$  par rapport à  $h_{sol}$ ,  $h_{liq}$  et  $h_{eut}$ . Pour les cas où  $h_{eut} \leq \langle h \rangle_m < h_{liq}$  et  $h_{sol} \leq \langle h \rangle_m < h_{eut}$ , les valeurs de  $\frac{dT}{d\langle h \rangle_m}$  utilisées sont arbitraires. Elles ont été choisies car elles assurent une bonne convergence des itérations de Newton-Raphson.

## C.2 Alliage multiconstitué

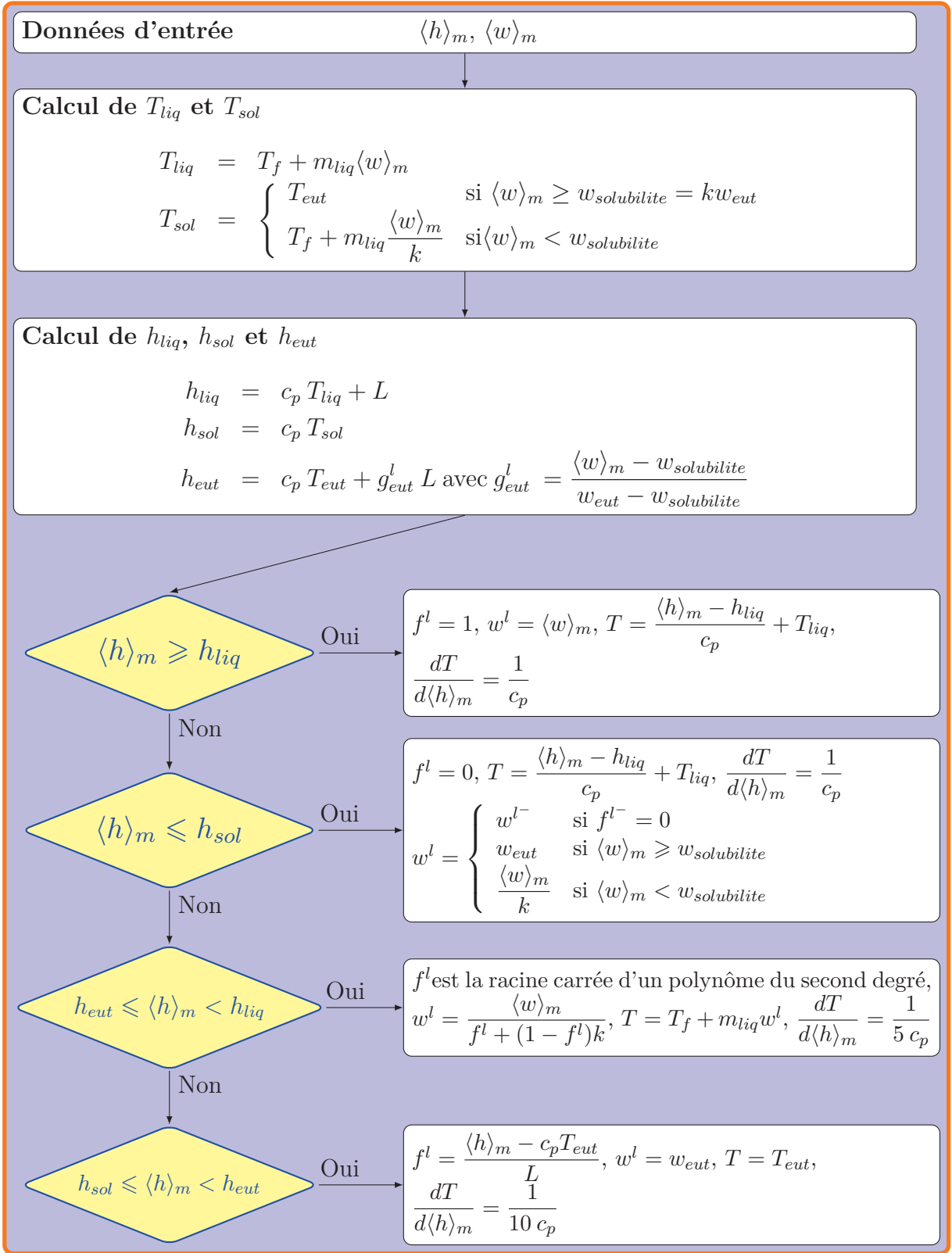
Le cas des alliages multiconstitués est plus délicat à traiter car la résolution du modèle de microségrégation ne se réduit pas à un système simple d'équations comme dans le cas des alliages binaires. La démarche suivie est donc la suivante :

1. Préalablement à la simulation, les chemins de solidification pour des alliages de composition proche de celle à l'instant initial sont calculés avec le logiciel Thermocalc<sup>®</sup>. Ces alliages "proches" sont déterminés de la manière suivante :

Soit  $i$  un élément d'alliage et  $n$  le nombre total d'éléments. Les alliages proches sont les alliages de compositions

$$[w_1 - \Delta w_1, w_1 + \Delta w_1] \times \dots \times [w_i - \Delta w_i, w_i + \Delta w_i] \times \dots \times [w_n - \Delta w_n, w_n + \Delta w_n]$$

Les pas de concentration  $\Delta w_i$  sont fixés a priori de sorte qu'au cours de la simulation  $\langle w_i \rangle_m$  reste dans  $[w_i - \Delta w_i, w_i + \Delta w_i]$ . Chaque intervalle  $[w_i - \Delta w_i, w_i + \Delta w_i]$  est



**Fig. C.1:** Résolution du modèle de microségrégation (loi des leviers) pour un alliage binaire ( $w_{solubilite}$  représente la solubilité maximale, à la température de l'eutectique, de l'élément d'alliage).

discrétisé en  $p_i$  valeurs. Au total,  $\prod_{i=1}^n p_i$  chemins de solidification sont calculés. Chaque chemin de solidification est calculé pour un intervalle de température allant de la température ambiante à une température de quelques degrés au-dessus de la température initiale de simulation. Les données fournies pour chaque température sont l'enthalpie ainsi que les compositions et les fractions des phases (liquide, ferrite, austénite...) apparaissant en cours de la solidification de l'alliage considéré. Toutes les données sont stockées dans un tableau.

2. Au cours de la simulation, les valeurs de  $T$  ainsi que les compositions et les fractions des phases correspondant à l'alliage  $\langle w_1 \rangle_m \times \dots \times \langle w_i \rangle_m \times \dots \times \langle w_n \rangle_m$  et à l'enthalpie  $\langle h \rangle_m$  calculés par la résolution éléments finis, sont obtenues par interpolation des données du tableau.





## Annexe D

# Solution analytique de la solidification d'une barre semi-infinie

E.N. Kondrashov propose une solution analytique pour le problème de la solidification d'une barre semi-infinie [Kon06]. Il s'agit d'un problème de transformation de phase non-isotherme. La solution analytique est obtenue en considérant une demi-droite (géométrie 1D) semi-infinie et les hypothèses suivantes :

- Le transfert de chaleur est principalement conductif, le mouvement de chaque phase est négligé. Sa diffusion se fait de manière isotrope ;
- La tension de surface à l'interface solide/liquide est négligeable ;
- Les propriétés thermophysiques (chaleur spécifique et conductivité thermique) du matériau sont constantes au sein du solide et du liquide. Dans le pâteux, chaque propriété  $\phi(T)$  est obtenue par une loi de mélange linéaire :

$$\phi(T) = (1 - g^l(T)) \phi^s + g^l(T) \phi^l$$

où  $g^l(T)$  est connue à l'avance.

- La masse volumique  $\rho_0$  est inchangée entre les deux phases (les fractions massiques et volumiques sont donc confondues).

Le problème s'écrit :

$$\begin{cases} \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( a(H) \frac{\partial H}{\partial x} \right) \\ H(x, t = 0) = H(T_{init}) = H_{init} \\ H(x = 0, t) = H(T_{imp}) = H_{imp} \\ H(x = \infty, t) = H(T_{init}) \end{cases} \quad (\text{D.0.1})$$

où  $H$  représente l'enthalpie volumique du système,  $a$  la diffusivité thermique du matériau,  $t$  le temps et  $x$  un point de la demi-droite. L'enthalpie volumique  $H$  est définie par :

$$H(T) = \rho_0 \int_0^T c_p(\zeta) d\zeta + g^l(T) \rho_0 L \quad (\text{D.0.2})$$

et la diffusivité thermique  $a$  par :

$$a(T) = \frac{\kappa(T)}{\frac{dH(T)}{dT}} \quad (\text{D.0.3})$$

L'obtention de la solution analytique requiert de prendre la conductivité thermique constante dans toutes les régions :

$$a(T) = \begin{cases} a^s = \text{const1} & \text{pour } T < T_{sol} \\ a^{sl} = \text{const2} & \text{pour } T_{sol} \leq T \leq T_{liq} \\ a^l = \text{const3} & \text{pour } T > T_{liq} \end{cases} \quad (\text{D.0.4})$$

Pour résoudre cette équation, le domaine  $[0, \infty)$  est divisé en trois sous-intervalles  $[0, X_{sol})$ ,  $[X_{sol}, X_{liq}]$  et  $(X_{liq}, \infty)$  ( $X_{sol}$  et  $X_{liq}$  représentent respectivement la position du solidus et du liquidus). Les positions du solidus et du liquidus sont supposées données par les relations suivantes :

$$X_{sol}(t) = k^s \sqrt{t}, \quad X_{liq}(t) = k^l \sqrt{t} \quad (\text{D.0.5})$$

avec  $k^s$  et  $k^l$  des constantes à déterminer.

