



**HAL**  
open science

# Modélisation numérique multi-échelle des structures de solidification, de la macroségrégation et de la Transition Colonnaire-Equiaxe

Hanadi Ettroudi

► **To cite this version:**

Hanadi Ettroudi. Modélisation numérique multi-échelle des structures de solidification, de la macroségrégation et de la Transition Colonnaire-Equiaxe. Mécanique des matériaux [physics.class-ph]. Université Paris sciences et lettres, 2021. Français. NNT : 2021UPSLM021 . tel-03435152

**HAL Id: tel-03435152**

**<https://pastel.hal.science/tel-03435152>**

Submitted on 18 Nov 2021

**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.



**THÈSE DE DOCTORAT**  
**DE L'UNIVERSITÉ PSL**

Préparée à MINES ParisTech

**Modélisation numérique multi-échelle des structures de solidification, de la macroségrégation et de la Transition Colonnaire-Equiaxe**

Soutenue par

**Hanadi ETTROUDI**

Le 1 Juillet 2021

École doctorale n°364

**Sciences Fondamentales  
et Appliquées**

Spécialité

**Mécanique numérique et  
Matériaux**

Composition du jury :

Denis NAJJAR

Professeur des Universités, Centrale Lille - LaM-cube

*Rapporteur*

Kader ZAIDAT

Maître de conférences, Institut Polytechnique de Grenoble-PHELMA - SIMAP

*Rapporteur*

Lounès TADRIST

Professeur des universités, Aix-Marseille Université - Institut Universitaire des Systèmes Thermiques Industriels

*Président*

Marie BEDEL

Maître de conférences, Arts et Métiers ParisTech - Laboratoire MSMP

*Examineur*

Miha ZALOŽNIK

Chargé de recherche CNRS, Université de Lorraine - Institut Jean Lamour

*Examineur*

Gildas GUILLEMOT

Maître assistant, MINES ParisTech - CEMEF

*Examineur*

Charles-André GANDIN

Directeur de recherche CNRS, MINES ParisTech - CEMEF

*Directeur de thèse*

Hervé COMBEAU

Professeur des Universités, Université de Lorraine - Institut Jean Lamour

*Co-directeur de thèse*



# Table des matières

<b>Introduction générale</b>	<b>13</b>
<b>1 Revue bibliographique</b>	<b>17</b>
1 Mécanismes physiques	17
1.1 Origine des ségrégations chimiques	18
1.2 Structures de solidification : morphologie, origine et croissance	21
1.3 Mécanismes de la transition colonnaire-équiaxe (TCE)	24
2 Modèles numériques	28
2.1 Technique de la prise de moyenne volumique	29
2.2 Modélisation des structures équiaxes	31
2.3 Modélisation des structures colonnaires	36
2.4 Modélisation de la croissance mixte colonnaire-équiaxe et de la TCE	40
<b>2 Modèle colonnaire-équiaxe</b>	<b>46</b>
1 Présentation du modèle	46
1.1 Représentation des structures colonnaire et équiaxe	46
1.2 Suivi du front colonnaire	49
1.3 Equations de conservation moyennées	53
2 Algorithme et implémentation	67
2.1 L'algorithme générale	67
2.2 Le transport	72
2.3 Germination et croissance	74
3 Conclusion	83

<b>3 Applications expérimentales et validation</b>	<b>85</b>
1 Croissance colonnaire et suivi du front :	85
1.1 Description du cas test	85
1.2 Résultats	86
2 Transition colonnaire-équiaxe à solide fixe :	89
2.1 Description du cas test	89
2.2 Résultats	90
2.3 Etude paramétrique	94
3 Transition colonnaire-équiaxe avec convection du liquide et trans-	
port des grains équiaxes :	95
3.1 Présentation de l'expérience	95
3.2 Simulation 2D	97
3.3 Simulation 3 D	101
<b>4 Applications Industrielles</b>	<b>108</b>
1 Lingot 3.3 t	108
1.1 Présentation du lingot et des résultats expérimentaux	108
1.2 Résultats avec germination hétérogène	111
1.3 Résultats avec fragmentation	116
2 Lingot 4.2 t	120
2.1 Présentation du cas de simulation	120
2.2 Résultats avec germination hétérogène	124
2.3 Résultats avec fragmentation	126
<b>Conclusion et perspectives</b>	<b>133</b>
1 Conclusion	133
2 Perspectives	136
<b>ANNEXES</b>	<b>140</b>
<b>A De l'équation locale à la forme moyennée</b>	<b>140</b>

1	Définitions et relations associées	141
2	Forme moyennée des équations de conservation	142
3	Hypothèses et définitions	143
4	Bilan général final	145
<b>B</b>	<b>Les équations splittées</b>	<b>147</b>
1	Echelle macroscopique : équations de transport	147
1.1	Bilans de masse totale	147
1.2	Bilans de masse de soluté	148
2	Echelle microscopique : croissance et germination	148
2.1	Bilans de masse totale	148
2.2	Bilans de masse de soluté	149
<b>C</b>	<b>Données thermodynamiques</b>	<b>153</b>
	<b>Références</b>	<b>158</b>



# Nomenclature

## Notations grecques

$\beta_T$	Coefficient d'expansion volumique thermique	$K^{-1}$
$\beta_w$	Coefficient d'expansion volumique solutale	$(\%pds)^{-1}$
$\Delta T$	Surfusion	K
$\delta t$	Micro pas de temps	s
$\Delta t$	Macro pas de temps	s
$\Delta T_0$	Intervalle de solidification	K
$\Delta T_N$	Surfusion de germination des grains équiaxes	K
$\Delta T_w$	Surfusion solutale	K
$\Delta T_{col}$	Surfusion du front colonnaire	K
$\Delta T_R$	Surfusion de courbure	K
$\Delta T_{th}$	Surfusion thermique	K
$\delta^{\alpha(\alpha/\beta)}$	Longueur caractéristique de diffusion solutale dans la phase $\alpha$ à l'interface $\alpha/\beta$	m
$\Gamma$	Coefficient de Gibbs-Thomson	m.K
$\Gamma^{\alpha/\beta}$	Taux de production de la phase $\alpha$ par croissance dans la phase $\beta$	$kg.m^{-3}.s^{-1}$
$\kappa$	Conductivité thermique	$W.m^{-1}.K^{-1}$
$\lambda_1$	Distance interdendritique primaire	m
$\lambda_2$	Distance interdendritique secondaire	m

$\Omega_w$	Sursaturation solutale	-
$\Omega_{th}$	Sursaturation thermique	-
$\Phi^\alpha$	Taux de production de la phase $\alpha$ par germination	$\text{kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$
$\psi$	Fonction distance	m
$\rho^{\alpha(\alpha/\beta)}$	Masse volumique de la phase $\alpha$ au niveau de l'interface $\alpha/\beta$	$\text{kg.m}^{-3}$
$\rho^\alpha$	Masse volumique de la phase $\alpha$	$\text{kg.m}^{-3}$
$\xi^\alpha$	Fonction de phase	-
<b>Notations latines</b>		
$\langle w^\alpha \rangle^\alpha$	Composition moyenne intrinsèque de la phase $\alpha$	% pds
<b>b</b>	Vecteur de force volumique	$\text{N.m}^{-3}$
$\mathbf{j}^\alpha$	Flux d'espèce dans la phase $\alpha$	$\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$
$\mathbf{j}_n^{\alpha(\alpha/\beta)}$	Flux d'espèce dans la phase $\alpha$ projeté suivant la normale $\mathbf{n}^{\alpha/\beta}$	$\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$
$\mathbf{M}^{\Gamma,\alpha}$	Transfert de quantité de mouvement interfacial du au changement de phase	$\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-2}$
$\mathbf{M}^{\phi,\alpha}$	Transfert de quantité de mouvement interfacial du à la germination	$\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-2}$
$\mathbf{M}^{d,\alpha}$	Transfert de quantité de mouvement interfacial du aux contraintes interfaciales	$\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-2}$
$\mathbf{n}^{\alpha/\beta}$	Vecteur normal à la surface ( $\alpha/\beta$ ) dirigé vers $\beta$	
$\mathbf{v}^{\alpha/\beta}$	Vitesse de l'interface ( $\alpha/\beta$ )	$\text{m.s}^{-1}$
$\mathbf{v}^\alpha$	Vitesse de la phase $\alpha$	$\text{m.s}^{-1}$
$\mathbf{v}_{front}$	Vitesse du front colonnaire	$\text{m.s}^{-1}$
$A^{\alpha/\beta}$	Surface spécifique de l'interface $\alpha/\beta$	$\text{m}^{-1}$
$D^\alpha$	Coefficient de diffusion chimique dans la phase $\alpha$	$\text{m}^2.\text{s}^{-1}$

$d_g$	Diamètre du grain	m
$D_M$	Coefficient de diffusion artificiel	$m^2.s^{-1}$
$g^\alpha$	Fraction volumique de la phase $\alpha$	-
$g_c^{env(2)}$	Fraction critique d'empilement des grains équiaxes	-
$g_{Hunt}$	Fraction limite de grains équiaxes pour blocage par le mécanisme de Hunt	-
$G_t$	Gradient thermique	$K.m^{-1}$
$G_w$	Gradient solutal	% pds. $m^{-1}$
$h$	Enthalpie massique	$J.kg^{-1}$
$J^{\Gamma,\alpha}$	Transfert d'espèce interfacial du au changement de phase	$kg.m^{-3}.s^{-1}$
$J^{\phi,\alpha}$	Transfert d'espèce interfacial du à la germination	$kg.m^{-3}.s^{-1}$
$J^{j,\alpha}$	Transfert d'espèce interfacial du à la diffusion	$kg.m^{-3}.s^{-1}$
$J_n^{\alpha(\alpha/\beta)}$	Projection du flux de diffusion dans la phase $\alpha$ à l'interface $\alpha/\beta$ sur la normale à cette interface dirigée vers $\beta$	$kg.m^{-3}.s^{-1}$
$k$	Coefficient de partage	-
$L_f$	Chaleur latente de fusion massique	$J.kg^{-1}$
$m_l$	Pente du liquidus	$K.\%pds$
$N^\alpha$	Densité de la structure $\alpha$	$m^{-3}$
$N_0^\alpha$	Densité nominale de la germination de la structure $\alpha$	$m^{-3}$
$p$	Pression	Pa
$Pe_w$	Nombre de Péclet solutal	-
$Pe_{th}$	Nombre de Péclet thermique	-
$Q^{\Gamma,\alpha}$	Transfert de chaleur interfacial du au changement de phase	$J.m^{-3}.s^{-1}$
$Q^{\phi,\alpha}$	Transfert de chaleur interfacial du à la germination	$J.m^{-3}.s^{-1}$
$Q^{q,\alpha}$	Transfert de chaleur interfacial du à la diffusion	$J.m^{-3}.s^{-1}$

$R^{env(k)}$	Rayon de l'enveloppe relatif à la structure (k)	m
$R_g$	Rayon du grain	m
$R_{pointe}$	Rayon du pointe de dendrite	m
$S_v^{\alpha/\beta}$	Surface spécifique de l'interface $\alpha/\beta$	$m^{-1}$
$T$	Température	K
$t$	Temps	s
$T_0$	Température initiale	K
$t_m$	Temps micro	s
$T_{col}$	Température au front colonnaire	K
$T_{eut}$	Température de l'eutectique	K
$T_f$	Température de fusion du corps pur	K
$T_{liq}$	Température de liquidus	K
$T_N$	Température de germination de la structure équiaxe	K
$T_{sol}$	Température de solidus	K
$V_e$	Volume du VER	$m^3$
$V_e^\alpha$	Volume de la phase $\alpha$ dans le VER	$m^3$
$v_n^{\alpha/\beta}$	Projection de la vitesse de l'interface $\alpha/\beta$ sur la normale à cette interface dirigée vers $\beta$	$m.s^{-1}$
$v_{pointe}$	Vitesse des pointes de dendrites	$m.s^{-1}$
$w^{\alpha(\alpha/\beta)}$	Concentration à l'interface ( $\alpha/\beta$ ) du côté de la phase $\alpha$	% pds
$w^\alpha$	Composition massique dans la phase $\alpha$	% pds
$w^{l^\infty}$	Composition du liquide vue par les pointes de dendrite	% pds
$w_0$	Composition nominale	% pds
$X^\alpha$	Quantité microscopique volumique associé à la phase $\alpha$	-

$v_n^{\alpha(\alpha/\beta)}$  Vitesse de la phase  $\alpha$  projetée suivant la normale  $\mathbf{n}^{\alpha/\beta}$  m.s<sup>-1</sup>

### Fonctions

$\langle X^\alpha \rangle$  Moyenne volumique de la quantité  $X^\alpha$

$\langle X^\alpha \rangle^\alpha$  Moyenne volumique sur la phase  $\alpha$  de la quantité  $X^\alpha$

$\Delta$  Opérateur Laplacien -

Iv Fonction Ivantsov

$\nabla \cdot$  Opérateur divergence -

$\nabla$  Opérateur gradient -

### Indices

1 Liquide intragranulaire

2 Liquide extragranulaire

$N$  Après l'étape de germination

$tr$  Après l'étape de transport

### Exposants

(1) relatif à la structure colonnaire

(2) relatif à la structure équiaxe

( $k$ ) relatif à la structure ( $k$ ) qui peut valoir (1) si colonnaire ou (2) si équiaxe

$env^{(1)}$  Enveloppe de la structure colonnaire

(solide colonnaire + liquide intragranulaire colonnaire)

$env^{(2)}$  Enveloppe de la structure équiaxe

(solide équiaxe + liquide intragranulaire équiaxe)

$l_2^{(1)}$  Liquide colonnaire extragranulaire

$l_1^{(1)}$  Liquide colonnaire intragranulaire

$l^{(1)}$  Liquide colonnaire total (intragranulaire + extragranulaire)

- $l^{(2)}$  Liquide équiaxe total (intragranulaire + extragranulaire)
- $l_2^{(2)}$  Liquide équiaxe extragranulaire
- $l_1^{(2)}$  Liquide équiaxe intragranulaire
- $\nu$  Itération
- $s^{(1)}$  Solide colonnaire
- $s^{(2)}$  Solide équiaxe
- $env$  Enveloppe total (solide + liquide intragranulaire)
- $l$  Liquide total (colonnaire + équiaxe)
- $s$  Solide total (colonnaire + équiaxe)



# Introduction générale

La fabrication de pièces présentant une très grande homogénéité de propriétés mécaniques est l'un des grands défis actuels pour le marché du transport et de l'énergie. Citons l'exemple des cuves de grands composants nucléaires où les macro/mésoségrégations des espèces chimiques ont une influence importante sur leur résistance à la rupture. Pour ce type d'applications, une grande homogénéité en composition chimique moyenne est exigée ( pour la nuance 16MND5 de teneur nominale de 0.16 %pds, une teneur maximale en carbone en tout point inférieure à 0.23% pds [1]). De même dans le domaine automobile, pour les moules pour injection plastique (tableaux de bords, pare-chocs...), des propriétés homogènes dans toute l'épaisseur ( $\approx 1m$ ) sont nécessaires ainsi qu'une structure à grains fins, améliorant l'usinabilité. Un autre exemple est l'éolien offshore. En effet, certaines pièces de grandes dimensions utilisées dans des éléments critiques ou pièces de structures des éoliennes : roulements et couronnes, couronnes d'angle de pales, pignons, arbres, brides ... ont un cahier des charges sévère. Des traitements thermiques particuliers ne peuvent être appliqués que sur une surface de composition homogène. Toutes ces applications (figure 1), et bien d'autres, demandent ainsi une homogénéité des propriétés. Une étape clé, pour l'assurer en sidérurgie, réside dans la maîtrise du procédé de solidification des lingots. Malgré les progrès réalisés dans les procédés d'élaboration des alliages métalliques, des ségrégations chimiques dans les lingots sont encore observées actuellement. D'où l'importance de modéliser les différents phénomènes physiques et chimiques à leur origine et de proposer des outils numériques permettant de simuler les évolutions métallurgiques sur une échelle industrielle pour aider les industriels à améliorer leurs procédés de fabrication.



FIGURE 1: Illustrations des domaines d'application (nucléaire, automobile, éolien) du projet SOFT-DEFIS [1].

Le but de ce travail est ainsi de développer un modèle éléments finis permettant d'étudier la mise en place des deux grands types de structures présentes lors de la solidification : les structures colonnaires et les structures équiaxes, ainsi que la zone de transition (Transition Colonnaire Equiaxe, TCE) et les ségrégations chimiques associées. Ce projet s'inscrit dans le cadre d'un projet FUI : SOFT-DEFIS (SOFTware for the DEvelopment of Fine Ingot) qui rassemble plusieurs partenaires académiques et industriels. Il vise à l'amélioration de la qualité des produits finaux dans le cadre d'une grande concurrence mondiale, via les contributions des différents partenaires qui sont détaillées sur la figure 2. Les activités de recherche réalisées sur la modélisation du développement des structures de grains lors de la solidification de lingot, devront également être valorisées, afin de permettre aux industriels d'accéder aux outils et méthodes de simulation proposées. Ainsi, les solveurs présentés dans ce document doivent, à terme, être intégrés au logiciel THERCAST de TRANSVALOR, dans le cadre d'une tâche distincte de ce même projet.

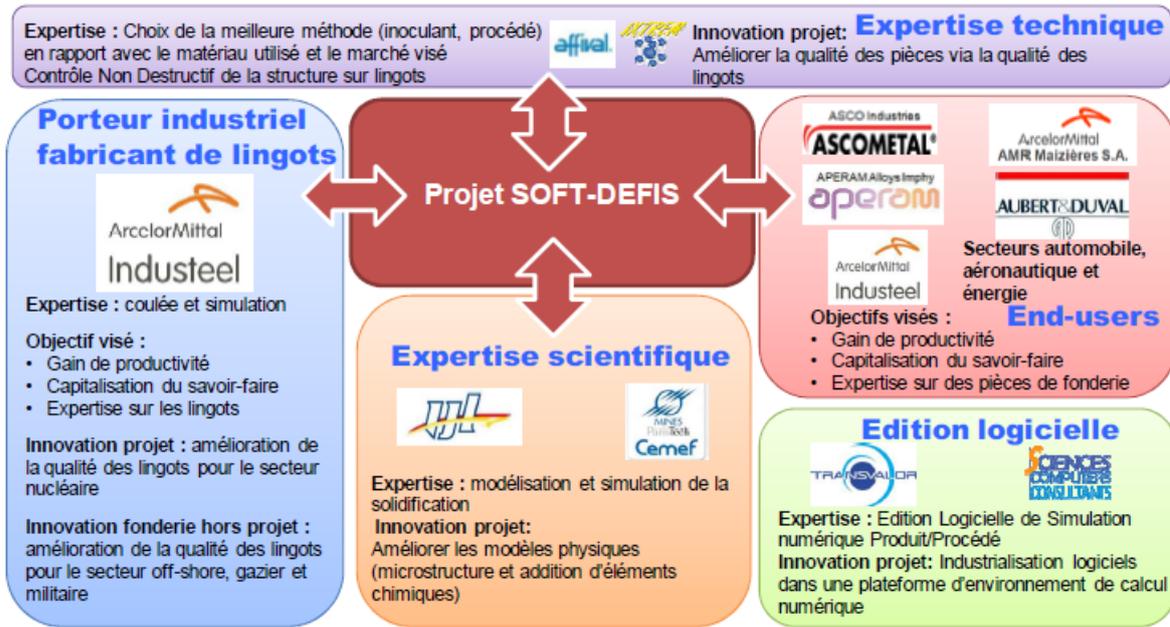


FIGURE 2: Vision synoptique du projet : rôle et interactions des partenaires [1].

Dans le premier chapitre de ce manuscrit, nous commencerons par présenter les différents mécanismes et phénomènes physiques intervenant dans la solidification des lingots ainsi que les modèles à l'échelle microscopique développés pour les décrire. Ensuite, nous présenterons les modèles numériques développés à une échelle macroscopique pour des applications industrielles. Dans le deuxième chapitre, nous présenterons le modèle développé en entrant dans les détails des hypothèses considérées et des équations résolues. Ensuite, nous présenterons l'algorithme général et les détails de l'implémentation de ce modèle. Le troisième chapitre contiendra des exemples de simulations pour validation du modèle et des applications expérimentales pour tester les différentes briques du modèle. Le dernier chapitre sera consacré à des applications à échelle industrielle. Enfin, les conclusions et perspectives de cette activité de recherche seront données.



# Chapitre 1

## Revue bibliographique

### 1 Mécanismes physiques

Dans un lingot, la composition en éléments chimiques n'est pas uniforme et, ce, à différentes échelles. Ceci peut affecter les propriétés mécaniques du produit final fabriqué à partir de ce lingot. On distingue différents types de ségrégations chimiques selon leur échelle d'observation. A l'échelle microscopique, il existe une différence de composition entre le solide formé et le liquide résiduel correspondant à la microségrégation. Suite à des mouvements de sédimentation et de convection, des ségrégations à l'échelle du produit se développent également, qualifiées de macroségrégation. Une relation étroite entre les structures de solidification et ces ségrégations chimiques a été constatée (figure 1.1.a). De plus, une transition entre les différents types de structures de solidification est habituellement observée. L'objectif principal de ce travail de doctorat est de pouvoir simuler le processus de solidification en lingotière en déterminant la position de cette transition entre structures.

Dans ce chapitre, une présentation des différents types de ségrégations ainsi qu'une explication de leurs origines va être donnée. Ensuite, les structures de solidification, leurs morphologies ainsi que leurs origines vont être présentées. De plus, la définition de la Transition Colonnaire-Equiaxe (TCE) ainsi que les phénomènes physiques proposés pour expliquer l'origine de cette transition, vont être donnés. Enfin, les modèles numériques qui ont été développés pour simuler ces phénomènes seront présentés.

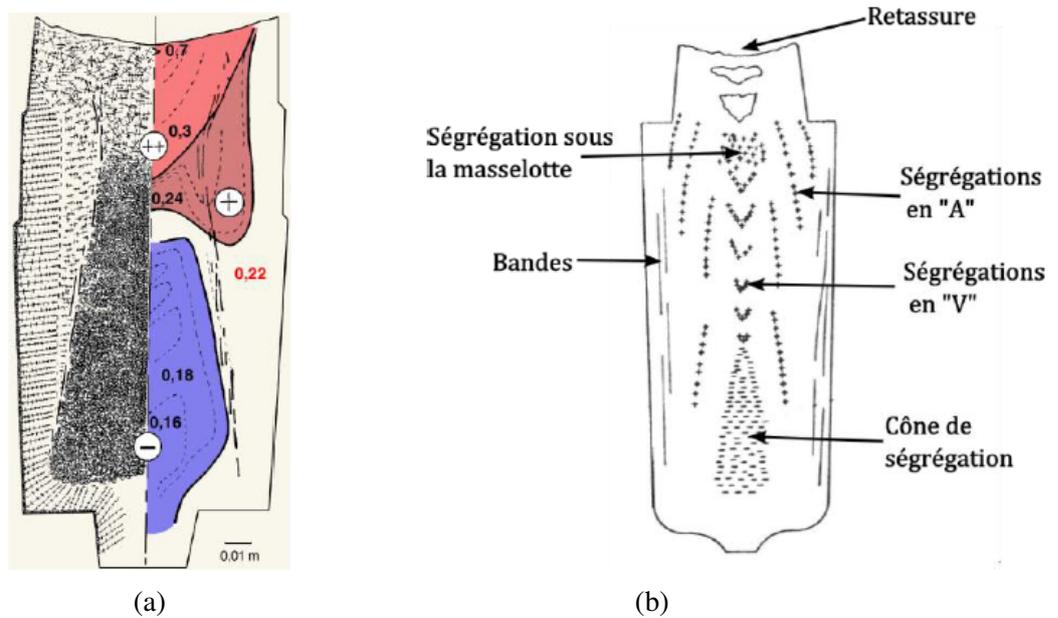


FIGURE 1.1: a) Carte de structures dans un lingot de 65 t ( gauche) et carte de concentration moyenne en carbone mesurée pour un alliage de composition nominale en carbone égale à 0.22%*pds* C ( droite) [2] et b) Carte des macro- et mésoségrégations typiques rencontrées dans un lingot industriel. Les symboles + désignent une ségrégation positive et – une ségrégation négative [3].

## 1.1 Origine des ségrégations chimiques

**La microségrégation** se développe à l'échelle de l'interface solide-liquide. En effet, en solidifiant, l'alliage rejette/incorpore du soluté dans/depus le bain liquide. Cela induit un saut de concentration entre le solide et le liquide. Ainsi, le liquide à l'interface se trouve à une concentration d'équilibre thermodynamique déterminée par le diagramme de phase égale à  $w^{l(s/l)}$ , alors que le solide se trouve à une autre concentration,  $w^{s(s/l)}$ . Le rapport entre ces deux quantités est noté  $k$  et appelé le coefficient de partage, propre à chaque température et condition d'analyse.

$$k = \frac{w^{s(s/l)}}{w^{l(s/l)}} \quad (1.1)$$

Une approximation linéaire au niveau du diagramme de phase est montrée sur la figure 1.2. L'intervalle de solidification à l'équilibre thermodynamique  $\Delta T_0$ , en faisant l'approximation de  $k$  et  $m_l$  constants, est donné par la relation

suivante :

$$\Delta T_0 = T_{liq} - T_{sol} = -m_l w_0 \left( \frac{1}{k} - 1 \right) \quad (1.2)$$

avec  $T_{liq}$  et  $T_{sol}$  désignant respectivement les températures de liquidus et solidus,  $w_0$ , la composition nominale de l'alliage,  $m_l$  la pente du liquidus et  $\Delta w_0 = \frac{w_0}{k} - w_0$  l'intervalle de composition. On peut déterminer également la température du liquidus nominale de l'alliage par une relation linéaire simple :

$$T_{liq} = T_f + m_l w_0 \quad (1.3)$$

où  $T_f$  est la température de fusion du corps pur.