Les solutions analytiques sont données pour chacun des trois sous-intervalles :

$$\forall x \in [0, X_{sol}),$$

$$H(x, t) = H_{imp} + (H_{sol} - H_{imp}) \frac{\operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{a^s t}}\right)}{\operatorname{erf}\left(\frac{k^s}{2\sqrt{a^s}}\right)}$$

$$\forall x \in [X_{sol}, X_{liq}],$$

$$H(x, t) = \frac{(H_{liq} - H_{sol}) \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{a^{sl} t}}\right) + H_{sol} \operatorname{erf}\left(\frac{k^s}{2\sqrt{a^{sl}}}\right) - H_{liq} \operatorname{erf}\left(\frac{k^l}{2\sqrt{a^{sl}}}\right)}{\operatorname{erf}\left(\frac{k^l}{2\sqrt{a^{sl}}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{k^s}{2\sqrt{a^{sl}}}\right)}$$

$$\forall x \in [X_{liq}, \infty),$$

$$H(x, t) = H_{init} + (H_{init} - H_{liq}) \frac{\operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{a^l t}}\right)}{\operatorname{erfc}\left(\frac{k^l}{2\sqrt{a^l}}\right)}$$

Les constantes  $k^s$  et  $k^l$  apparaissant dans les trois dernières équations sont les racines des équations transcendantes suivantes :

$$\begin{aligned} \frac{(H_{sol} - H_{imp})\sqrt{a^s} \exp\left(-\frac{k^{s^2}}{4a^s}\right)}{\operatorname{erf}\left(\frac{k^s}{2\sqrt{a^s}}\right)} - \frac{(H_{liq} - H_{sol})\sqrt{a^{sl}} \exp\left(-\frac{k^{s^2}}{4a^{sl}}\right)}{\operatorname{erf}\left(\frac{k^l}{2\sqrt{a^{sl}}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{k^s}{2\sqrt{a^{sl}}}\right)} &= 0 \\ \frac{(H_{liq} - H_{sol})\sqrt{a^{sl}} \exp\left(-\frac{k^{l^2}}{4a^{sl}}\right)}{\operatorname{erf}\left(\frac{k^l}{2\sqrt{a^{sl}}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{k^s}{2\sqrt{a^{sl}}}\right)} - \frac{(H_{init} - H_{liq})\sqrt{a^l} \exp\left(-\frac{k^{l^2}}{4a^l}\right)}{\operatorname{erfc}\left(\frac{k^l}{2\sqrt{a^l}}\right)} &= 0 \end{aligned} \quad (\text{D.0.6})$$





## Annexe E

# Données thermophysiques et thermomécaniques de l'alliage b1

La composition chimique de l'alliage b1 est rappelée ci-dessous :

Elément	teneur [%pds]
Carbone	0.105
Manganèse	0.636
Silicium	0.2680
Aluminium	0.0067
Soufre	0.009
Phosphore	0.0189

Tab. E.1: Composition chimique de l'alliage b1

## Données thermophysiques

Les données thermophysiques ont été obtenues grâce à Thermocalc® exceptées pour la conductivité thermique qui a été reprise de [Pac02]. Le chemin de solidification a été modifié afin de prendre en compte une surfusion. L'intervalle de solidification a été réduit, la solidification ne débutant qu'à la température de 1493°C. La masse volumique a été changée en conséquence.

Chaleur latente  $L = 287766 \text{ J.kg}^{-1}$

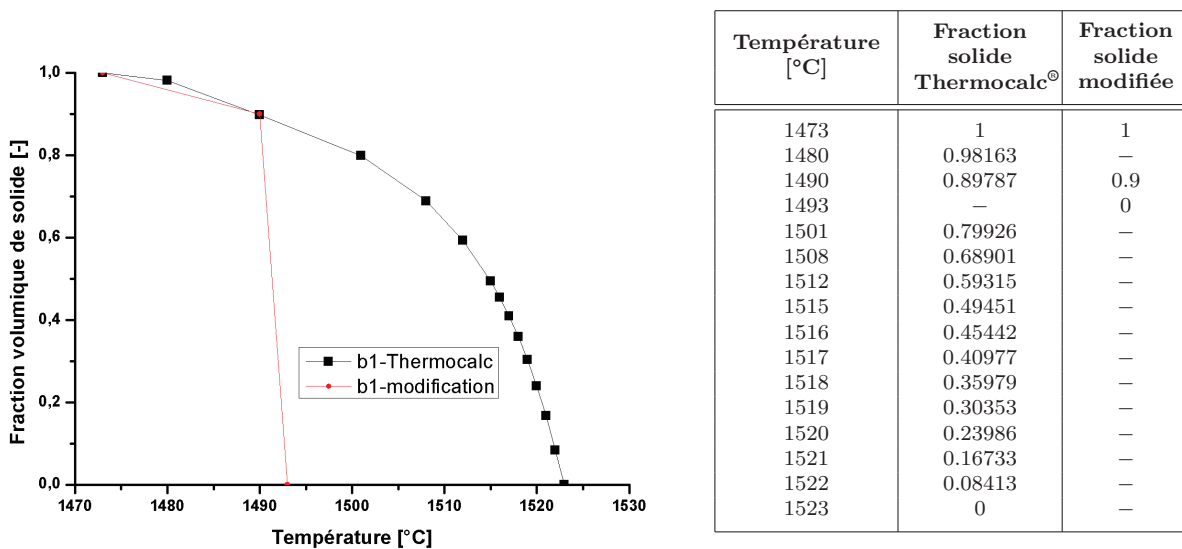
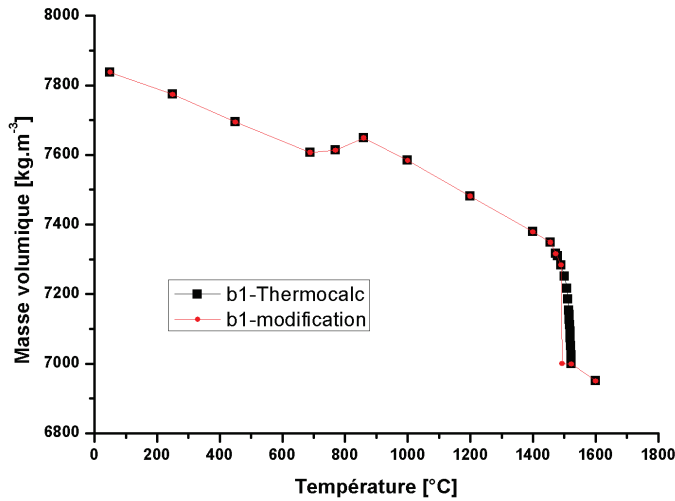
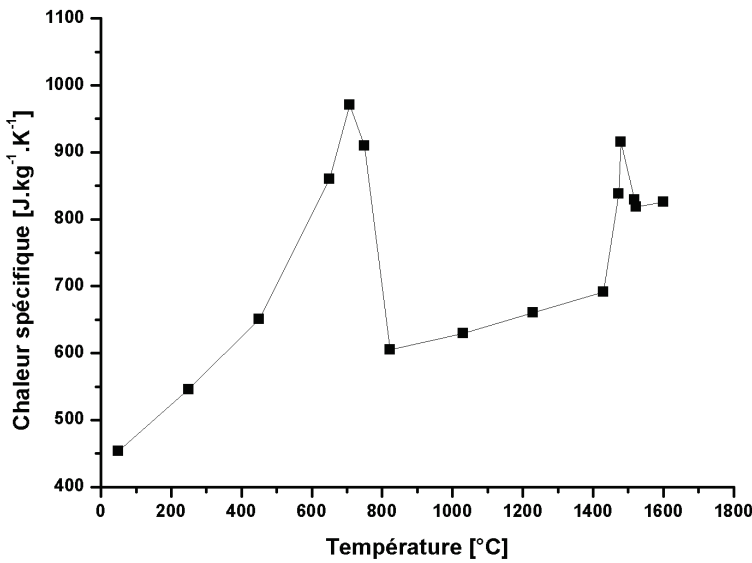


Fig. E.1: Evolution de la fraction de solide de l'alliage b1 en fonction de la température



Température [°C]	$\rho$ Thermocalc® [kg.m <sup>-3</sup> ]	$\rho$ modifiée [kg.m <sup>-3</sup> ]
50	7837.6457	7837.6457
250	7773.57261	7773.57261
450	7694.21661	7694.21661
689	7606.61346	7606.61346
770	7613.38428	7613.38428
860	7648.69687	7648.69687
1000	7584.01752	7584.01752
1200	7480.75018	7480.75018
1400	7378.4862	7378.4862
1456	7348.40514	7348.40514
1473	7315.7025	7315.7025
1480	7309.7509	—
1490	7282.67428	7283.5019
1493	—	7000
1501	7250.92748	—
1508	7215.59734	—
1512	7185.01606	—
1515	7153.68483	—
1516	7140.99194	—
1517	7126.87907	—
1518	7111.11373	—
1519	7093.41315	—
1520	7073.43031	—
1521	7050.7362	—
1522	7024.7961	—
1523	6998.6609	6998.6609
1600	6949.81485	6949.81485

Fig. E.2: Evolution de la masse volumique de l'alliage b1 en fonction de la température. Dans l'intervalle de solidification, Theracast® calcule  $\rho$  telle que  $\rho = g^s \rho_{sol} + g^l \rho_{liq}$



Température [°C]	$c_p$ [J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> ]
50	453.85112
250	546.00724
450	650.61005
650	859.68954
708	970.79115
750	909.7072
823	605.02237
1030	629.19193
1230	660.18819
1430	691.77412
1473	837.60108
1480	915.11596
1518	828.63978
1523	818.4146
1600	825.74227

Fig. E.3: Evolution de la chaleur spécifique de l'alliage b1 en fonction de la température

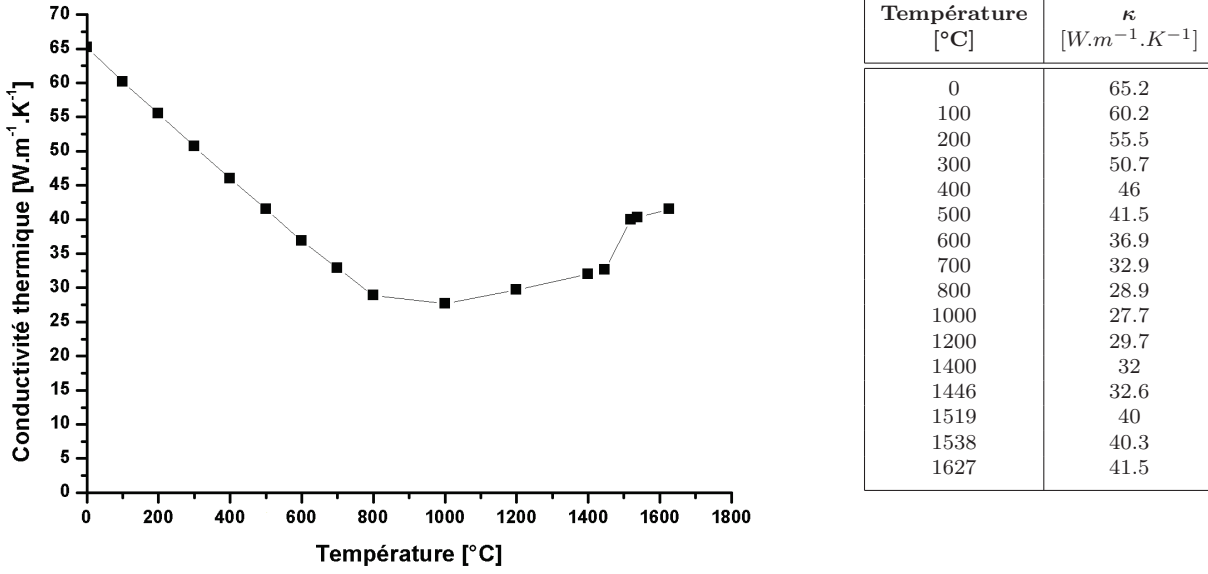


Fig. E.4: Evolution de la conductivité thermique de l'alliage b1 en fonction de la température

## Données thermomécaniques

Parmi les lois de comportement accessibles dans Thercast<sup>®</sup>, la loi multiplicative de type 2 a été choisie. Elle s'écrit :

- pour le comportement élasto-viscoplastique :

$$\bar{\sigma} = \sigma_s + K_{evp} \dot{\bar{\epsilon}}^{m_{evp}} \bar{\epsilon}^{n_{evp}} \quad (\text{E.0.1})$$

avec  $\sigma_s$  le seuil de plasticité statique.