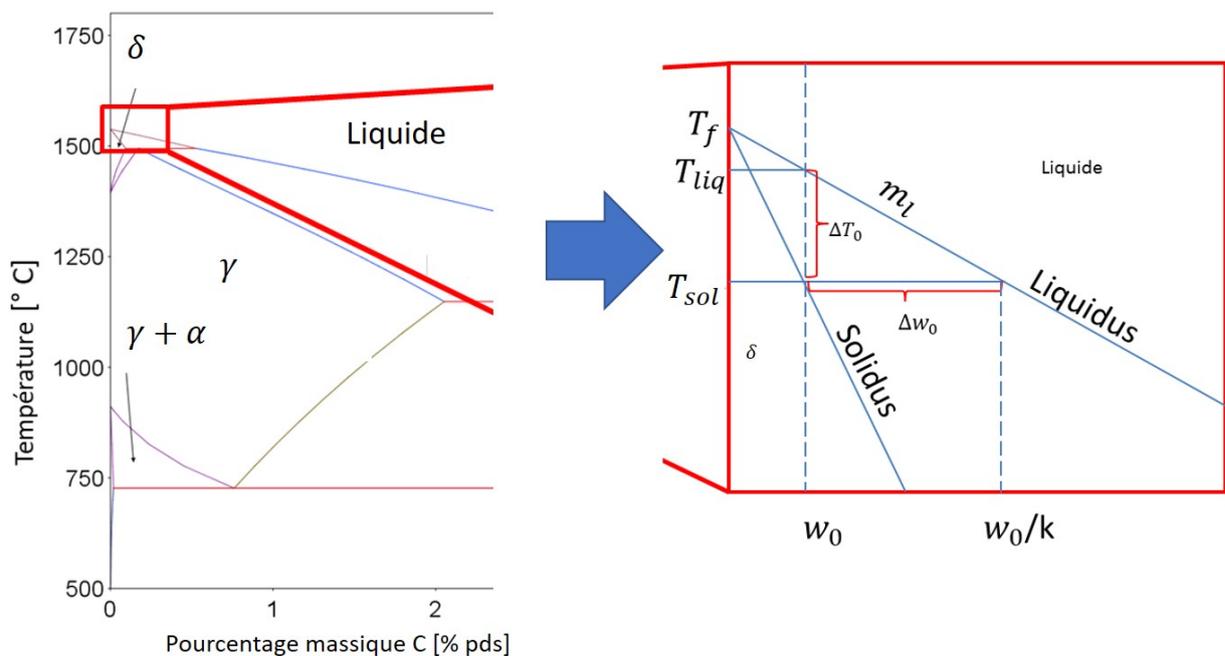


FIGURE 1.2: Diagramme de phase binaire Fe-C dans le domaine de concentration [2] % pds C et un agrandissement et linéarisation d'une partie du diagramme.

Deux approximations courantes décrivant la microségrégation existent : le modèle des bras de levier et le modèle de Gulliver-Scheil.

Dans le **modèle des bras de levier**, la diffusion est considérée comme infinie dans les deux phases solide et liquide. Par la suite, les concentrations d'équilibre sont données par le diagramme de phase à l'interface solide-liquide et sont homogènes dans leurs phases respectives. Le solide se forme avec une concen-

tration faible mais avec l'enrichissement du liquide, la concentration finale du solide se trouve uniforme et égale à la composition nominale  $w_0$ . La conservation du soluté dans le système conduit à la relation suivante, pour l'expression de la concentration moyenne  $\langle w^l \rangle^l$  de la phase liquide :

$$\langle w^l \rangle^l = w^{l(s/l)} = \frac{w_0}{1 - (1 - k)g^s} \quad (1.4)$$

avec  $g^s$  la fraction du solide. Dans le **modèle de Gulliver-Scheil**, la diffusion dans le liquide reste infinie et par la suite, la concentration homogène. Par contre, la diffusion dans le solide est considérée comme nulle. Ainsi, dans ce modèle, un profil de microségrégation dans le solide final (figure 1.3) est retrouvé : à l'interface solide-liquide, on retrouve la composition d'équilibre du solide  $w^{s(s/l)}$ . La composition du solide diminue en s'éloignant de l'interface suivant un profil caractéristique. Dans ce cas, on a, dans le cadre d'un diagramme linéarisé :

$$\langle w^l \rangle^l = w^{l(s/l)} = w_0(1 - g^s)^{(k-1)} \quad (1.5)$$

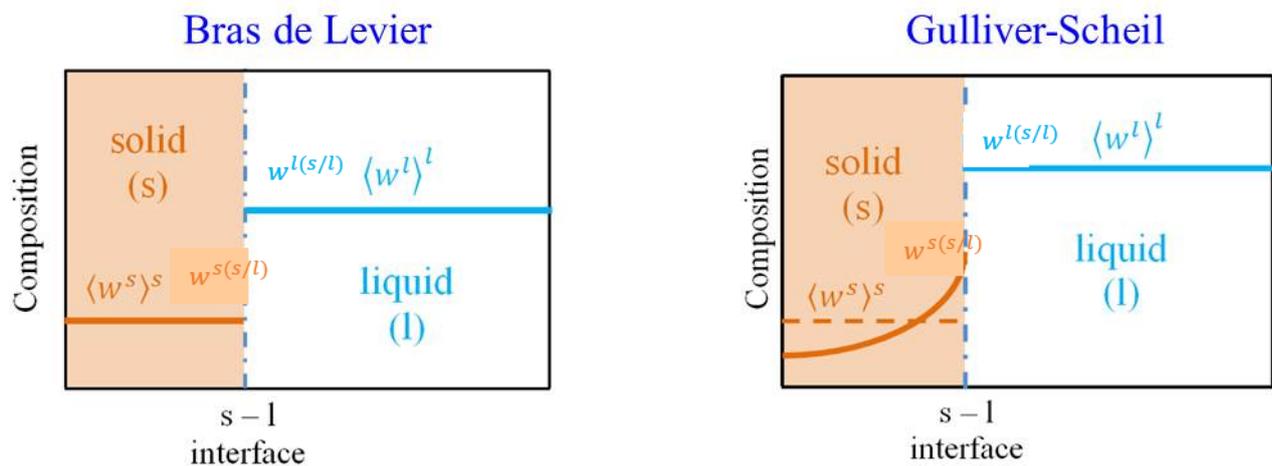


FIGURE 1.3: Profil de concentration dans le liquide et le solide lors de la solidification suivant les deux modèles : Bras de levier et Gulliver-Scheil [4].

A des échelles spatiales supérieures, d'autres processus de ségrégations sont observés. D'une part on retrouve **les macroségrégations**. En effet, un cône de ségrégation négative est habituellement observé au niveau de la partie inférieure

du lingot alors qu'une concentration supérieure à la concentration nominale est constatée au niveau de la partie supérieure du lingot (figure 1.1.a). Une correspondance entre la morphologie des grains et la ségrégation négative est remarquée. Il est admis que cette ségrégation négative est due à la sédimentation des cristaux solides pauvres en soluté [5]. Le liquide riche en soluté, moins dense et plus chaud est déplacé vers le haut aggravant la sédimentation négative en bas du lingot et causant la ségrégation positive en partie supérieure. L'origine de ce processus de ségrégation est la convection thermo-solutale ainsi que le déplacement des grains.

D'autre part, **les mésoségrégations** se trouvent à une échelle intermédiaire entre l'échelle microscopique et l'échelle macroscopique. Plusieurs types de mésoségrégations de différentes morphologies sont présentes. Comme montré sur la figure 1.1.b, on retrouve une morphologie en A, appelée aussi veines sombres, constituée des canaux ségrégés dont la composition rejoint celle de l'eutectique [6]. D'autres mésoségrégations en V sont aussi identifiables dont la source est la rupture du tissu dendritique équiaxe par le poids métallostatique du solide inférieur. Ce phénomène est accentué par le retrait de solidification [3].

## 1.2 Structures de solidification : morphologie, origine et croissance

### 1.2.1 Structures colonnaires

Dans les alliages métalliques, à petite vitesse de solidification, une morphologie cellulaire, sans branchement, peut apparaître. Une morphologie plutôt dendritique est observée en augmentant, ensuite, la vitesse. Ces structures ramifiées possèdent des branches primaires et secondaires. On distingue deux distances :  $\lambda_1$  ( $\sim 100 \mu\text{m}$ -1 mm [7]) qui est la distance entre deux bras primaires successifs et  $\lambda_2$  ( $\sim 10$ -100  $\mu\text{m}$  [7]) qui est la distance entre deux bras secondaires. De plus, le rayon des pointes de dendrite  $R_{\text{pointe}}$  est aussi une des caractéristiques de ces structures (figure 1.4). Les structures colonnaires ont comme origine la zone de peau équiaxe qui apparaît immédiatement après le contact du matériau coulé avec le moule. Elles croissent dans la direction opposée au flux

de chaleur et normalement, en conséquence, aux parois des moules de fonderie. Cependant, leur croissance est influencée par l'écoulement du liquide.

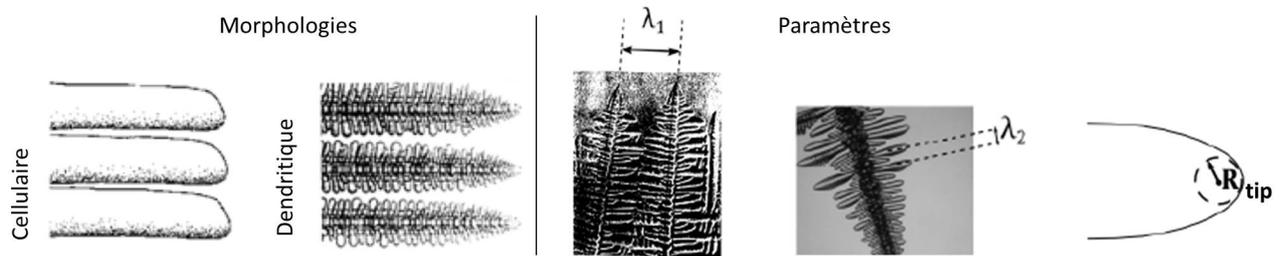


FIGURE 1.4: Les deux types de morphologies des structures colonnaires et les paramètres caractéristiques associés à la morphologie dendritique [8],[9].

### 1.2.2 Structures équiaxes

Ces structures n'ont pas de direction de croissance privilégiée à l'échelle du grain. Deux types de morphologies caractéristiques sont retrouvées. La première, globulaire, est compacte et sphérique. La deuxième, dendritique, est caractérisée par des branchements primaires et secondaires évoluant dans différentes directions (figure 1.5).

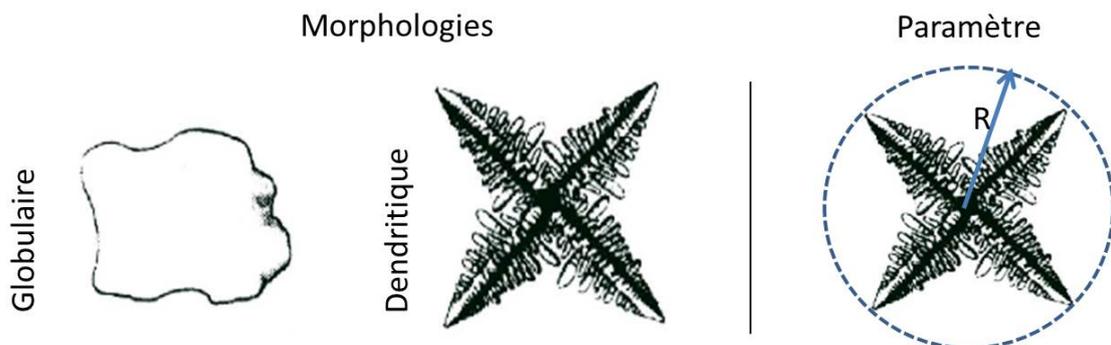


FIGURE 1.5: Les deux types de morphologies pour les grains équiaxes [8],[9].

Différents processus conduisent à la formation des structures équiaxes : **La germination hétérogène** est tout d'abord, reportée comme source des structures de solidification équiaxe [10]. Elle repose sur le fait que la zone de surfusion qui se forme devant le front colonnaire est propice à la formation des grains équiaxes. Dans le domaine des alliages de fonderie, deux cas doivent être distingués selon que l'alliage est inoculé (i.e des éléments additionnels sont

ajoutés à l'alliage coulé) ou non. Dans le premier cas, la surfusion nécessaire à la croissance des grains équiaxes est étroitement liée à la taille des particules inoculantes. Par contre, dans le second cas, la surfusion doit être très importante pour que ce phénomène soit opérationnel.

Le "**Big Bang**" est un terme proposé par Chalmers en 1963 [11] pour désigner un autre phénomène d'apparition des grains équiaxes à partir de germes initialement formés auprès des parois du moule, lors de la coulée, puis transportés par convection à l'intérieur du bain liquide sans être refondus.

Enfin, **La fragmentation** a été observée par Jackson *et al.* en 1966 [12]. D'après des observations réalisées sur des alliages transparents, la fragmentation des structures colonnaires est proposée comme autre source des grains équiaxes. En effet, une fois que les bras secondaires dépassent la couche de diffusion de soluté qui entoure le bras primaire, leur développement devient libre et ils s'élargissent. Par la suite, ceci entraîne un resserrement à l'endroit où ils sont attachés, constituant une zone de faiblesse mécanique mais aussi un site préférentiel de refusion du fait de la courbure négative locale. Les fragments ainsi formés sont transportés et peuvent, s'ils survivent dans la zone pâteuse, être source de grains équiaxes.

### 1.2.3 Croissance des structures

La vitesse de croissance des grains est contrôlée par celle de sa microstructure dendritique. Elle est reliée à la surfusion, c'est à dire à la différence de température entre la pointe de la dendrite et la température d'équilibre. Il existe plusieurs types de surfusions. La surfusion la plus importante est d'origine chimique : elle provient de la diffusion du soluté dans le liquide devant l'interface  $s/l$ . Elle est définie par l'équation suivante :

$$\Delta T_w = -m_l(w^{l(s/l)} - w^{l\infty}) = m_l w^{l\infty} \left( 1 - \frac{1}{1 - (1 - k)\Omega_w} \right) \quad (1.6)$$

avec  $w^{l(s/l)}$  la composition du liquide à l'interface  $s/l$  et  $w^{l\infty}$  la composition du liquide devant les pointes de dendrites, loin de l'interface.  $\Omega_w$  est la sursatura-

tion chimique définie par :

$$\Omega_w = \frac{w^{l(s/l)} - w^{l\infty}}{w^{l(s/l)} - w^{s(s/l)}} \quad (1.7)$$

On définit, de manière similaire, la surfusion d'origine thermique  $\Delta T_{th}$  qui provient de la diffusion de la chaleur latente dans le liquide.

$$\Delta T_{th} = \frac{L_f \Omega_{th}}{c_p} \quad (1.8)$$

avec  $c_p$  la capacité thermique et  $L_f$  la chaleur latente de fusion et  $\Omega_{th}$  la sursaturation thermique.

Enfin, une surfusion due à la courbure de l'interface est aussi active, et associée à la pointe dendritique :

$$\Delta T_R = \mathcal{K}\Gamma \quad (1.9)$$

où  $\mathcal{K}$  est la courbure et  $\Gamma$  le coefficient de Gibbs-Thomson.

Ivantsov [13] fournit la solution du profil de diffusion pour une pointe de dendrite, supposée paraboloidale, conduisant à l'expression suivante de la sursaturation chimique :

$$\Omega_w = Iv(Pe_w) \quad (1.10)$$

où  $Pe_w = \frac{R_{pointe} v_{pointe}}{2D^l}$  est le nombre de Péclet chimique,  $R_{pointe}$  le rayon des pointes des dendrites,  $v_{pointe}$  leur vitesse et  $Iv$  est la fonction d'Ivantsov définie par :

$$Iv(Pe) = Pe e^{Pe} E_1(Pe) \quad (1.11)$$

avec  $E_1(x) = \int_x^\infty \frac{e^{-t}}{t} dt$ , la fonction exponentielle intégrale.

### 1.3 Mécanismes de la transition colonnaire-équiaxe (TCE)

Un passage d'une structure de croissance colonnaire à une structure équiaxe lors de la solidification est couramment observé, correspondant à la TCE. Trois

phénomènes principaux, qui sont à son origine, vont être présentés dans cette partie. Dans les procédés de fonderie, le métal liquide est chauffé à une température supérieure à la température du liquidus  $T_{liq}$ . La différence correspond à la surchauffe. Au contact des parois, une couche mince équiaxe se forme. A partir de cette couche, un front colonnaire se développe avec une surfusion  $\Delta T_{col} = T_{col} - T_{liq}$  comme montré sur la figure 1.6. Au delà d'une surfusion limite  $\Delta T_N = T_N - T_{liq}$ , des grains équiaxes commencent à se former. Ceci amène à une croissance concurrentielle entre les deux types de structures.

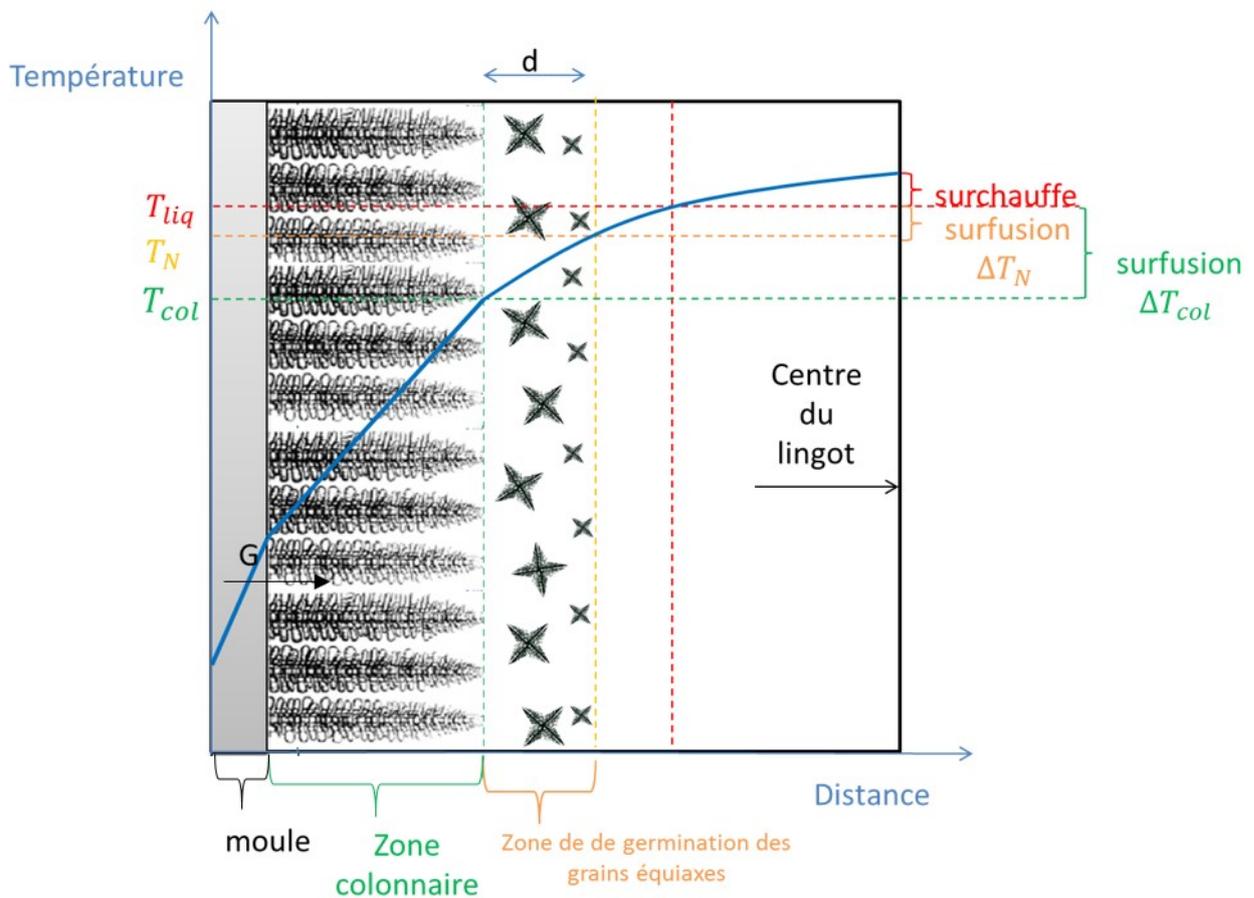


FIGURE 1.6: Évolution de la solidification dans un lingot et paramètres associés.

### 1.3.1 Blocage mécanique

C'est le blocage de l'avancement du front colonnaire par contact direct avec les grains équiaxes. Si la distance  $d$  (figure 1.6) est parcourue par la zone colonnaire dans un temps  $t_{col}$  plus long que le temps  $t_{eqx}$  nécessaire pour que la

fraction volumique des grains équiaxes,  $g_{eqx}$ , atteint une valeur limite  $g_{eqx} = g_{Hunt}$  [14], le front colonnaire est bloqué. Cette condition s'écrit sous la forme  $t_{eqx} < t_{col}$  et mène à une condition sur le gradient de température,  $G_t$ , critique associé à ce processus de blocage mécanique :

$$G_t < \frac{1}{(n+1)\left(\frac{3g_{Hunt}}{4\pi}\right)^{\frac{1}{3}}} n_{eqx}^{1/3} \Delta T_{col} \left[ 1 - \left( \frac{\Delta T_N}{\Delta T_{col}} \right)^{n+1} \right] \quad (1.12)$$

avec  $n_{eqx}$  la densité des grains équiaxes,  $\Delta T_{col}$  la surfusion d'avancement du front colonnaire,  $\Delta T_N$  la surfusion de germination des grains équiaxes.  $n$  est le coefficient utilisé dans le cadre du modèle de Burden et Hunt [15] pour le calcul de la vitesse des pointes de dendrites colonnaires tels que  $v_{pointe} = A\Delta T_{col}^n$ . Par la suite, la TCE est fonction à la fois du gradient de température devant le front  $G_t$  et de la vitesse des pointes  $v_{pointe}$ . Ce mécanisme a été proposé par Hunt en 1984 [15].

Les deux variables  $v_{pointe}$  et  $G_t$  déterminent, par la suite, une carte de structures qui sépare une zone mixte et une zone purement équiaxe. Parmi les potentialités du modèle Hunt, c'est son pouvoir de décrire de manière qualitative l'influence des paramètres tel que la densité des grains équiaxes  $n_{eqx}$ , la surfusion de germination des grains équiaxes  $\Delta T_N$  ou encore la composition nominale  $w_0$  sur la TCE. On peut voir l'effet de la variation de ces différents paramètres sur les cartes ci-dessous (figure 1.7) réalisées par Leriche [9].

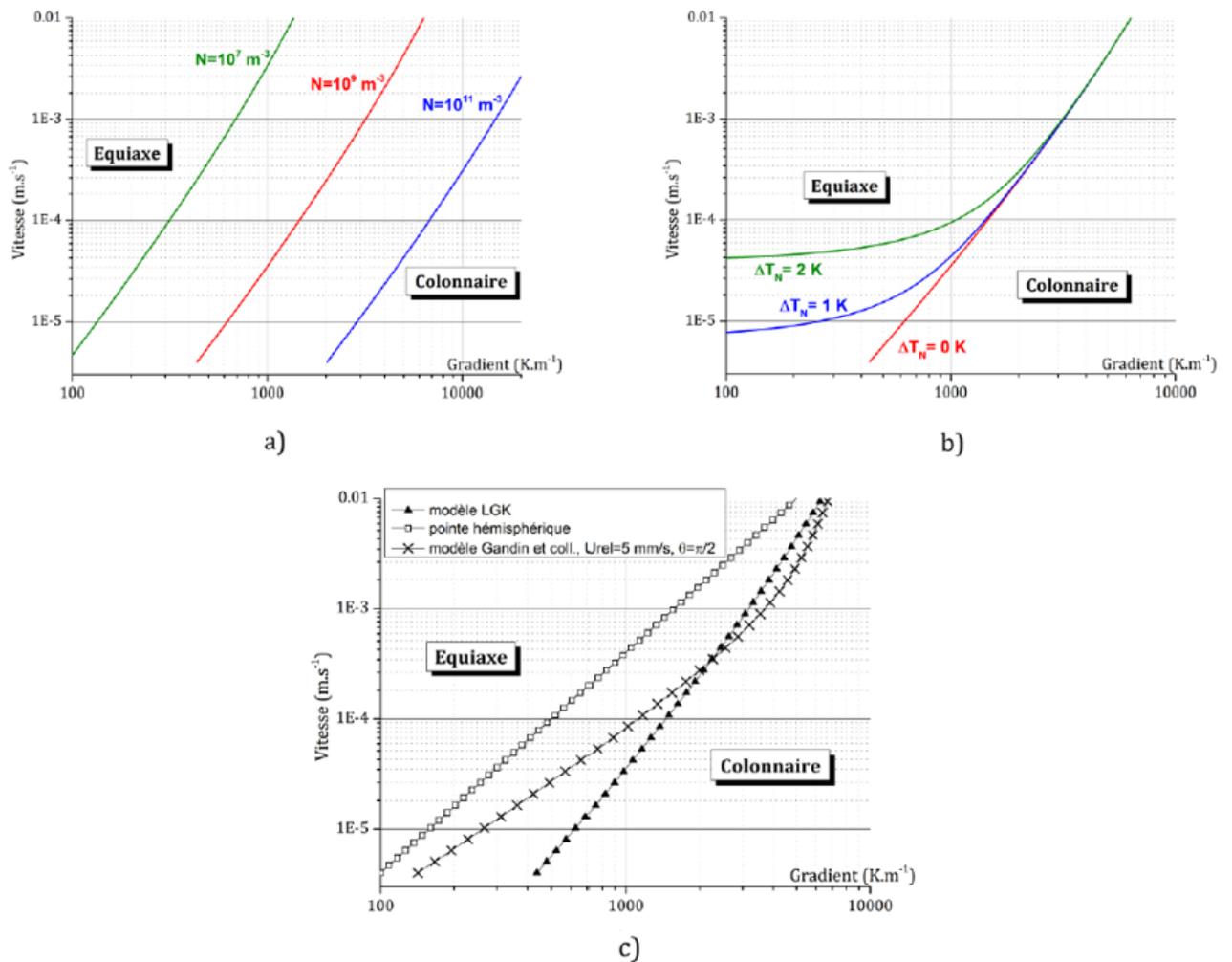


FIGURE 1.7: Cartes de structures selon le modèle de Hunt. a) Séparation entre la zone équiaxe et la zone mixte colonnaire pour différentes densités de grains avec  $\Delta T_N \approx 0$  K. b) Séparation entre les mêmes zones pour différentes surfusions de germination avec  $n_{eqx} = 10^9$  grains.m<sup>-3</sup> c) Séparation entre les mêmes zones pour différents modèles de cinétique de pointe (LGK [16]), pointe hémisphérique [8], Gandin et al. [17]) pour  $\Delta T_N \approx 0$  K et  $n_{eqx} = 10^9$  grains.m<sup>-3</sup> [9].