- pour le comportement purement viscoplastique :

$$\bar{\sigma} = K_{vp} \sqrt{3}^{m_{vp}+1} \dot{\bar{\epsilon}}^{m_{vp}} \quad (\text{E.0.2})$$

Le choix du comportement est déterminé par la température comme évoqué à la section III.5 du chapitre III. En-dessous d'une température critique  $T_C$ , le comportement est élasto-viscoplastique et purement viscoplastique au-dessus. A la température critique, pour avoir continuité des contraintes, plusieurs conditions sont à respecter :

$$\begin{cases} \sigma_s = 0 \\ K_{evp} = K_{vp} \sqrt{3}^{m_{vp}+1} \\ m_{evp} = m_{vp} \\ n_{evp} = 0 \end{cases}$$

Pour lancer un calcul thermomécanique, il est nécessaire de préciser les valeurs de  $K_{evp}$ ,  $m_{evp}$ ,  $n_{evp}$ , de  $K_{vp}$ ,  $m_{vp}$  en fonction de la température ainsi que la valeur de la température critique. Dans notre cas, pour le calcul de la déformation de la goutte en microgravité, la température critique a été choisie égale à un degré au-dessus de la température de liquidus de l'alliage b1, c'est-à-dire  $T_C = T_{liq} + 1 = 1494^\circ\text{C}$ . Comme au-dessus de la température

$T_C = T_{liq} + 1$ , tout est liquide, le comportement est considéré comme newtonien. Dans ce cas :  $m_{vp} = 1$  et  $K_{vp} = 10^{-3} Pa.s$ , correspondant à la viscosité dynamique du métal liquide. En dessous de  $T_C$ , les coefficients  $K_{evp}$ ,  $m_{evp}$  et  $n_{evp}$  sont calculés à partir du modèle II de [Koz92]. Le modèle II considère la loi de comportement sous la forme suivante :

$$\sigma = C_{Koz}^{-1/n_{Koz}} \exp\left(\frac{Q_{Koz}}{n_{Koz} T}\right) \varepsilon^{-m_{Koz}/n_{Koz}} \dot{\varepsilon}^{(m_{Koz}+1)/n_{Koz}} \quad (E.0.3)$$

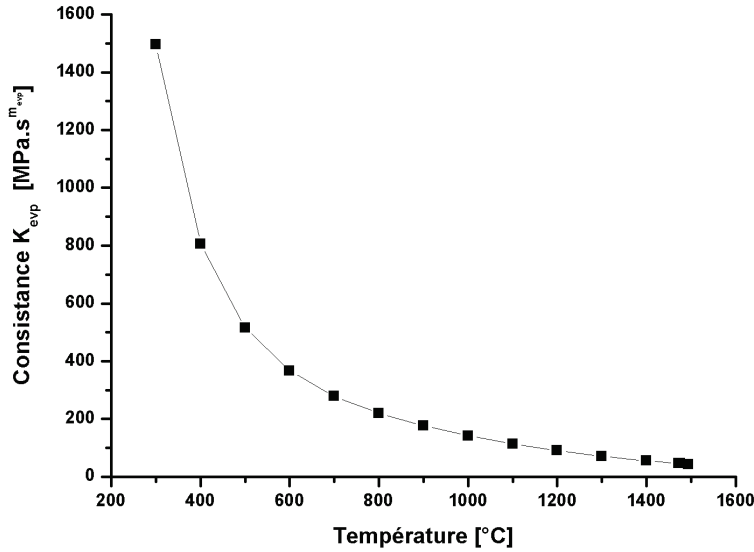
avec la température  $T$  en Kelvin et

$$\begin{cases} Q_{Koz} = 17160 & [K] \\ K_{Koz} = 0.3091 + 0.2090 (\%pdsC) + 0.1773 (\%pdsC)^2 & [MPa^{-n_{Koz}} .s^{-m_{Koz}-1}] \\ n_{Koz} = 6.365 - 4.521 \times 10^{-3} T + 1.439 \times 10^{-6} T^2 & [-] \\ m_{Koz} = -1.362 + 5.761 \times 10^{-4} T + 1.982 \times 10^{-8} T^2 & [-] \end{cases}$$

En identifiant les égalités E.0.3 et E.0.1,

$$\begin{cases} \sigma_s = 0 \\ K_{evp} = K_{Koz}^{-1/n_{Koz}} \exp\left(\frac{Q_{Koz}}{n_{Koz} T}\right) \\ n_{evp} = \frac{-m_{Koz}}{n_{Koz}} \\ m_{evp} = \frac{m_{Koz} + 1}{n_{Koz}} \end{cases}$$

Les évolutions de  $K_{evp}$ ,  $n_{evp}$  et  $m_{evp}$  sont représentées dans les graphiques ci-après.



Température [°C]	$K_{evp}$ [MPa.s <sup>m</sup> ]
300	1495.95
400	806.439
500	516.023
600	366.936
700	278.398
800	219.337
900	176.06
1000	142.048
1100	114.126
1200	90.79
1300	71.339
1400	55.386
1473	45.759
1494	43.282

Fig. E.5: Evolution de la consistance  $K_{evp}$  à l'état solide de l'alliage b1 en fonction de la température (loi élasto-viscoplastique multiplicative de type 2)

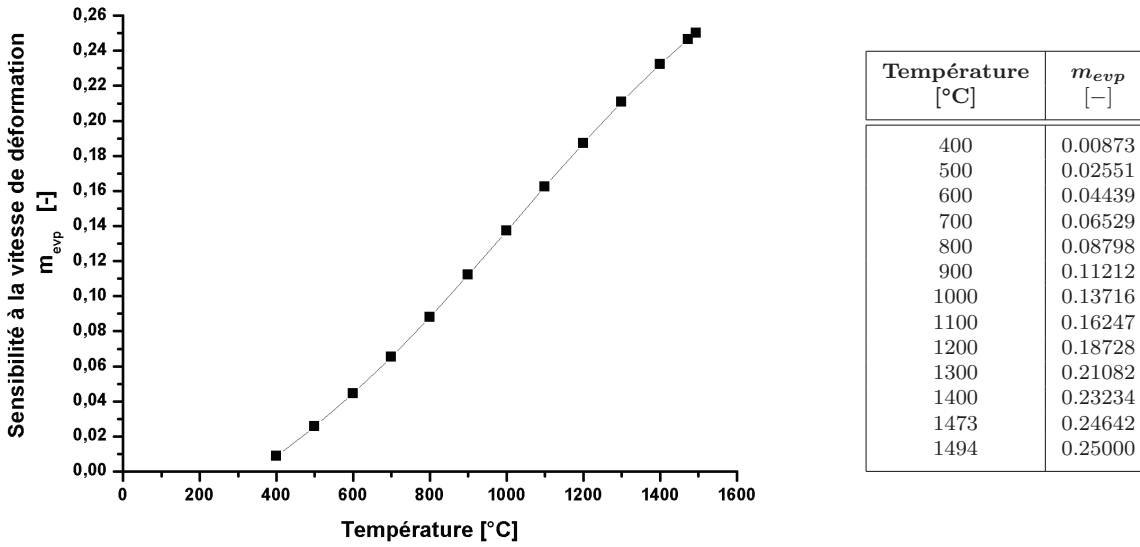


Fig. E.6: Evolution de la sensibilité à la vitesse de déformation  $m_{evp}$  à l'état solide de l'alliage b1 en fonction de la température (loi élasto-viscoplastique multiplicative de type 2)

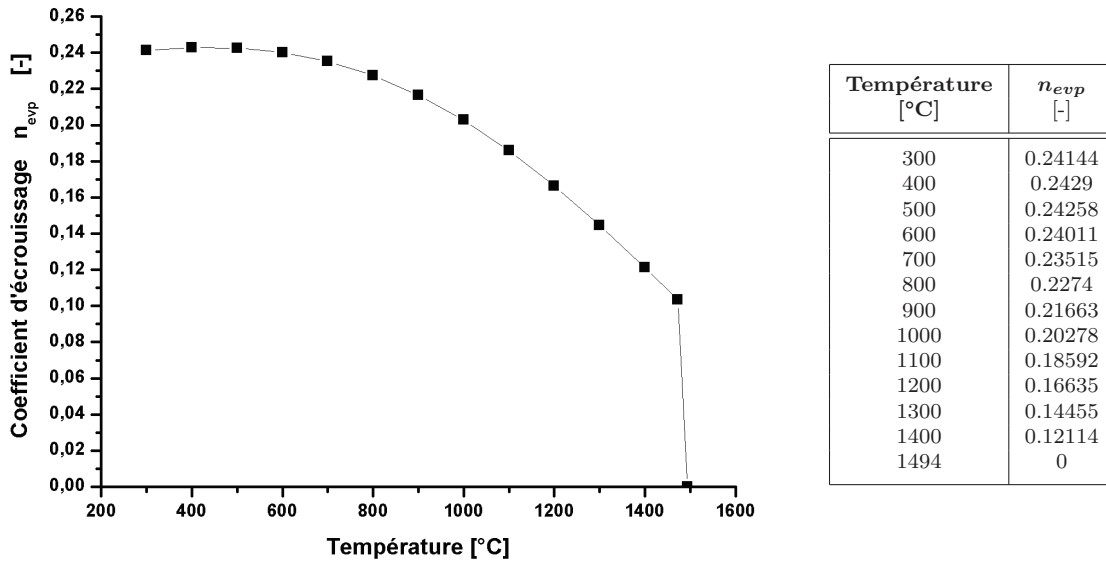


Fig. E.7: Evolution du coefficient d'écroutissage en fonction de la température pour l'alliage b1 à l'état solide (loi élasto-viscoplastique multiplicative de type 2)

Le module d'Young est donné directement par le modèle II de [Koz92] :

$$E = 968 - 2.33 (T - 273) + 1.9 \times 10^{-3} (T - 273)^2 - 5.18 \times 10^{-7} (T - 273)^3 \quad (\text{E.0.4})$$

avec le module d'Young  $E$  en  $GPa$  et la température  $T$  en Kelvin.

Bien que cette expression E.0.4 n'ait été établie par [Koz92] que pour des températures entre  $900^\circ\text{C}$  et  $1400^\circ\text{C}$ , cette relation a été utilisée entre  $700^\circ\text{C}$  et  $1400^\circ\text{C}$ . En-dessous de  $700^\circ\text{C}$ , le module d'Young croît linéairement jusqu'à sa valeur courante de  $210\text{ GPa}$  à  $T = 0^\circ\text{C}$ .

Le coefficient de Poisson est pris égal à 0.3.

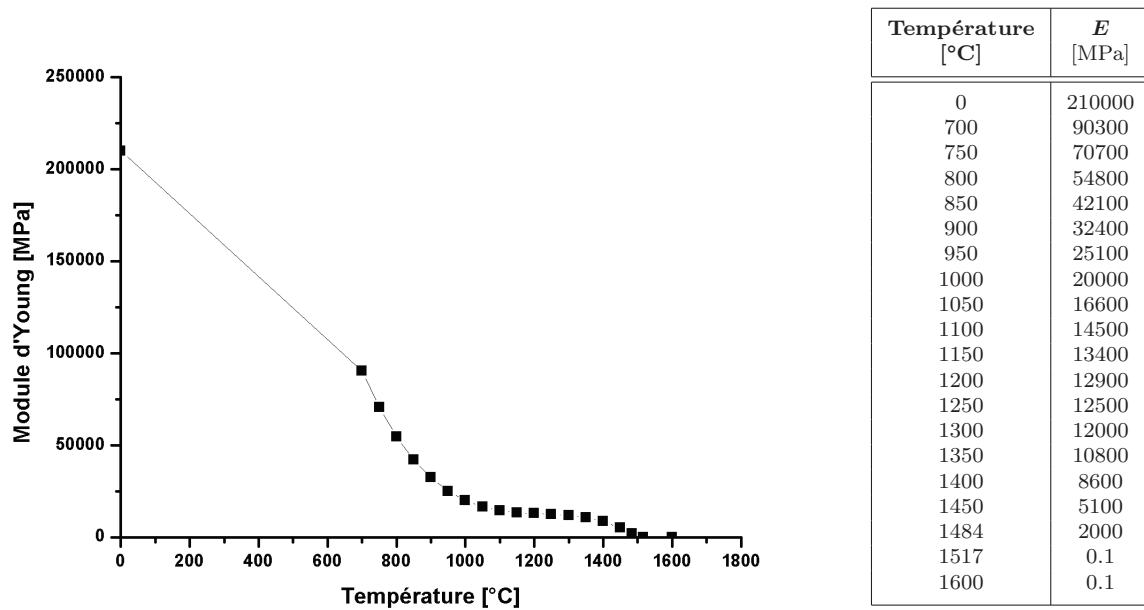


Fig. E.8: Evolution du module d'Young de l'alliage b1 en fonction de la température





## Annexe F

**Données thermophysiques et  
thermomécaniques de l'alliage b1  
considéré comme un alliage binaire**

La composition chimique de l'alliage *b1* en tant qu'alliage binaire est rappelée ci-dessous :

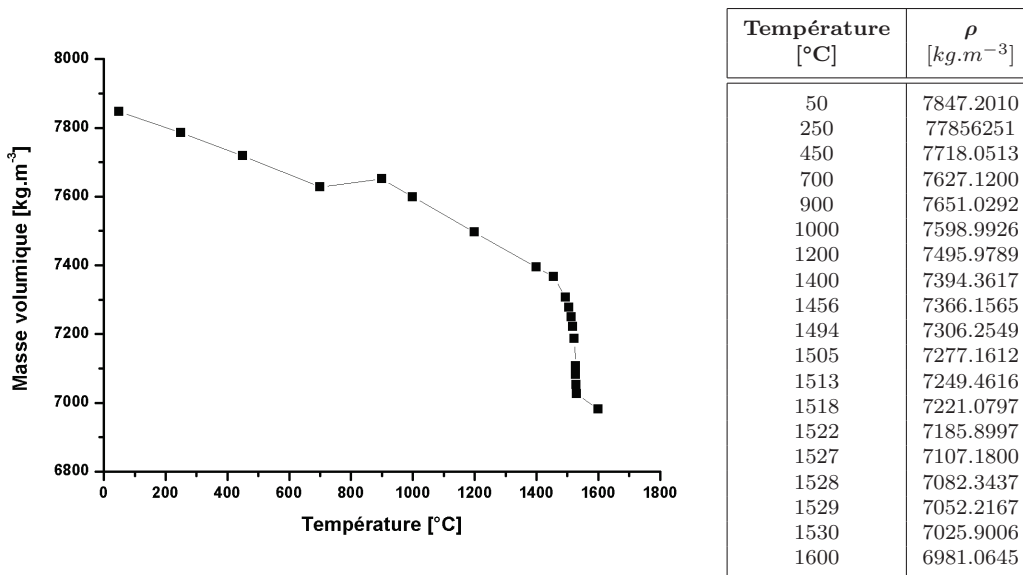
Elément	teneur [%pds]
Carbone	0.105

**Tab. F.1:** Composition chimique de l'alliage *b1* en tant qu'alliage binaire

## Données thermophysiques

L'évolution thermique de la masse volumique a été obtenue grâce à Thermocalc<sup>®</sup>. La chaleur massique et la conductivité thermique ont été prises constantes à  $661 \text{ J.kg}^{-1}.K^{-1}$  et à  $42 \text{ W.m}^{-1}.K^{-1}$  respectivement. La température du solidus et du liquidus sont respectivement de  $1494^\circ\text{C}$  et de  $1530^\circ\text{C}$ .

Chaleur latente  $L = 270156 \text{ J.kg}^{-1}$



**Fig. F.1:** Evolution de la masse volumique de l'alliage binaire Fe-0.105%pdsC en fonction de la température

## Données thermomécaniques

Les données thermomécaniques sont calculées à partir du modèle II de [Koz92] de la même manière que pour l'alliage *b1* (Annexe E). La température critique  $T_C$  de transition entre un comportement élasto-viscoplastique et viscoplastique se fait à un degré au-dessus de la température du liquidus. On ne considère pas ici de surfusion. La température du liquidus est de  $1530^\circ\text{C}$ , donc  $T_C = 1531^\circ\text{C}$ . Le coefficient de Poisson est pris égal à 0.3.

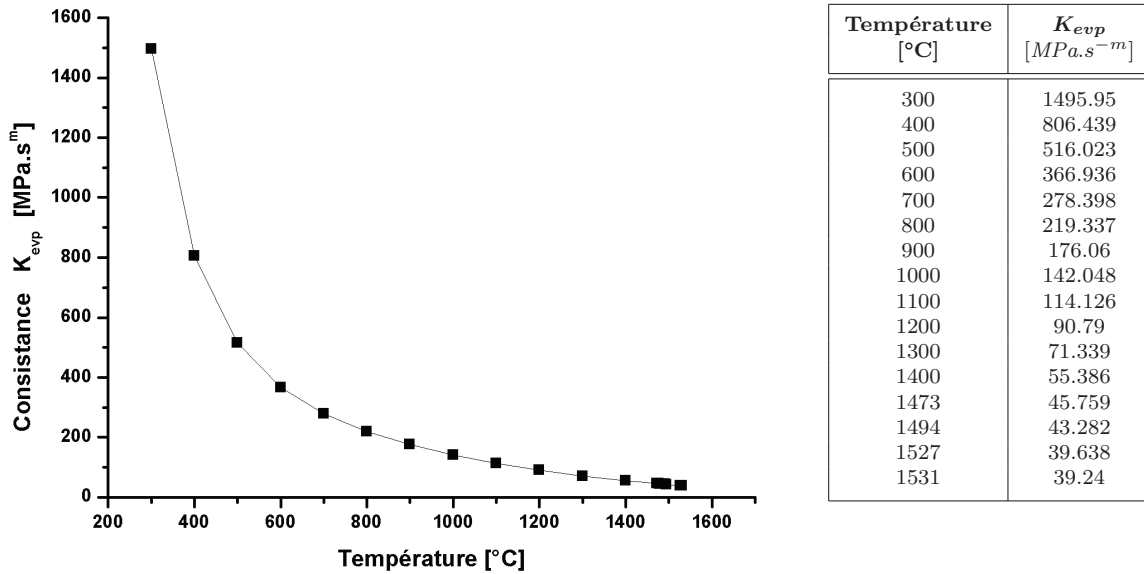


Fig. F.2: Evolution de la consistance  $K_{evp}$  à l'état solide de l'alliage binaire Fe-0.105%*pdsC* en fonction de la température (loi élasto-viscoplastique multiplicative de type 2)

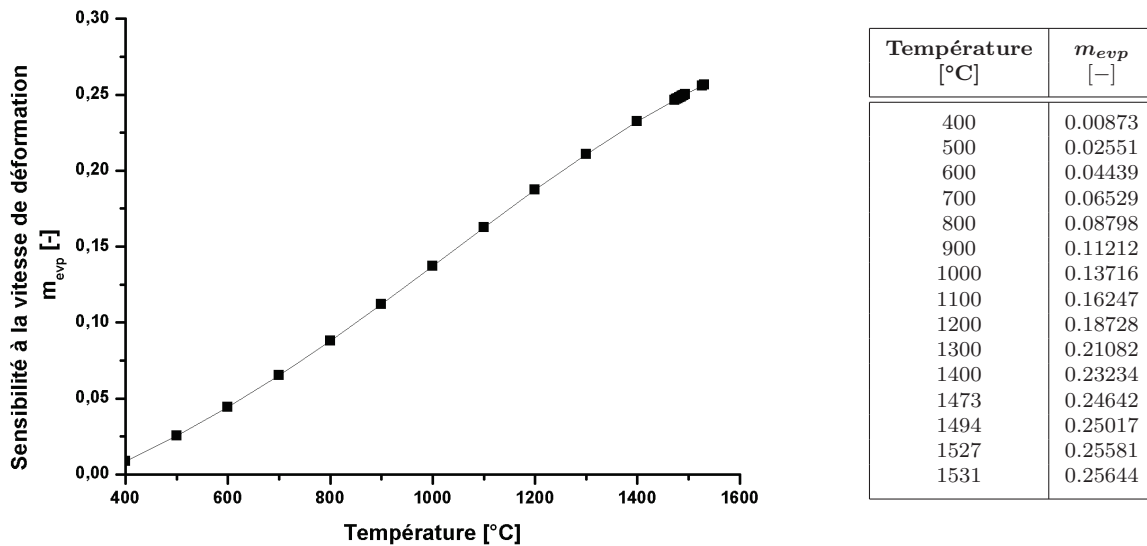


Fig. F.3: Evolution de la sensibilité à la vitesse de déformation  $m_{evp}$  à l'état solide de l'alliage binaire Fe-0.105%*pdsC* en fonction de la température (loi élasto-viscoplastique multiplicative de type 2)