### 1.3.2 Blocage solutal

Lors de la solidification, les grains équiaxes rejettent du soluté. Quand leur densité est suffisante, Martorano et al. [18] ont pu montrer que l'interaction solutale est le mécanisme qui provoquera la TCE. En effet, la concentration du liquide vue par les pointes de dendrite notée  $w^{l\infty}$  augmente lors de la solidification et par la suite la surfusion chimique  $\Delta T_w = -m_l(w^{l(s/l)} - w^{l\infty})$  diminue. Le liquide devant les pointes de dendrites est enrichi en soluté jusqu'à atteindre

la composition d'équilibre à l'interface  $w^{l(s/l)}$ . La vitesse de croissance du front colonnaire deviendra localement négligeable et le front s'arrêtera.

### 1.3.3 Mécanisme de déstabilisation du front

Ce mécanisme a été proposé par Gandin [19] en se basant sur les expériences de solidification dirigée réalisées sur des lingots Al-Si et avec un modèle 1D où on ne considère que les structures colonnaires. Au moment où la surchauffe est complètement évacuée dans le liquide devant le front colonnaire, le gradient  $G^l$  dans le liquide va devenir très faible. Si  $G^l$  est suffisamment faible, la chaleur latente dégagée par le front en croissance peut être évacuée en partie via le liquide et par conséquent, un gradient local négatif va apparaître. Ceci entraîne un passage à une croissance équiaxe du front colonnaire lié à la déstabilisation des structures colonnaires, dans un mécanisme similaire à la fragmentation précédemment décrite.

## 2 Modèles numériques

Les modèles numériques de la littérature peuvent être divisés en deux grandes catégories. D'une part, il existe des modèles directs, basés sur la modélisation de chaque grain de manière individuelle et capables de prédire directement la TCE sans avoir recours à des critères de blocage comme celui de Hunt [14]. Ils sont, toutefois, coûteux numériquement. En ce sens, ils sont difficilement applicables à des échelles industrielles de l'ordre de celles des lingots d'acier. Parmi ces méthodes on peut citer les modèles CAFE, basé sur la méthode des automates cellulaires couplée à la méthode des éléments finis proposée par Rappaz et Gandin en 1993 [20] et repris dans les travaux de Guillemot et al. [21] [22] et Carozzani et al. [23]. Il existe aussi des modèles microscopiques considérant l'évolution de l'interface solide/liquide et qui utilisent des méthodes de type "Level Set", "Volume of fluid" [24] ou encore les méthodes en champs de phase où la transition liquide-solide se fait d'une manière continue [25].

D'autre part, des modèles indirects, basés sur la technique de la prise de

moyenne volumique sont aussi présents, et permettent de s'intéresser aux processus de solidification à l'échelle du lingot. Ils utilisent la notion de Volume Élémentaire Représentatif (VER) sur lequel on calcule la moyenne des différentes grandeurs. Nous ne présenterons dans cette étude que les modèles indirects de la littérature qui ont été appliqués à la modélisation des structures équiaxes, du front colonnaire et de la TCE.

## 2.1 Technique de la prise de moyenne volumique

Les différentes équations des modèles indirects explicités dans le paragraphe suivant, sont moyennées sur un VER qui est un volume de taille très petit par rapport à la taille du système mais suffisamment grand pour caractériser la structure dendritique (plusieurs bras de dendrites, soit environ 1 à 10 mm). Ce VER peut contenir plusieurs phases ainsi que plusieurs grains. La technique de la prise de moyenne consiste à définir des grandeurs moyennées sur ce VER et à s'intéresser à leur évolution à travers des équations de conservation moyennées. Pour une quantité microscopique volumique  $X^\alpha$  associée à la phase  $\alpha$ , la moyenne volumique, notée  $\langle X^\alpha \rangle$ , est définie par l'équation (1.1) :

$$\langle X^\alpha \rangle = \frac{1}{V_e} \int_{V_e} \xi^\alpha X^\alpha dV \quad (2.1)$$

où  $V_e$  est le volume du VER et la fonction de phase est définie par :

$$\xi^\alpha(x, t) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in \alpha \text{ au temps } t \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.2)$$

En prenant  $g^\alpha$  comme la fraction volumique de la phase  $\alpha$  dans le VER, la moyenne volumique intrinsèque  $\langle X^\alpha \rangle^\alpha$  (i.e. moyenne sur le volume de la phase) est définie par l'équation 1.3 ci dessous :

$$\langle X^\alpha \rangle^\alpha = \frac{1}{V_e^\alpha} \int_{V_e^\alpha} \xi^\alpha X^\alpha dV = \frac{\langle X^\alpha \rangle}{g^\alpha} \quad (2.3)$$

où  $V_e^\alpha$  est le volume associé à la phase  $\alpha$ .

### Équations de conservation moyennées

Afin de simuler le processus de solidification, des variables comme l'enthalpie massique  $h^\alpha$ , les fractions volumiques des différentes phases  $g^\alpha$ , leur composition en soluté  $w^\alpha$  et la vitesse des phases  $v^\alpha$  doivent être déterminées. Les équations de conservation associées à ces grandeurs sont écrites. Pour décrire le processus de germination des grains, leur croissance et leur transport (pour les grains équiaxes), quatre équations de conservation principales exprimées sur un VER sont utilisées, à travers les moyennes volumiques définies dans le paragraphe précédent. Ces quatre équations sont détaillées dans les travaux de Nguyen[26] et rappelées ici :

- Équation de conservation de l'énergie :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(g^\alpha \langle \rho^\alpha \rangle^\alpha \langle h^\alpha \rangle^\alpha) + \nabla \cdot (g^\alpha \langle \rho^\alpha \rangle^\alpha \langle h^\alpha \rangle^\alpha \langle \mathbf{v}^\alpha \rangle^\alpha) \\ = -\nabla \cdot (g^\alpha \langle \mathbf{q}^\alpha \rangle^\alpha) + Q^{\Gamma,\alpha} + Q^{q,\alpha} + Q^{\phi,\alpha} \end{aligned} \quad (2.4)$$

avec  $\rho^\alpha$  la densité de la phase  $\alpha$ ,  $\mathbf{q}^\alpha$  le vecteur flux diffusif de chaleur de la phase  $\alpha$ ,  $Q^{\Gamma,\alpha}$ ,  $Q^{q,\alpha}$  et  $Q^{\phi,\alpha}$  les transferts de chaleur interfaciaux dus respectivement au changement de phase, à la diffusion et à la germination de la phase  $\alpha$ .

- Équation de conservation de la quantité de mouvement :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(g^\alpha \langle \rho^\alpha \rangle^\alpha \langle \mathbf{v}^\alpha \rangle^\alpha) + \nabla \cdot (g^\alpha \langle \rho^\alpha \rangle^\alpha \langle \mathbf{v}^\alpha \rangle^\alpha \otimes \langle \mathbf{v}^\alpha \rangle^\alpha) \\ = -g^\alpha \nabla \langle p^\alpha \rangle^\alpha + \nabla \cdot (g^\alpha \langle \boldsymbol{\tau}^\alpha \rangle^\alpha) + g^\alpha \langle \mathbf{b}^\alpha \rangle^\alpha + \mathbf{M}^{\Gamma,\alpha} + \mathbf{M}^{d,\alpha} + \mathbf{M}^{\phi,\alpha} \end{aligned} \quad (2.5)$$

avec  $p$  la pression,  $\boldsymbol{\tau}$  la partie déviatorique du tenseur des contraintes,  $\mathbf{b}$  le vecteur de forces volumiques,  $\mathbf{M}^{\Gamma,\alpha}$ ,  $\mathbf{M}^{d,\alpha}$  et  $\mathbf{M}^{\phi,\alpha}$  les transferts de quantités de mouvement dus respectivement au changement de phase, aux contraintes interfaciales et à la germination.

- Équation de conservation de la masse :

$$\frac{\partial}{\partial t}(g^\alpha \langle \rho^\alpha \rangle^\alpha) + \nabla \cdot (g^\alpha \langle \rho^\alpha \rangle^\alpha \langle \mathbf{v}^\alpha \rangle^\alpha) = \Gamma^\alpha + \Phi^\alpha \quad (2.6)$$

où  $\Gamma^\alpha$  est le flux de masse à travers l'interface, du au changement de phase  $\alpha$  et  $\Phi^\alpha$  le taux de transfert de masse, du à la germination.

- Équation de conservation des espèces chimiques :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(g^\alpha \langle \rho^\alpha \rangle^\alpha \langle w^\alpha \rangle^\alpha) + \nabla \cdot (g^\alpha \langle \rho^\alpha \rangle^\alpha \langle w^\alpha \rangle^\alpha \langle \mathbf{v}^\alpha \rangle^\alpha) \\ = -\nabla \cdot (g^\alpha \langle \mathbf{j}^\alpha \rangle^\alpha) + J^{\Gamma, \alpha} + J^{j, \alpha} + J^{\phi, \alpha} \end{aligned} \quad (2.7)$$

avec  $\mathbf{j}^\alpha$  le vecteur flux diffusif d'espèces dans la phase  $\alpha$ ,  $J^{\Gamma, \alpha}$ ,  $J^{j, \alpha}$  et  $J^{\phi, \alpha}$  les transferts d'espèces interfaciaux dus respectivement au changement de phase, à la diffusion ainsi qu'à la germination.

Dans ces différentes équations, les termes à gauche représentent les termes d'accumulation et de transport par convection. Les termes à droite représentent la contribution des phénomènes microscopiques de transferts interfaciaux dus au changement de phase, à la diffusion et à la germination, selon les processus à considérer.

## 2.2 Modélisation des structures équiaxes

### Représentation du VER

Dans la littérature on retrouve deux représentations différentes pour le VER contenant des grains équiaxes. En effet, dans les premiers travaux de Beckermann et Viskanta [27] reprise par Wu et Ludwig [28], seulement deux domaines ont été utilisés : une phase solide et une phase liquide en considérant une morphologie globulaire pour les grains équiaxes. Ensuite un modèle à enveloppe pour une morphologie dendritique a été utilisé par Wang et Beckermann en 1994 [29]. Cette enveloppe est représentée par une ligne qui rejoint les bras primaires et secondaires séparant ainsi le liquide en deux sous domaines : un liquide intragranulaire qui se trouve à l'intérieur de cette enveloppe et un liquide

extragranulaire qui se trouve à l'extérieur. Ce concept a été proposé initialement par Rappaz et Thévoz en 1987 [30].

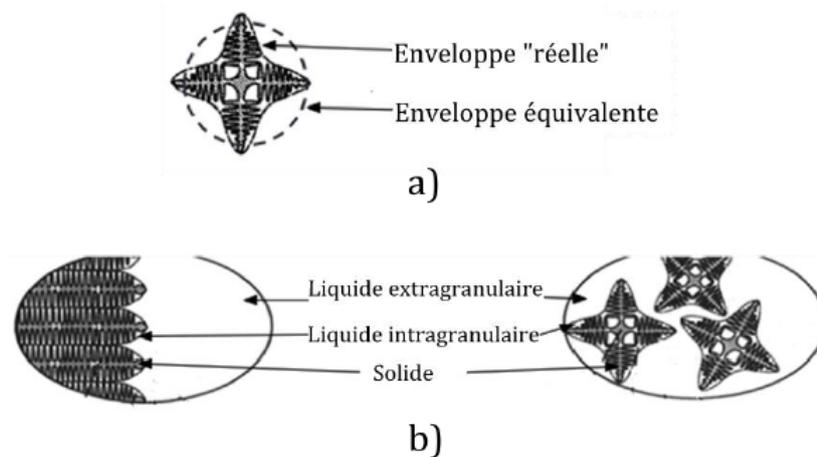


FIGURE 1.8: a) Modèle d'enveloppe pour un grain équiaxe et enveloppe simplifiée sphérique. b) Définition des phases dans le modèle de Beckermann et al. [29].

Cette dernière approche permet d'utiliser des modèles microscopiques de croissance qui considèrent une composition d'équilibre au niveau du liquide intragranulaire puis une diffusion finie dans le liquide extragranulaire comme utilisé par Nguyen [26]. En premier lieu un modèle à deux domaines puis un modèle dendritique à trois domaines ont été développés (figure 1.9). Cette deuxième approche lui a permis d'améliorer ses résultats de calcul et de s'approcher quantitativement des observations expérimentales.