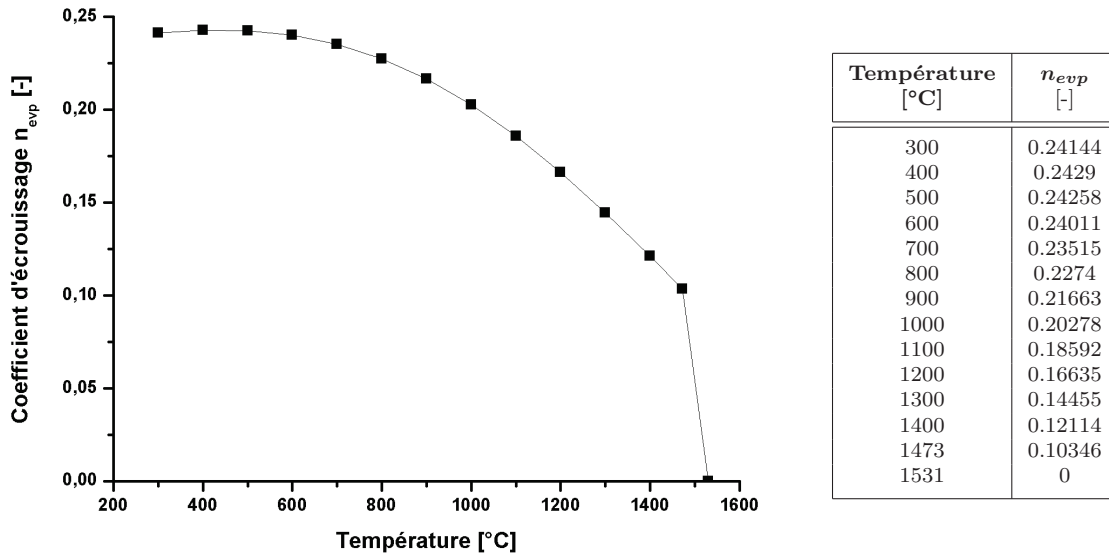


Fig. F.4: Evolution du coefficient d'écroûissage en fonction de la température pour l'alliage binaire Fe-0.105%*pdsC* à l'état solide (loi élasto-viscoplastique multiplicative de type 2)

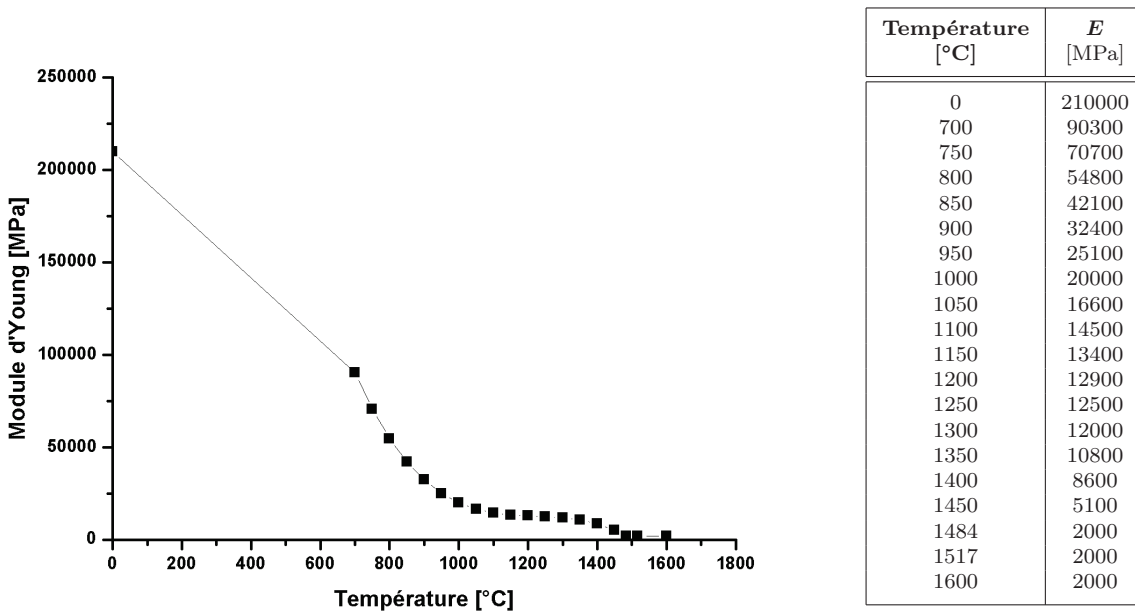


Fig. F.5: Evolution du module d'Young de l'alliage binaire Fe-0.105%*pdsC* en fonction de la température





## Annexe G

# Données thermophysiques et thermomécaniques de l'alliage pour la simulation de l'expérience de El-Bealy



La composition chimique de l'alliage binaire servant à simuler l'expérience de El-Bealy est rappelée ci-dessous :

Elément	teneur [%pds]
Carbone	0.53

**Tab. G.1:** Composition chimique de l'alliage servant à la simulation de l'expérience de El-Bealy

## Données thermophysiques

Les valeurs des données thermophysiques ont été reprises de la simulation de Niane [Nia04]. La conductivité thermique et la chaleur spécifique ont été prises constantes égales à  $32 W.m^{-1}.K^{-1}$  et à  $700 J.kg^{-1}.K^{-1}$  respectivement. Le traitement de la masse volumique est plus délicat. En effet, Niane considère la masse volumique de la manière suivante :

- pour le solide :  $\rho^s = \rho_0^s(1 + \beta_T^s(T_{ref}^s - T))$
  - pour le liquide :  $\rho^l = \rho_0^l(1 + \beta_T^l(T_{ref}^l - T) + \beta_w^l(w_{ref}^l - w^l))$
  - dans l'intervalle de solidification :  $\langle \rho \rangle = g^s \rho^s + g^l \rho^l$
- avec les valeurs suivantes :
- |             |   |                        |                  |
|-------------|---|------------------------|------------------|
| $\rho_0^s$  | = | 7298                   | $kg.m^{-3}$      |
| $\rho_0^l$  | = | 7060                   | $kg.m^{-3}$      |
| $\beta_T^s$ | = | $5.33 \times 10^{-5}$  | $^{\circ}C^{-1}$ |
| $\beta_T^l$ | = | $8.82 \times 10^{-5}$  | $^{\circ}C^{-1}$ |
| $\beta_w^l$ | = | $1.983 \times 10^{-3}$ | $(\%pds)^{-1}$   |
| $T_{ref}^s$ | = | 1349.48                | $^{\circ}C$      |
| $T_{ref}^l$ | = | 1538                   | $^{\circ}C$      |
| $w_{ref}^l$ | = | 0.53                   | $\%pds$          |

Or la masse volumique à entrer dans Theracast<sup>®</sup> (masse volumique servant au calcul de la mécanique du solide) ne peut pas prendre en compte une dépendance en concentration. Une concentration  $w^l$  arbitraire doit être choisie pour éliminer la dépendance en concentration dans la calcul de  $\rho^l$ . Cette concentration a été fixée à la concentration initiale de l'alliage. Grâce à Thermocalc<sup>®</sup>, le chemin de solidification en système fermé de l'alliage binaire  $Fe - 0.53\%pdsC$  en loi des leviers est déterminé et permet à Theracast<sup>®</sup> de calculer la masse volumique dans l'intervalle de solidification. En revanche, pour la simulation, le chemin de solidification ne sera évidemment pas connu à l'avance et sera calculé via le modèle de microségrégation. De plus pour la mécanique du liquide,  $\rho^l$  aura la même forme que celle de Niane.

Chaleur latente  $L = 274000 J.kg^{-1}$

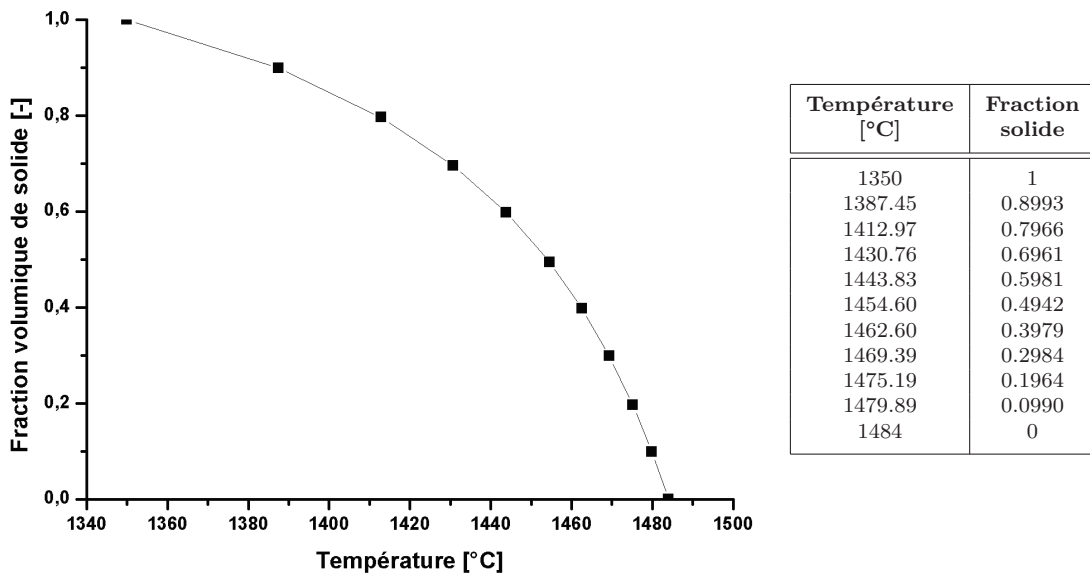


Fig. G.1: Chemin de solidification de référence pour la détermination de la masse volumique dans l'intervalle de solidification lors du calcul de la mécanique du solide

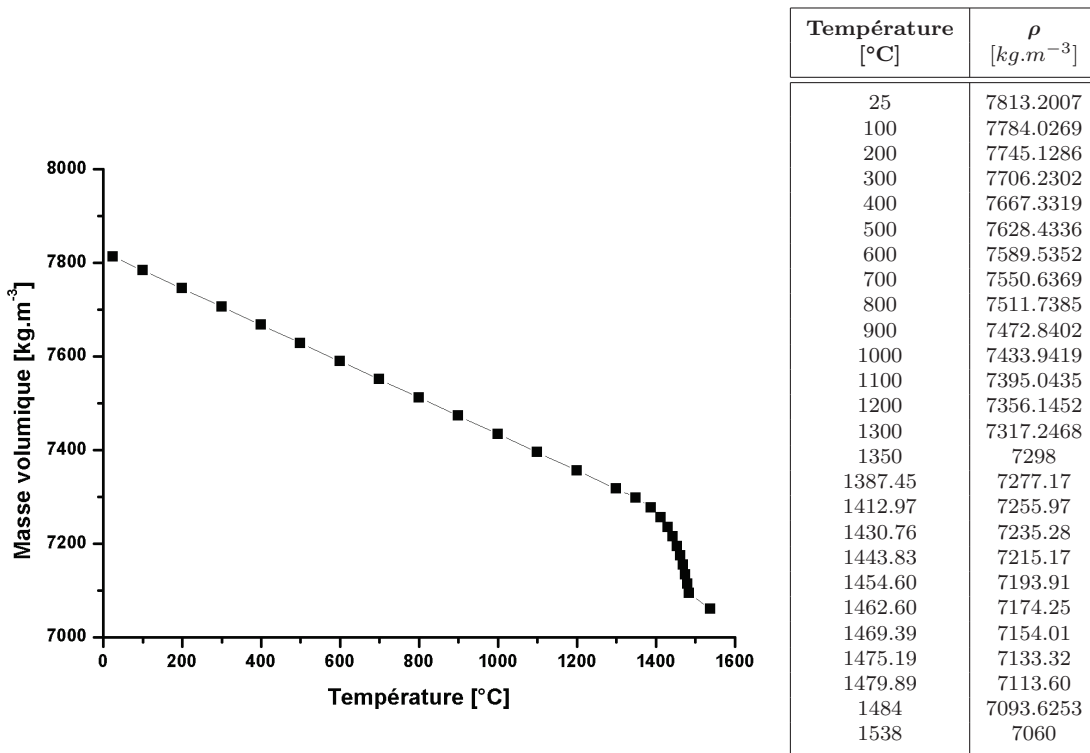


Fig. G.2: Evolution de la masse volumique de l'alliage binaire Fe – 0.53%*pdsC* en fonction de la température

## Données thermomécaniques

Les données thermomécaniques sont calculées à partir du modèle II de [Koz92] de la même manière que pour l'alliage b1 (Annexe E). La température de transition entre le comportement élasto-viscoplastique et viscoplastique est fixée à la température du liquidus  $T_C = T_{liq} = 1484^\circ\text{C}$ . Le coefficient de Poisson est pris égal à 0.3.

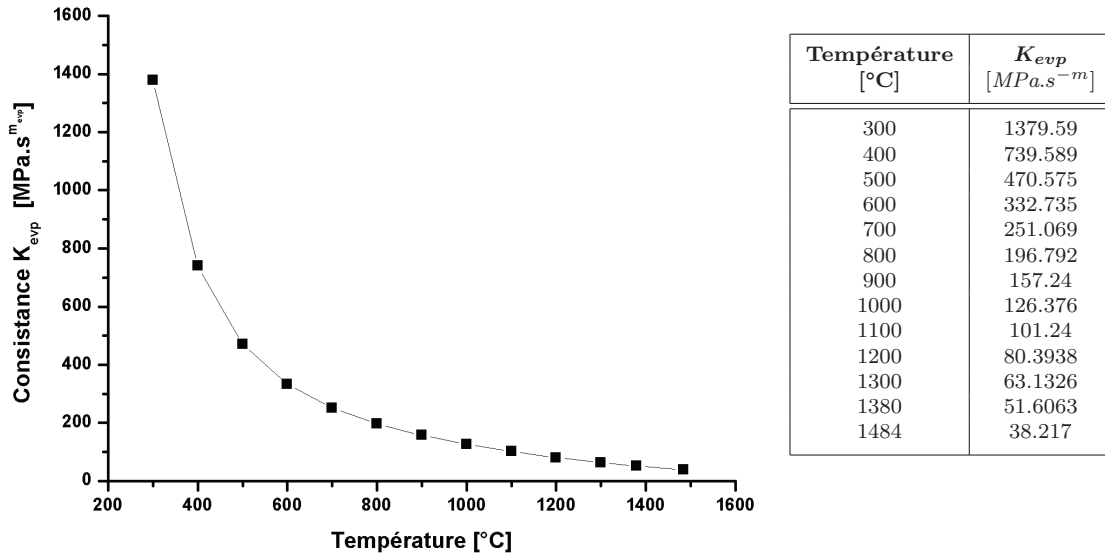


Fig. G.3: Evolution de la consistance  $K_{esp}$  à l'état solide de l'alliage binaire  $Fe - 0.53\%pdsc$  en fonction de la température (loi élasto-viscoplastique multiplicative)

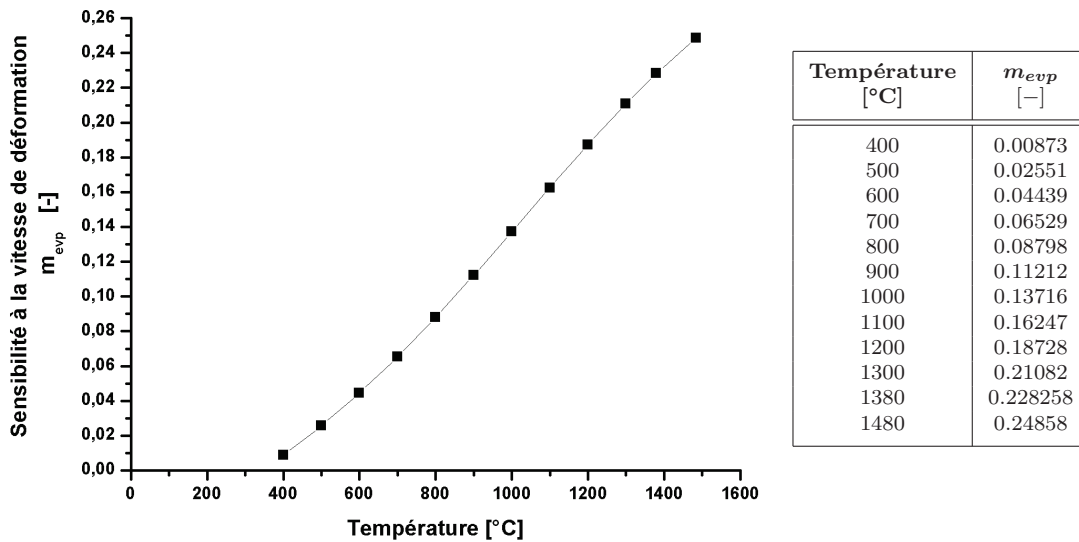


Fig. G.4: Evolution de sensibilité à la vitesse de déformation  $m_{esp}$  à l'état solide de l'alliage binaire  $Fe - 0.53\%pdsc$  en fonction de la température (loi élasto-viscoplastique multiplicative)

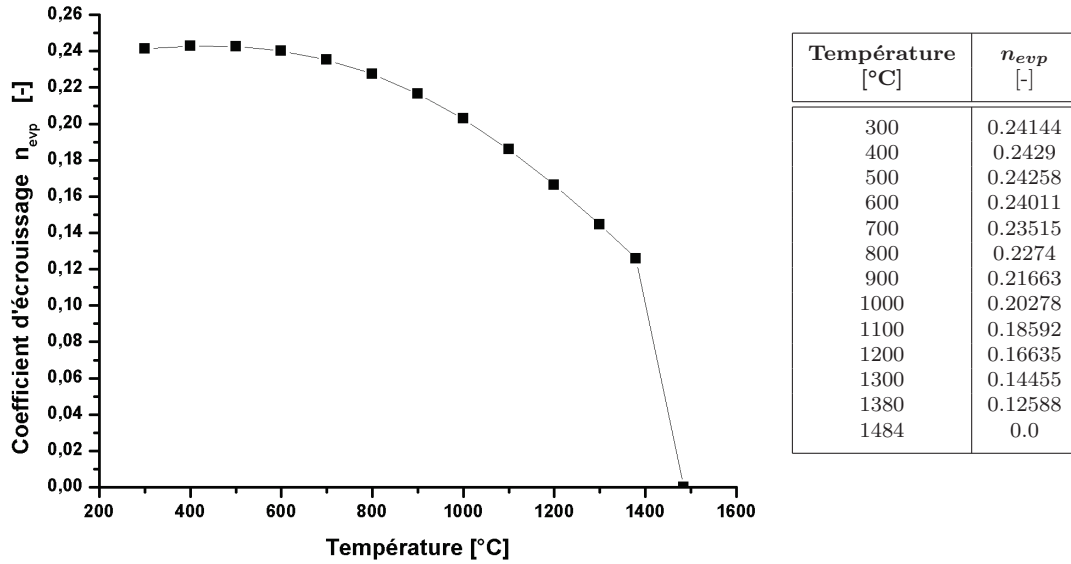


Fig. G.5: Evolution du coefficient d'érouissage en fonction de la température pour l'alliage binaire  $Fe - 0.53\%pdsC$  à l'état solide (loi élasto-viscoplastique multiplicative)

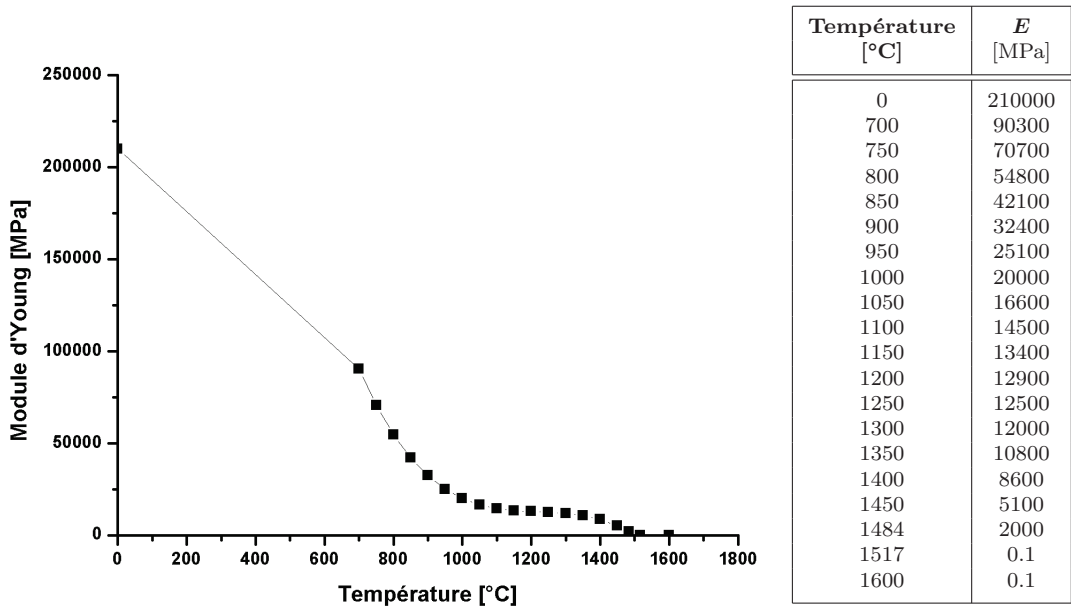


Fig. G.6: Evolution du module d'Young de l'alliage binaire  $Fe - 0.53\%pdsC$  en fonction de la température