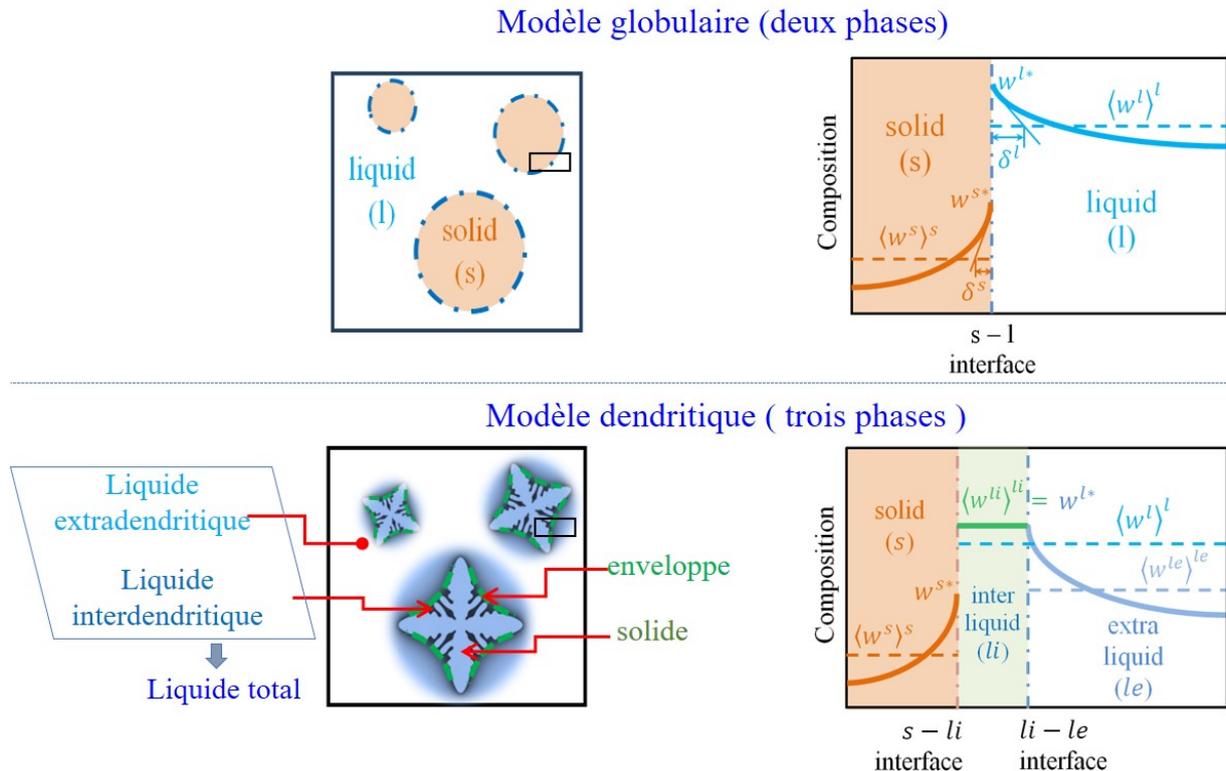


FIGURE 1.9: Représentations des structures équiaxes et des modèles microscopiques associés selon les deux approches utilisées par Nguyen [26].

### Équations du modèle et la méthode de résolution

Le modèle de solidification équiaxe est basé sur les équations moyennées présentées dans le paragraphe précédent. Afin de bien prendre en considération les phénomènes microscopiques, les équations précédentes peuvent être résolues en utilisant de très petits pas de temps. Toutefois, résoudre ces équations ainsi, pour des lingots d'acier de taille industrielle, nécessitera un temps important de calcul. D'où l'approche proposée par Založnik et Combeu [31] de "splitting" ou de séparation, réutilisée par Leriche [9] et Nguyen [26] dans leurs travaux. Selon cette méthode, les fractions de phases ainsi que la composition sont supposées évoluer sur deux étapes en temps : une étape macroscopique de transport et une étape microscopique de croissance. En utilisant cette hypothèse, les équations décrivant chaque étape peuvent être résolues sur des échelles spatiales et temporelles différentes et ainsi correspondre à une approche multi-échelle.

Tout d'abord, dans l'étape de transport, seule les variations dues au mécanisme

de transport convectif sont considérées. Ce qui est fait en résolvant les équations moyennées ci-dessous sur un pas de temps macro et sur le maillage éléments finis global. Ces équations sont extraites des travaux de Nguyen [26].

$$\frac{\partial}{\partial t} g_{tr}^s + \nabla \cdot (g_{tr}^s \langle \mathbf{v}^s \rangle^s) = 0 \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} N_{tr} + \nabla \cdot (N_{tr} \langle \mathbf{v}^s \rangle^s) = 0 \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (g_{tr}^\alpha \langle w^\alpha \rangle_{tr}^\alpha) + \nabla \cdot (g_{tr}^\alpha \langle w^\alpha \rangle_{tr}^\alpha \langle \mathbf{v}^\alpha \rangle^\alpha) = 0 \quad (2.10)$$

où l'indice  $tr$  montre que les quantités sont obtenues après la résolution de l'étape de transport,  $g_{tr}^s$  la fraction solide,  $\langle \mathbf{v}^s \rangle^s$  la vitesse du solide,  $N_{tr}$  la densité des grains équiaxes,  $\langle w^\alpha \rangle_{tr}^\alpha$  la composition de la phase  $\alpha$  avec  $\alpha = l$  pour le liquide ou  $\alpha = s$  pour le solide et  $\langle \mathbf{v}^\alpha \rangle^\alpha$  la vitesse de la même phase.

Ensuite, dans l'étape de croissance, la contribution des processus microscopiques est considérée pour l'évolution de la fraction solide  $g^s$ , la densité des grains  $N$  et la composition en soluté dans chaque phase  $\alpha$ ,  $w^\alpha$ . Les équations ci-dessous sont alors résolues sur des pas de temps micro  $\delta t$  et localement, soit sur chaque nœud du maillage éléments finis.

$$\frac{\partial}{\partial t} g_{gr}^s = \frac{\Gamma^s + \Phi^s}{\rho^s} \quad (2.11)$$

où l'indice  $gr$  montre que les quantités sont obtenues après la résolution de l'étape de croissance.  $\Gamma^s$  est le taux de croissance de la phase solide par transformation de phase,  $\Phi^s$  le taux de croissance par germination et  $\rho^s$  la densité de la phase solide.

$$\frac{\partial}{\partial t} N_{gr} = \dot{N} \quad (2.12)$$

$$\dot{N} = \begin{cases} \frac{N_0}{\delta t} & \text{si } (T < T_{nucl}) \text{ et } \left( \int_0^t \dot{N} dt = 0 \text{ ou } N = 0 \right) \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (2.13)$$

Ceci traduit le fait que pour permettre la germination des grains équiaxes, il faut que la température  $T$  soit inférieure à une certaine température de germination  $T_{nucl}$ , à préciser, et que l'on n'a pas germé dans cet endroit ou que l'on a germé mais que les grains ont été transportés. Les germes sont considérés statiques dans cette approche de résolution.

$$\frac{\partial}{\partial t}(g_{gr}^{\alpha} \langle w^{\alpha} \rangle_{gr}) = \frac{J^{\Gamma, \alpha} + J^{j, \alpha} + J^{\phi, \alpha}}{\rho^{\alpha}} \quad (2.14)$$

avec  $J^{\Gamma, \alpha}$ ,  $J^{j, \alpha}$  et  $J^{\phi, \alpha}$  les transferts d'espèces interfaciaux dus respectivement au changement de phase, à la diffusion ainsi qu'à la germination.

Pour coupler les deux étapes de transport et de croissance, une procédure d'initialisation des différentes variables est employée dans laquelle les solutions obtenues à la fin d'une étape sont utilisées pour initialiser l'autre. Comme montré sur la figure [1.10](#), pour chaque macro pas de temps  $\Delta t$ , une procédure itérative est utilisée pour déterminer les valeurs des différentes variables à la fin de ce pas de temps. Les valeurs sont initialisées avec les valeurs obtenues à l'itération  $\nu$  et les calculs donnent les valeurs d'indice  $\nu + 1$ . Suite à l'étape de transport, les valeurs de fraction de phase, de densité de grains et de compositions sont mises à jour et les valeurs obtenues sont indicées par  $tr$  et utilisées comme valeurs d'initialisation pour la boucle de calcul sur les micro pas de temps  $\delta t$  dont le nombre est  $n$  tel que  $\Delta t = n \delta t$ . Enfin les équations de conservation de quantité de mouvement et d'énergie sont résolues à l'extérieur de la boucle de micro pas de temps et permettent de mettre à jour les valeurs de vitesse et d'enthalpie à l'itération  $\nu + 1$ . Ceci est montré sur la figure [1.10](#) suivante.

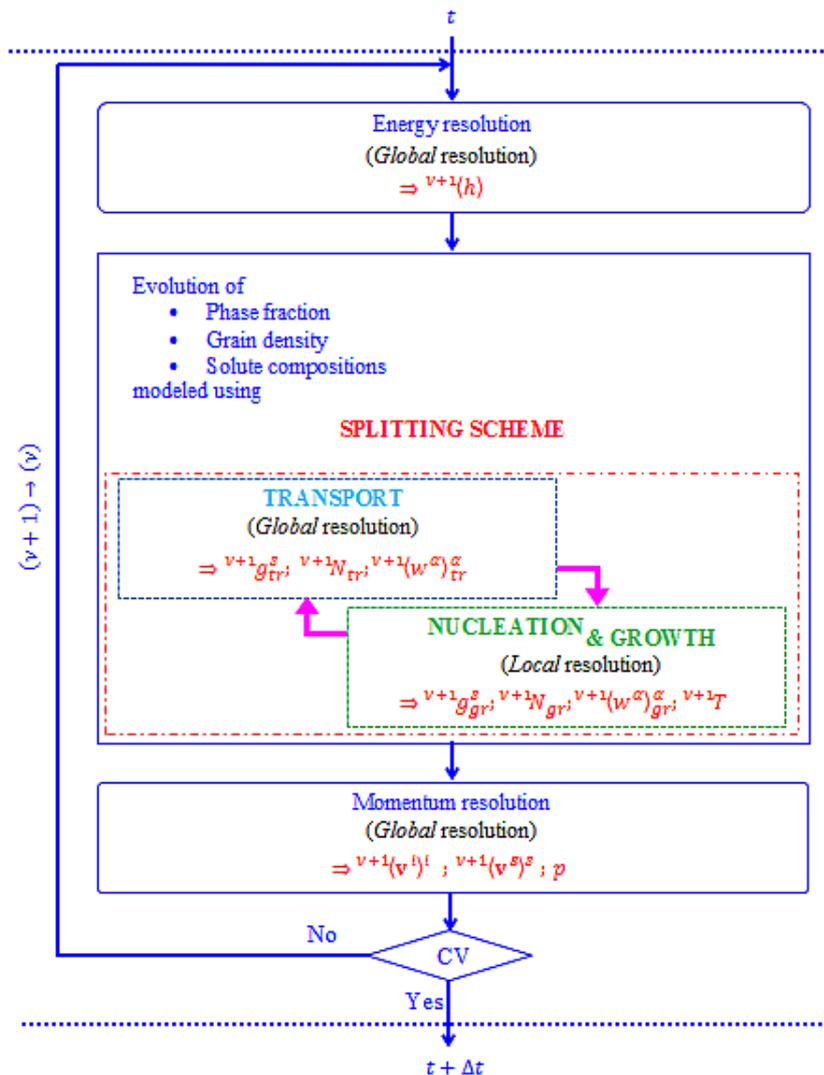


FIGURE 1.10: Schéma de résolution basé sur la méthode de séparation proposée par Založnik et Combeau [31] et utilisée par Nguyen [26].

### 2.3 Modélisation des structures colonnaires

Dans cette partie, les différentes équations utilisées pour modéliser la croissance du front colonnaire et son avancement doivent être rappelées. Comme dans le cas des structures équiaxes, la modélisation de ces structures colonnaires est basée sur l'utilisation des équations de conservation de masse, de soluté et de densité des grains. Toutefois, une modélisation différente pour le VER est proposée. De plus, un calcul supplémentaire par rapport au cas équiaxe s'impose aussi pour étudier l'avancement du front et son influence.

### Modélisation du VER

Pour la modélisation du VER, Martorano *et al.* [18], Ciobanas et Fautrelle [32] ainsi que Leriche [9] ont utilisé une représentation des bras colonnaires comme un assemblage de sous structures qui ressemblent à des grains équiaxes distancés de  $\lambda_1$ , distance caractéristique entre deux bras primaires et ceci pour pouvoir utiliser les mêmes paramètres morphologiques que ceux utilisés dans le cas de la croissance équiaxe. Leriche [9] subdivise son VER contenant le front colonnaire en deux sous zones : la zone colonnaire qui contient le front et la zone extracolonnaire qui est devant le front distinguant ainsi 3 types de domaines : un liquide extracolonnaire "ec" et un liquide colonnaire "col" qui lui même est divisé en un liquide intergranulaire "d" qui se trouve à l'intérieur des enveloppes et un liquide extragranulaire "e" se trouvant à l'extérieur de ces enveloppes comme montré sur la figure 1.11. Ces notations vont être utilisées pour indiquer les différents paramètres utilisés dans les équations, notamment la concentration en soluté des différents domaines.