# Bibliographie

- [Aga96] J.-F. Agassant, P. Avenas, J.-P. Sergent, B. Vergnes et M. Vincent, *La mise en forme des matières plastiques*, Lavoisier Tec & Doc, 1996.
- [Ahm98] N. Ahmad, H. Combeau, J.-L. Desbiolles, T. Jalanti, G. Lesoult, M. Rappaz et C. Stomp, “Numerical simulation of Macrosegregation : A comparison between Finite Volume Method and Finite Element Method Predictions and a Confrontation with experiments”, *Metallurgical and Materials transactions*, vol. 29A, 1998, pp. 617–630.
- [Ali00] C. Aliaga, *Simulation numérique par éléments finis en 3D du comportement thermomécanique au cours du traitement thermique d’aciers : application à la trempe de pièces forgées ou coulées*, Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, 2000.
- [Arn84] D. Arnold, F. Brezzi et M. Fortin, “A stable finite element for the Stokes equations”, *Calcolo*, 21, 1984, pp. 337–344.
- [Ast00] J. Astier, “Elaboration du métal primaire”, *Techniques de l’Ingénieur*, M7300, 2000.
- [Aun05] R. Aune, L. Battezzati, R. Brooks, I. Egry, H.-J. Fecht, J.-P. Gerandet, K. C. Mills, A. Passerone, P. N. Quested, E. Ricci, S. Schneider, S. Seetharaman, R. K. Wunderlich et B. Vinet, “Measurement of Thermophysical Properties of Liquid Metallic Alloys in a Ground - and -Microgravity Based Research Programme—the ThermoLab Project”, *Microgravity Science Technology*, XVI, no.1, 2005, pp. 7–10.
- [Bas06] O. Basset, *Simulation numérique d’écoulements multifluides sur grille de calcul*, Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, 2006.
- [Bec02] C. Beckermann, “Modelling of macrosegregation : application and future needs”, *International Materials Reviews*, vol. 47, no. 5, 2002, pp. 243–261.
- [Bel04] M. Bellet et V. Fachinotti, “ALE method for solidification modelling”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, no. 193, 2004, pp. 4355–4381.
- [Bel05a] M. Bellet, *Modélisation thermomécanique des procédés de déformation plastique et de solidification*, Mémoire d’habilitation à diriger des recherches, Université Nice-Sophia Antipolis, 2005.
- [Bel05b] M. Bellet, O. Jaouen et I. Poitroult, “An ALE-FEM approach to the thermo-mechanics of solidification processes with application to the prediction of pipe

- shrinkage”, *International Journal for Numerical Methods in Heat & Fluid Flow*, vol. 15, no. 2, 2005, pp. 120–142.
- [Bel09a] M. Bellet, “Numerical Modelling of Solidification Processes”, cours de maîtrise spécialisé, 2009.
- [Bel09b] M. Bellet, H. Combeau, Y. Fautrelle, D. Gobin, M. Rady, E. Arquis, O. Budenkova, B. Dussoubs, Y. Duterrail, A. Kumar, C.-A. Gandin, B. Goyeau, S. Mosbah et M. Založnik, “Call for contributions to a numerical benchmark problem for 2D columnar solidification of binary alloys”, *International Journal of Thermal Sciences*, 48, 2009, pp. 2013–2016.
- [Bel10] M. Bellet, H. Combeau, Y. Fautrelle, D. Gobin, M. Rady, E. Arquis, O. Budenkova, B. Dussoubs, Y. Duterrail, A. Kumar, C.-A. Gandin, B. Goyeau, S. Mosbah et M. Založnik, “Corrigendum to ‘Call for contributions to a numerical benchmark problem for 2D columnar solidification of binary alloys’ [Int.J.Thermal Sci. 48 (11) (2009) 2013-2016]”, *International Journal of Thermal Sciences*, 49, 2010, p. 1318.
- [Bir00] J.-P. Birat, “Coulée continue de bandes d’acier”, *Techniques de l’Ingénieur*, M7816, 2000.
- [Blo04] J. Blondeau, “Minerais et Fondants”, *Techniques de l’Ingénieur*, M7040, 2004.
- [Bog10] A. Bogno, H. Nguyen-Thi, N. Bergeon, N. Mangelinck-Noël, T. Schenk, B. Billa, E. Boller et J. Baruchel, “Application of synchrotron X-ray radiography to the study of dendritic equiaxed microstructure formation in Al-Cu alloys”, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, vol. B, no. 268, 2010, pp. 394–398.
- [Bro82] A. Brooks et T. Hughes, “Streamline Upwind Petrov/Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, vol. 32, 1982, pp. 199–259.
- [Cer07] O. Cerri, *Rupture à chaud dans les aciers au cours de leur solidification. Caractérisation expérimentale et modélisation thermomécanique.*, Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, 2007.
- [Cho04] J. Choné, “Coulée continue de l’acier, Aspects métallurgiques”, *Techniques de l’Ingénieur*, M7810, 2004.
- [Cos04] F. Costes, *Modélisation thermomécanique tridimensionnelle par éléments finis de la coulée continue d’aciers*, Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, 2004.
- [Cou06] T. Coupez, “Réinitialisation convective et locale des fonctions Level Set pour le mouvement de surfaces et d’interfaces”, *Journées Activités Universitaires de Mécanique*, La Rochelle, France, 2006.
- [Dan09] J. Dantzig et M. Rappaz, *Solidification*, engineering sciences ed., EPFL Press, 2009.
- [Dav83] G. D. V. Davis, “Natural convection of air in a square cavity : a bench mark numerical solution”, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 3, 1983, pp. 249–264.

- [Dig07] H. Dignonnet, L. Silva et T. Coupez, “CimLib : A fully Parallel Application For Numerical Simulations Based On Components Assembly”, *Materials Processing and Design : Modeling, Simulation and Applications, Numiform 2007*, vol. 908, 2007, pp. 269–274.
- [Don95] S. Dong, E. Niyama et K. Anzai, “Free deformation of Initial Solid Shell of Fe-C Alloys”, *ISIJ International*, vol. 35, no. 6, 1995, pp. 730–736.
- [Duf04] J. Dufloy, “La sidérurgie”, , 2004, <http://www.universalis-edu.com>.
- [Egr99] I. Egry, G. Lohöfer, I. Seyhan, S. Schneider et B. Feuerbacher, “Viscosity and Surface Tension Measurements in Microgravity”, *International Journal of Thermophysics*, vol. 20, no. 4, 1999, pp. 1005–1015.
- [Elb00] M. Elbealy, “Modeling of Interdendritic Strain and Macroseggregation for dendritic solidification processes : Part1. Theory and Experiments”, *Metallurgical and Materials transactions*, vol. 31B, 2000, pp. 331–343.
- [Ern02] A. Ern et J.-L. Guermond, *Elément finis : théorie, applications, mise en oeuvre*, Springer, 2002.
- [Ert05] E. Erturk, T. Corke et C. Gökçöl, “Numerical solutions of 2-D steady incompressible driven cavity flow at high Reynolds numbers”, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 48, 2005, pp. 747–774.
- [Fac06] V. Fachinotti, S. Le Corre, M. Bobadilla et M. Bellet, “Two-phase thermomechanical and macroseggregation modelling of binary alloys solidification with emphasis on the secondary cooling stage of steel slab continuous casting processes”, *International Journal for Numerical Methods In Engineering*, vol. 67, 2006, pp. 1341–1384.
- [Far89] J. Farhi, “Coulée continue de l’acier. Généralités. Données physiques et métallurgiques”, *Techniques de l’Ingénieur*, M7810 Archives, 1989.
- [Fle67] M. Flemings et G. Nero, “Macroseggregation : Part I”, *Transactions of the metallurgical society of AIME*, vol. 239, 1967, pp. 1449–1461.
- [FrM09] “France-Metallurgie”, , 2009, <http://aciens.free.fr/index.php/2009/03/30/le-plus-gros-lingot-dacier-au-monde-pese-600-tonnes/>.
- [Gan90] S. Ganesan et D. Poirier, “Conservation of Mass and Momentum for the Flow of interdendritic liquid during Solidification”, *Metallurgical and Materials transactions*, vol. 21B, 1990, pp. 173–181.
- [Gan09] C.-A. Gandin, M. Bellet, B. Rivaux, T. Volkman, N. Johannsen, R. Lengsdorf, D. M. Herlach, D. J. Jensen, G. Lesoult, M. Bobadilla et J. Gegner, *Chill Cooling for the ElectroMagnetic Levitator in relation with Continuous Casting of Steel*, Rapport final du projet ESA-MAP AO-2004-017, mars 2009.
- [Ghi82] U. Ghia, K. Ghia et C. Shin, “High-Re Solutions for Incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equations and a Multigrid Method”, *Journal of Computational Physics*, vol. 48, 1982, pp. 387–411.
- [Gou05] S. Gouttebroze, *Modélisation 3D par éléments finis de la macroségrégation lors de la solidification d’alliages binaires*, Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, 2005.