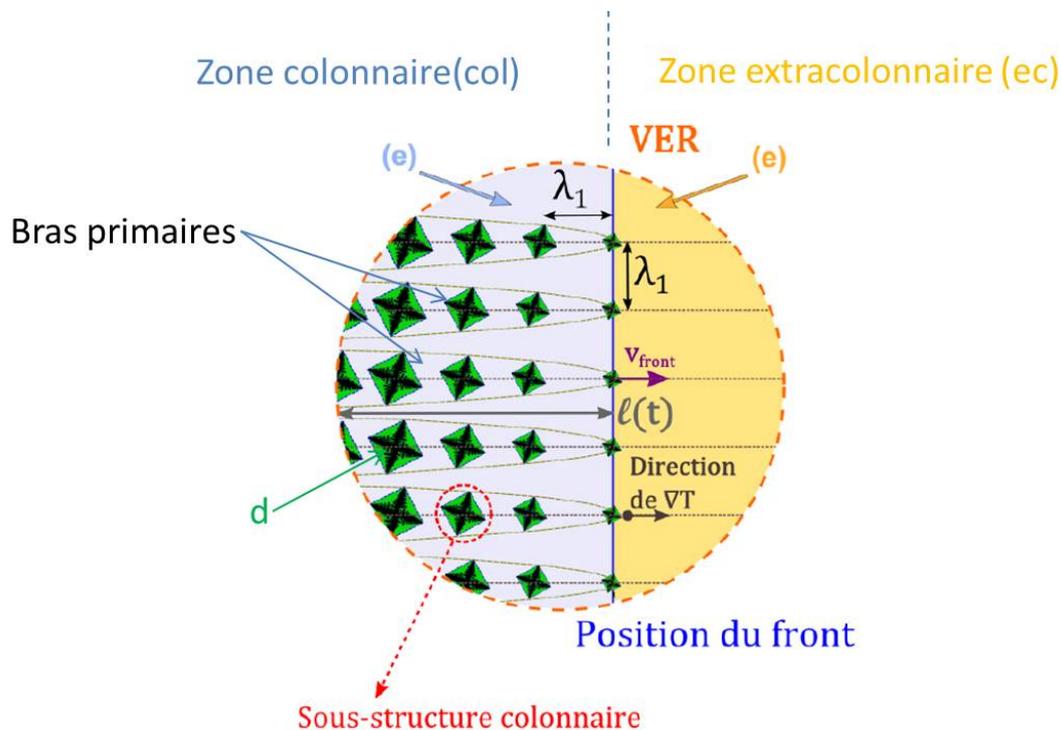


FIGURE 1.11: Représentation du VER colonnaire par Leriche divisé en une zone colonnaire (en bleu) et une zone extracolonnaire (en jaune) [9].

**Equations du Modèle**

Dans le cas du modèle colonnaire pur et dans le cadre du modèle de Leriche [9], pour décrire la croissance des structures équiaxes, des équations de conservation de masse ainsi que de soluté sont utilisées. Les équations de conservation de soluté, en particulier, s'écrivent ainsi :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \left( \rho_s g_{col} g_s^{col} \langle C_s^{col} \rangle^s \right)}{\partial t} = g_{col} \Gamma_s^{col} C_s^{*,col} + \rho_s S_v^{s,col} D_s g_{col} \frac{k C_l^{*,col} - \langle C_s^{col} \rangle^s}{\delta_s^{col}} + \Phi_s^{col} k \langle C_l^{col} \rangle^l \\ \frac{\partial \left( \rho_l g_{col} g_l^{col} \langle C_l^{col} \rangle^l \right)}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \rho_l g_{col} g_l^{col} \langle C_l^{col} \rangle^l \langle \bar{v}_l \rangle^l \right) = -g_{col} \Gamma_s^{col} C_s^{*,col} - \Phi_s^{col} k \langle C_l^{col} \rangle^l \\ \quad + \rho_l S_v^{env,col} D_l \frac{g_l^{col}}{g_e^{col}} g_{col} \frac{C_l^{*,col} - \langle C_l^{col} \rangle^l}{\delta_l^{env,col}} + \frac{\partial (\rho_l g_{col})}{\partial t} \langle C_l^{ec} \rangle^l \\ \frac{\partial \left( \rho_l g_{ec} \langle C_l^{ec} \rangle^l \right)}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \rho_l g_{ec} \langle C_l^{ec} \rangle^l \langle \bar{v}_l \rangle^l \right) = -\frac{\partial (\rho_l g_{col})}{\partial t} \langle C_l^{ec} \rangle^l \end{array} \right.$$

(2.15)

avec  $g_{col}$  et  $g_{ec}$  respectivement la fraction de la zone colonnaire et de la zone extra colonnaire dans le VER,  $g_s^{col}$  la fraction du solide par rapport à la zone colonnaire,  $\Gamma_s^{col}$  le taux de croissance de la phase solide par rapport à la zone colonnaire et  $\Phi_s^{col}$  le taux de germination colonnaire.

Les trois équations précédentes correspondent à trois bilans faits successivement sur la masse de soluté contenue dans le solide de la zone colonnaire, le liquide de la zone colonnaire et enfin le liquide dans la zone extracolumnaire. Elles traduisent le fait que la variation en masse de soluté dans chaque phase (termes en noir) est due, d'une part, à la germination et croissance de la phase (termes en marron), d'autre part, au transport (termes en bleu) et enfin à la redistribution du liquide entre les deux zones colonnaire et extracolumnaire quand le front avance (termes en vert).

**Méthodes de suivi de front**

D'autre part, pour décrire l'avancement du front, plusieurs modèles ont été utilisés. Leriche, inspiré des travaux de Ludwig et Wu [33], définit une variable  $I$  et distingue 3 types de VER : un VER qui ne contient pas de front colonnaire pour lequel il accorde la valeur  $I = 0$ , un VER qui est occupé totalement par des grains colonnaires ( $I = 2$ ), puis un VER contenant une partie colonnaire et une autre liquide ( $I = 1$ ). Pour propager le front aux volumes voisins, il considère comme dans le cas de Ludwig et Wu [33] une distance maximale  $d_{lim}$  pour chaque VER. La direction de propagation est alignée avec le gradient thermique local  $(\vec{\nabla}T)_{front}$ . Par la suite,  $d_{lim}$  est la longueur du volume de la maille de calcul dans la direction de  $(\vec{\nabla}T)_{front}$  (figure 1.12.a). La vitesse du front aux pointes des bras primaires ainsi que la vitesse de croissance des enveloppes des sous-structures colonnaires est calculée en suivant le modèle LGK [16].

Pour le suivi du front, on trouve dans la littérature aussi une autre approche différente de celle présentée précédemment qui a été utilisée pour la première fois par Jacot et al. [34] pour des applications de modélisation de fonte blanche et grise. Un maillage éléments finis est employé pour décrire le déplacement du front. Une variable de fraction capturée est définie sur chaque nœud. Cette variable prend une valeur de 0 pour un nœud situé dans une région où il n'existe que des grains équiaxes, 1 sur les nœuds situés dans une région colonnaire et enfin, une valeur entre 0 et 1 si le front se trouve dans l'élément auquel est associé ce nœud (figure 1.12.b).

La fonction est orientée par le vecteur du gradient thermique. Un segment est défini sur chaque maille tel que la surface soit égale à une fraction faible à la germination puis il le fait avancer avec une fonction simple  $v_{front} = A\Delta T^2$  qui prend en considération la surfusion chimique et de courbure ainsi que les coefficients de diffusion et la tension de surface. La fraction propagée du front est mise à jour selon la position du segment [34].

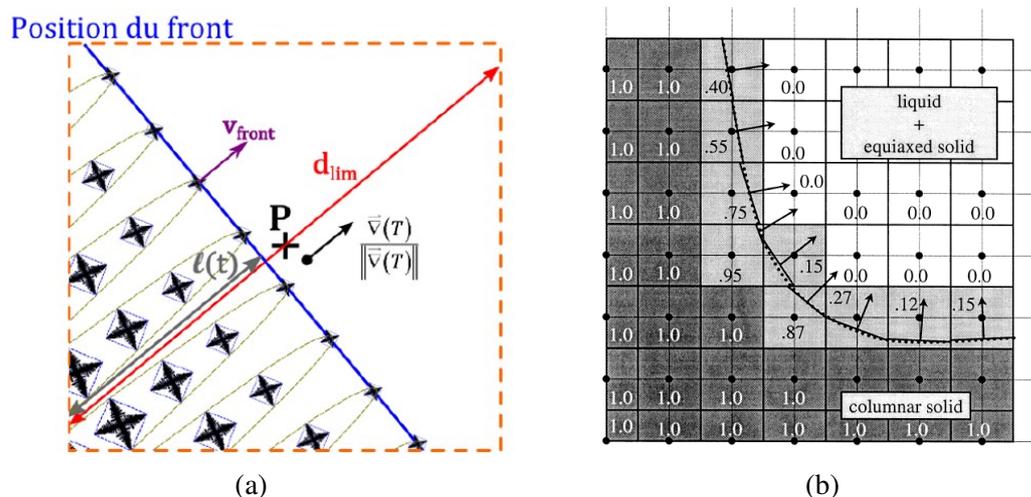


FIGURE 1.12: Modèles d'avancement de front selon (a) Leriche [9] et (b) Jacot [34].

## 2.4 Modélisation de la croissance mixte colonnaire-équiaxe et de la TCE

Dans le cadre de la modélisation de la TCE, il est nécessaire d'enrichir les approches précédentes. Le modèle de Leriche [9] considère une zone mixte qui contient à la fois les structures colonnaires annotées dans ce qui suit 'col' et équiaxes 'eqx'. A chaque structure sont associées trois phases : solide  $s$ , liquide intragranulaire  $d$  et liquide extragranulaire  $e$  tel que la somme des fractions de ces six phases est égale à 1 (figure 1.13).

$$g_s^{eqx} + g_d^{eqx} + g_e^{eqx} + g_s^{col} + g_d^{col} + g_e^{col} = 1 \quad (2.16)$$

Des hypothèses simplificatrices sont utilisées. Notamment, les grains équiaxes dans la zone colonnaire sont supposés fixes, faisant partie des sous structures colonnaires. Par la suite, l'indice  $col$  représente dans ce cas un résultat mixte des structures colonnaires et équiaxes (figure 1.13). Les équations utilisées sont les mêmes équations de conservation de soluté et de masse utilisées dans les cas précédents mais elles incluent à la fois des termes relatifs à des grandeurs colonnaires et équiaxes :

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \frac{\partial(\rho_s g_{col} g_s^{col})}{\partial t} = g_{col} \Gamma_s^{col} + \Phi_s^{col} + \frac{\partial(\rho_s g_{col})}{\partial t} g_s^{eqx} \\
 \frac{\partial(\rho_l g_{col} g_l^{col})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l g_{col} g_l^{col} \langle \vec{v}_l \rangle^l) = -g_{col} \Gamma_s^{col} - \Phi_s^{col} + \frac{\partial(\rho_l g_{col})}{\partial t} g_l^{eqx} \\
 \frac{\partial(\rho_s g_{eqx} g_s^{eqx})}{\partial t} = g_{eqx} \Gamma_s^{eqx} + \Phi_s^{eqx} - \frac{\partial(\rho_s g_{col})}{\partial t} g_s^{eqx} \\
 \frac{\partial(\rho_l g_{eqx} g_l^{eqx})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l g_{eqx} g_l^{eqx} \langle \vec{v}_l \rangle^l) = -g_{eqx} \Gamma_s^{eqx} - \Phi_s^{eqx} - \frac{\partial(\rho_l g_{col})}{\partial t} g_l^{eqx}
 \end{array} \right.$$

(2.17)

avec  $g_{col}$  et  $g_{eqx}$ , respectivement, la fraction de la zone colonnaire et de la zone équiaxe dans le VER,  $g_s^{col}$  et  $g_s^{eqx}$  la fraction du solide par rapport à la zone colonnaire et à la zone équiaxe,  $\Gamma_s^{col}$  le taux de croissance de la phase solide dans la zone colonnaire,  $\Gamma_s^{eqx}$  celui dans la zone équiaxe,  $\Phi_s^{col}$  le taux de germination colonnaire et  $\Phi_s^{eqx}$  le taux de germination équiaxe.

Ces équations représentent les bilans de masse, successivement, pour les phases solides et liquides des zones colonnaire et équiaxe. Les termes marrons représentent toujours le changement de phase ainsi que la germination, les termes en bleu sont dus au transport du liquide et enfin les termes en vert représentent la variation due à l'intégration des grains équiaxes qui sont présents devant le front dans le domaine colonnaire.

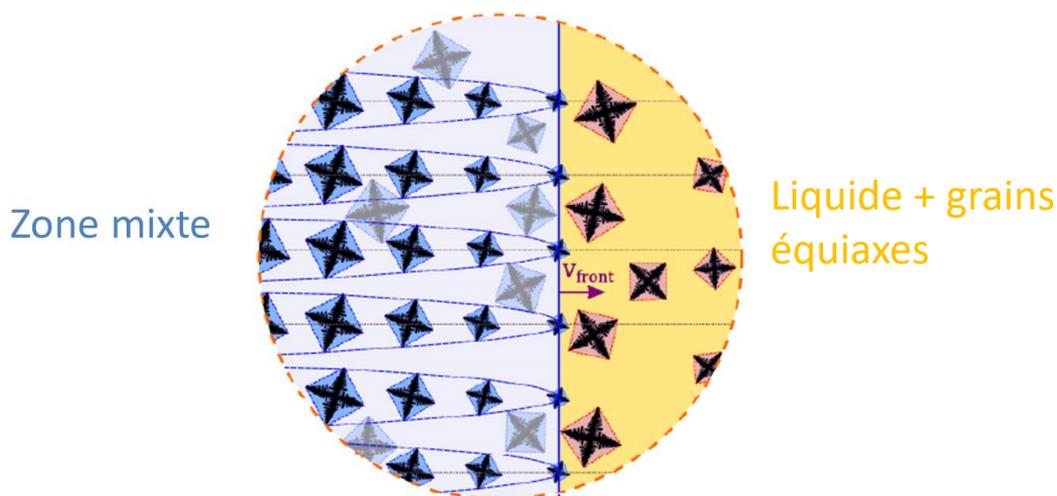


FIGURE 1.13: Représentation d'un VER contenant une structure mixte [9].