- [Gou07] S. Gouttebroze, M. Bellet et H. Combeau, “3D macrosegregation simulation with anisotropic remeshing”, *Comptes Rendus Mécanique, Melting and solidification : processes and models*, vol. 335, no. 5-6, 2007, pp. 269–279.
- [Gro07] B. Gros, “Recyclage des déchets ferreux”, *Techniques de l’Ingénieur*, M7059, 2007.
- [Gui04] G. Guillemot, *Formation des structures de grains dans les alliages à solidification dendritique - Modélisation couplée automates cellulaires et éléments finis*, Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Lorraine, 2004.
- [Hac09] E. Hachem, *Stabilized Finite Element Method for Heat transfert and turbulent flows inside industrial furnaces*, Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, 2009.
- [Hac10] E. Hachem, B. Rivaux, T. Kloczko, H. Dignonnet et T. Coupeuz, “Stable mixed-finite element method for incompressible flows with high Reynolds number”, *Journal of Computational Physics*, vol. 229, no. 23, 2010, pp. 8643–8665.
- [Ham08] M. Hamide, *Modélisation numérique du soudage à l’arc des aciers*, Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, 2008.
- [Har92] K. Harste, T. Suzuki et K. Schwerdtfeger, “Thermomechanical properties of steel : viscoplasticity of  $\gamma$  iron and  $\gamma$  Fe-C alloys”, *Materials Science and Technology*, vol. 8, 1992, pp. 23–33.
- [Heb74] D. J. Hebditch et J. D. Hunt, “Observation of Ingot Macroseggregation on Model Systems”, *Metallurgical Transactions*, vol. 5, no. 7, 1974, pp. 349–361.
- [Im2] “Insitut Matériaux Microélectronique Nanosciences de Provence”, <http://www.im2np.fr/recherche/mca/films.html>.
- [Jao98] O. Jaouen, *Modélisation tridimensionnelle par éléments finis pour l’analyse thermo-mécanique du refroidissement des pièces coulées*, Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, 1998.
- [Kaj01] T. Kajitani, J.-M. Drezet et M. Rappaz, “Numerical Simulation of Deformation-Induced Segregation in Continuous Casting of Steel”, *Metallurgical and Materials transactions*, vol. 32A, 2001, pp. 1479–1491.
- [Kim96] K. H. Kim, K. H. Oh et D. N. Lee, “Mechanical Behavior of Carbon Steels during Continuous Casting”, *Scripta Materiala*, vol. 34, no.2, 1996, pp. 301–307.
- [Kon06] E. N. Kondrashov, “Towards an analytical solution of the alloy solidification problem”, non publié, 2006, <http://arxiv.org/pdf/math-ph/0507046>.
- [Koz92] P. F. Kozłowski, B. G. Thomas, J. A. Azzi et H. Wang, “Simple Constitutive Equations for Steel at High Temperature”, *Metallurgical Transactions*, vol. 23A, 1992, pp. 903–918.
- [Kur90] W. Kurz et D. Fisher, *Fundamentals of Solidification*, Trans Tech Publications, 1990.
- [Les86] G. Lesoult, “Solidification. Cristallisation et microstructures”, *Techniques de l’Ingénieur*, M58, 1986.

- [Les89] G. Lesoult, “Solidification. Macrostructures et qualité des produits”, Techniques de l’Ingénieur, M59, 1989.
- [Les03] G. Lesoult, C.-A. Gandin et N. Niane, “Segregation during solidification with spongy deformation of the mushy zone”, *Acta Materialia*, 2003, pp. 5263–5283.
- [Les05] G. Lesoult, “Macroseggregation in steel strands and ingots : Characterisation, formation and consequences”, *Materials Science and Engineering*, vol. A, 2005, pp. 19–29.
- [Liu05] W. Liu, *Finite Element Modeling of macroseggregation and thermomechanical phenomena in solidification processes*, Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, 2005.
- [Mar09] P. Marlier, *Premières analyses microsonde sur gouttes*, Rapport technique ArcelorMittal, mai 2009.
- [Mes09] Y. Mesri, H. Digonnet et T. Coupez, “Advanced Parallel computing in material forming with CimLib”, *European Journal of Computational Mechanics*, vol. 18, 2009, pp. 669–694.
- [Mos08] S. Mosbah, *Multiple scales modeling of solidification grain structures and segregation in metallic alloys*, Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, 2008.
- [Ni91] J. Ni et C. Beckermann, “A Volume-Averaged Two-Phase Model for Transport Phenomena during Solidification”, *Metallurgical Transactions*, vol. 22B, 1991, pp. 349–361.
- [Nia04] T. N. Niane, *Etudes des macroségrégations induites par le retrait et la déformation thermomécanique lors de la solidification de la peau des produits sidérurgiques*, Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Lorraine, 2004.
- [Nia06] T. N. Niane, C.-A. Gandin et G. Lesoult, “Segregation with spongy deformation of the mushy zone during solidification of the skin of steel cast product”, *Materials Science Forum*, vol. 508, 2006, pp. 175–180.
- [Nic05] L. Nicolli, A. Mo et M. M’Hamdi, “Modeling of Macroseggregation Caused by Volumetric Deformation in a Coherent Mushy Zone”, *Metallurgical and Materials transactions*, vol. 36A, 2005, pp. 433–442.
- [Pac02] A. Paccini, *Modélisation du comportement thermomécanique de la peau solide formée en lingotière de coulée continue*, Mémoire de mastère spécialisé, 2002.
- [Pel05] C. Pelissou, *Discrétisation spatio-temporelle du problème thermique à deux champs. Application au procédé de forgeage à chaud*, Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, 2005.
- [Rap03] M. Rappaz, M. Bellet et M. Deville, *Numerical modeling in materials science and engineering*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2003.
- [Sau92] S. Sauerland, K. Eckler et I. Egry, “High-precision surface tension measurements on levitated aspherical liquid nickel droplets by digital image processing”, *Journal of Materials Science Letters*, vol. 11, 1992, pp. 330–333.
- [Tez92] T. Tezduyar, S. Mittal, S. Ray et R. Shih, “Incompressible flow computations with stabilized bilinear and linear equal-order-interpolation velocity-pressure elements”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, no. 95, 1992, pp. 221–242.

- [Tez00] T. Tezduyar et Y. Osawa, “Finite element stabilization parameters computed from element matrices and vectors”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, no. 190, 2000, pp. 411–430.
- [Vol89] V. Voller, A. Brent et C. Prakash, “The modelling of Heat, Mass and Solute Transport in Solidification Systems”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, vol. 32, 1989, pp. 1719–1773.
- [Vol09] T. Volkman, N. Johannsen et D. M. Herlach, *Chill Cooling for the ElectroMagnetic Levitator in relation with Continuous Casting of Steel*, Complément au rapport final du projet ESA-MAP AO-2004-017, décembre 2009.
- [Wan93] C. Wang et C. Beckermann, “A Multiphase Solute Diffusion Model for Dendritic Alloy Solidification”, *Metallurgical Transactions*, vol. 24A, 1993, pp. 2787–2802.
- [Wan96] C. Wang et C. Beckermann, “Equiaxed Dendritic Solidification with Convection : Part I. Multiscale/Multiphase Modeling”, *Metallurgical and Materials transactions*, vol. 27A, 1996, pp. 2754–2764.
- [Wan06] X. Wang, P. Petitpas, C. Garnier, J. Paulin et Y. Fautrelle, “Temperature field evolution in a horizontal solidification experiment and its influence on macro-structure”, *Modeling of Casting , Welding and Advanced Solidification Processes*, vol. XI, 2006, pp. 391–398.
- [Wan07] X. D. Wang, P. Petitpas, C. Garnier, J.-P. Paulin et Y. Fautrelle, “A quasi two-dimensinal benchmark experiment for the solidification of a tin-lead binary alloy”, *C.R. Mecanique* 335, 2007.
- [Wan09] X. D. Wang et Y. Fautrelle, “An investigation of the influence of natural convection on tin solidification using a quasi two-dimensional experimental benchmark”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 52, 2009, pp. 5624–5633.
- [Wik10] Wikipedia, “Fonderie d’Aluminium”, , 2010, [http://fr.wikipedia.org/wiki/Fonderie\\_d'aluminium](http://fr.wikipedia.org/wiki/Fonderie_d'aluminium).
- [WSA] WSA, “World Steel Association”, <http://www.worldsteel.org>.
- [Wun10] R. Wunderlich, *Results of the TEXUS-46 EML-III Experiment : Surface Tension and Viscosity of a FeC Alloy*, Rapport technique, 2010.
- [Zla71] M. Zlamal, “Finite element for non linear parabolic equation”, *Rairo Numerical Analysis*, vol. 11, 1971, pp. 93–107.



## Simulation 3D éléments finis des macroségrégations en peau induites par déformations thermomécaniques lors de la solidification d'alliages métalliques

**Résumé :** Les macroségrégations sont des hétérogénéités de répartition des espèces chimiques en peau ou à cœur des produits sidérurgiques. Ces macroségrégations peuvent engendrer de sérieux problèmes dans la chaîne de transformation aval. Contrairement à la plupart des études qui s'intéressent aux macroségrégations centrales, nos travaux portent sur la simulation des macroségrégations en peau induites par déformations thermomécaniques. La simulation a été construite en trois étapes. La première étape consiste à simuler la macroségrégation en l'absence de toute déformation du solide, c'est-à-dire à solide fixe et rigide. La deuxième étape, indépendante de la première, revient à calculer uniquement la déformation du solide. Enfin, la dernière étape correspond à la réunion des deux premières. Les équations du problème sont résolues grâce à la méthode des éléments finis à laquelle sont adjointes des méthodes de stabilisation. Pour chacune des étapes, les simulations se basent sur des expériences. Pour la première étape, la validation s'appuie sur l'expérience de Hebditch & Hunt. Les résultats numériques et expérimentaux concordent. L'expérience qui sert de point de comparaison pour la deuxième étape est l'expérience de la déformation d'une goutte de métal liquide lors de son refroidissement par une plaque en cuivre. Cette expérience a été mise en place par un des partenaires du projet et s'est déroulée en microgravité. La déformation numérique obtenue suit la même tendance que celle de l'expérience mais avec une intensité inférieure. La dernière étape s'est appuyée sur l'expérience de refroidissement pulsé d'un lingot effectuée par El-Bealy. La simulation prévoit des variations de ségrégation mais n'arrive pas à capter toutes les variations expérimentales, conséquences de la déformation du solide. Des calculs sans thermomécanique montrent que notre simulation semble moins sensible à la déformation que l'expérience. L'ensemble des simulations a mis en jeu des alliages binaires. Un cas de solidification d'alliage ternaire sans déformation du solide a été simulé.

**Mots clés :** macroségrégation, déformation thermomécanique, alliage binaire et ternaire, éléments finis et méthodes de stabilisation, microgravité

### 3D finite element simulation of skin macrosegregations induced by thermomechanical deformations during metallic alloys solidification

**Abstract:** Macroseggregations are chemical heterogeneities either in the skin or in the center of metallurgical products. These heterogeneities can generate serious troubles during downstream processing. Contrary to other studies which focus on central macrosegregation, our work aims to simulate the skin macrosegregation induced by thermomechanical deformations. Three steps are necessary to build the simulation. The first step consists on simulating macrosegregation at rigid and fixed solid, i.e. without solid deformation. The second step, independent of the first one, aims to simulate the deformation of the solid without macrosegregation. The last step is a combination of the two previous one. All equations are solved by stabilized finite element methods. Each step refers to experiments in order to compare numerical and experimental results. The first step reproduces numerically the macrosegregation observed during Hebditch & Hunt experience. The numerical results are in good agreement with the experimental ones. The second step aims to simulate the deformation of a metallic liquid droplet during its solidification in contact with a copper chill, in microgravity. The numerical deformation obtained presents the same trend as the experimental one but in a lower magnitude. The last step is based on El-Bealy experience consisting of a pulsed water cooling of an ingot. The results show concentration variations but the simulation doesn't catch all experimental ones. Computations without macrosegregation point out that our simulations are less sensitive of deformation than the experience. All simulations were run with binary alloys. Computations have also been run to simulate ternary alloy solidification but without solid deformation.

**Keywords:** macrosegregation, thermomechanical deformation, binary and ternary alloy, stabilized finite elements method, microgravity