Dans le cadre de l'application du même modèle par Leriche, la TCE est prédite en utilisant essentiellement les deux critères de blocage mécanique et solutal qui sont définis dans la partie 1.3.2 précédente. Dans les travaux de Leriche [9], le modèle a été appliqué sur des lingots industriels. Le premier résultat est retrouvé pour un lingot de 6.2 tonnes (de nuance 100 C6 constitué notamment de 1.01 % pds de carbone). Il amène à une conclusion importante : il n'est pas possible de retrouver la TCE déterminée expérimentalement en considérant seulement la germination hétérogène volumique comme source de grains équiaxes. Le modèle prédit une zone colonnaire très fine en bas du lingot et entièrement colonnaire en haut (figure 1.14). Ces résultats ne s'accordent pas avec l'expérience. Ceci amène à conclure que les phénomènes de germination volumique et Big-Bang ne sont pas les seuls processus intervenant dans la création des grains équiaxes.

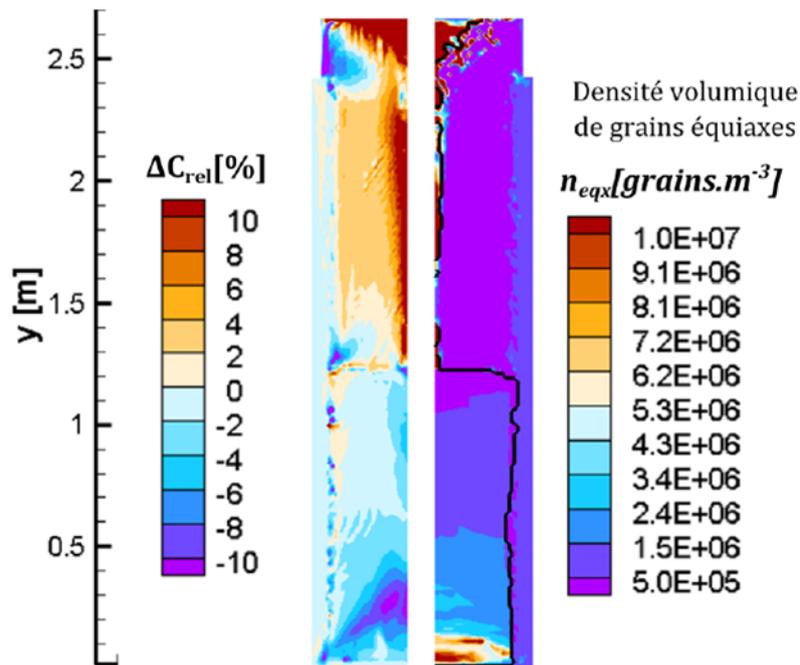


FIGURE 1.14: Résultats avec germination hétérogène des grains équiaxes [9], gauche : Écart à la composition nominale en carbone, droite : densité volumique de grains équiaxes.

Ensuite, Leriche a appliqué le même modèle mais en considérant la fragmentation comme source des grains équiaxes. Pour cela, il a utilisé un flux de fragments. Cette deuxième hypothèse l'amène à une prédiction meilleure de la TCE par rapport aux résultats d'injection volumique, mais la zone colonnaire prédite en bas du lingot reste trop fine par rapport aux résultats expérimentaux et trop importante dans la partie haute (figure 1.15). Il a alors introduit un critère sur le gradient thermique devant le front colonnaire, en se basant sur les travaux de Gandin [19], pour améliorer le résultat : l'injection n'est déclenchée que si le gradient thermique est inférieur à une certaine valeur critique. Aussi, la refusion de la masselotte exothermique est considérée comme source de grains (par fragmentation), ce qui était constaté expérimentalement. Ceci permet de mieux prédire la position de la TCE et la ségrégation mesurée a été qualitativement retrouvée. Toutefois, la ségrégation négative dans la partie centrale reste sous-estimée mais les différences de morphologie sont moins marquées.

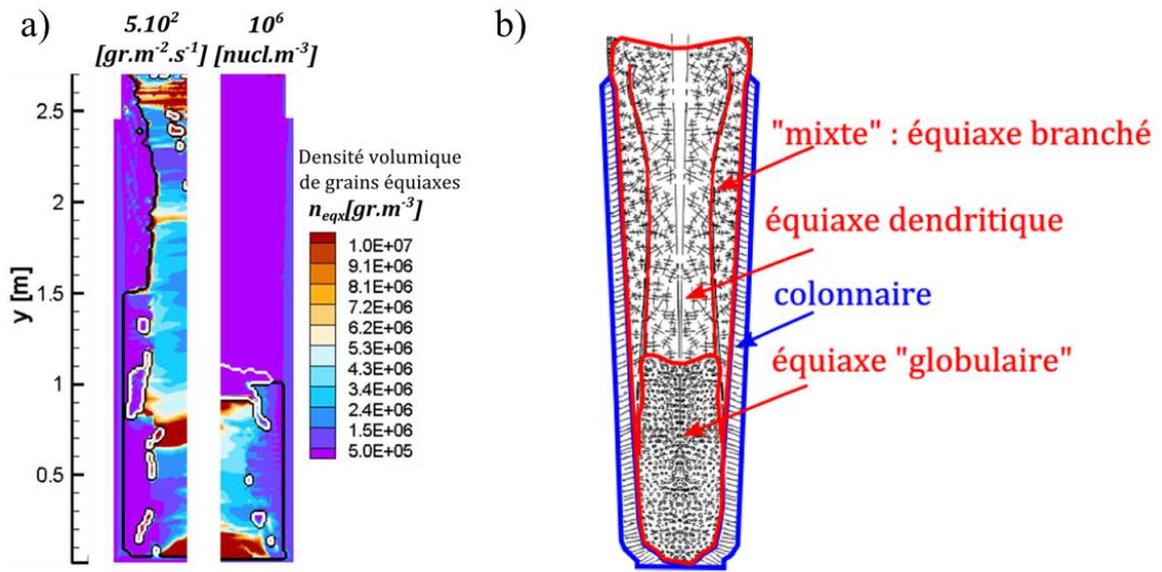


FIGURE 1.15: a) Résultats avec fragmentation (à gauche) et germination hétérogène volumique (à droite) [9] b) Schéma obtenu à partir de résultats expérimentaux [35].



# Chapitre 2

## Modèle colonnaire-équiaxe : équations et implémentation

Dans ce chapitre, une présentation du modèle général sera faite ainsi que son implémentation dans le cadre d'une approche éléments finis. Tout d'abord, les différentes équations décrivant l'avancée du front colonnaire ainsi que les équations de conservation associées à l'évolution des deux structures colonnaire et équiaxe sont présentées. Par la suite, l'algorithme de résolution de ces différentes équations est expliqué. Les équations de conservation précédemment présentées sont divisées en deux parties. D'une part, la partie décrivant le transport (échelle macroscopique) et d'autre part la partie décrivant la germination et la croissance (échelle microscopique). Cette approche correspond à la séparation des échelles comme proposé par Combeau et Založnik [31].

Il faut noter que les notations utilisées dans ce chapitre sont différentes de celles introduites dans le chapitre précédent (éq. 2.15 à 2.17) mais sont préférées car elles permettent une généralisation des écritures en structures/phases comme dans les travaux de Carozzani [23] et Tourret [36].

### 1 Présentation du modèle

#### 1.1 Représentation des structures colonnaire et équiaxe

La figure 2.1 représente un VER avec deux régions : colonnaire (1) et équiaxe (2) séparées par une frontière intermédiaire représentant le front colonnaire.

Dans l'approche proposée, les grains des régions colonnaire et équiaxe présentent une structure dendritique avec 3 phases caractéristiques : le solide,  $s^{(k)}$ , le liquide interdendritique,  $l_1^{(k)}$  et le liquide extradendritique,  $l_2^{(k)}$ , où  $k$  désigne la structure colonnaire,  $k = 1$ , ou équiaxe,  $k = 2$ .

Comme plusieurs auteurs ( Martorano et al. [18], Ciobanas et Fautrelle [32], Leriche [9], Wang et Beckermann [37] ), nous avons choisi de modéliser chaque bras primaire colonnaire comme un alignement de « sous-structures » semblables aux grains équiaxes comme montré sur la figure 2.1. Le choix de cette représentation est justifié par le fait que, pour la croissance de chacune de ces sous-structures colonnaires, on peut utiliser les mêmes grandeurs morphologiques (distances de diffusion, surfaces spécifiques) que pour un grain équiaxe. On suppose que ces bras primaires sont séparés par une distance  $\lambda_1$  constante. Les deux structures possèdent une enveloppe octaédrique (figure 2.1).

Concernant les compositions, on considère une diffusion finie à la fois dans le solide  $s^{(k)}$  et dans le liquide extragranulaire  $l_2^{(k)}$ . Le liquide intragranulaire  $l_1^{(k)}$  est de composition homogène. Ces différents profils de compositions sont montrés à la figure 2.2.

Le front colonnaire est modélisé par l'isovaleur 0 d'une fonction distance signée  $\psi(x, t)$  qui sera définie dans le paragraphe suivant.

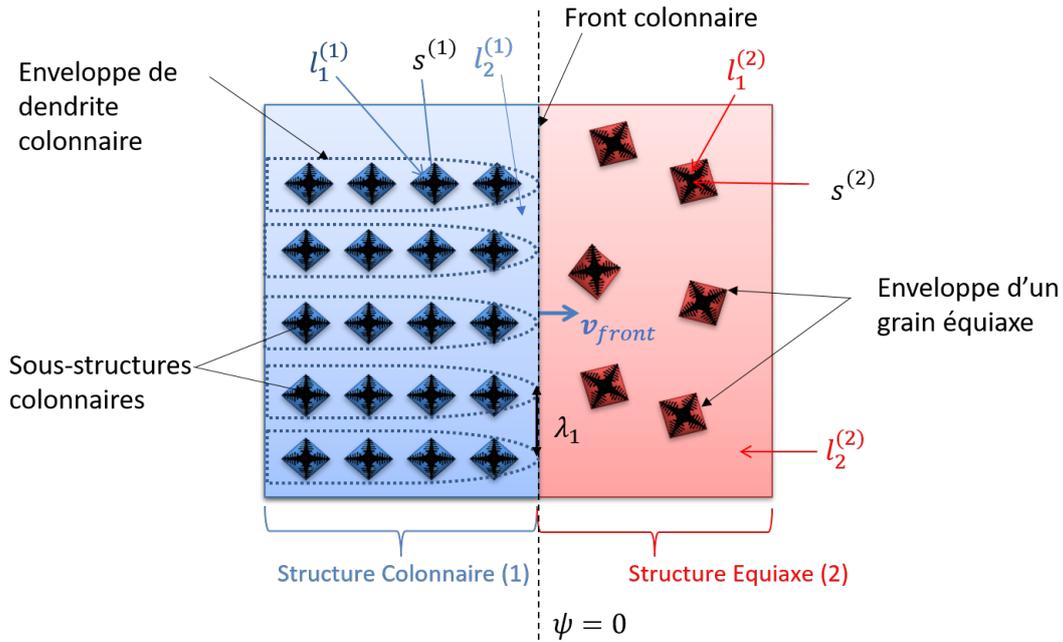


FIGURE 2.1: Représentation des structures (1) colonnaire et (2) équiaxe et de leurs phases  $s$ ,  $l_1$ , et  $l_2$ .

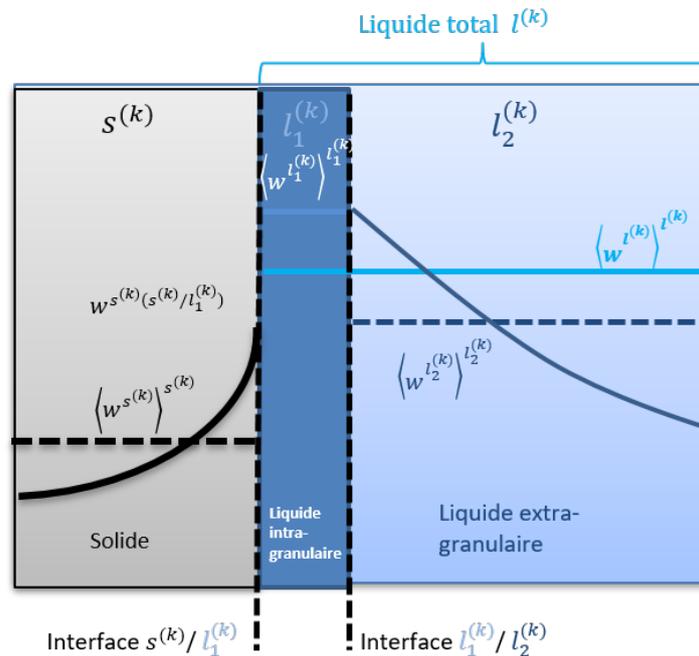


FIGURE 2.2: Profils de compositions dans les différentes phases.

La position du front détermine quel type de structure peut évoluer. On fait l'hypothèse forte suivante : si on se trouve derrière le front colonnaire, seule une structure colonnaire peut croître. Dans le cas contraire, seule une structure

équiaxe peut croître et être transportée. Si, avant le passage du front colonnaire, une structure équiaxe a été créée mais sans bloquer le front colonnaire, ces grains équiaxes précédemment créés sont intégrés à la structure colonnaire. Toutefois, on garde l'historique des grains équiaxes qui se sont formés. Ceci veut dire qu'on gardera l'information à propos de la densité, de la fraction solide, de la fraction des enveloppes des grains équiaxes qui se sont formés avant d'être intégrés dans la zone colonnaire. Toutefois, on ne permet plus leur croissance d'une manière séparée à l'intérieur de la structure colonnaire. Leur présence sera, toutefois, prise en considération lors de l'arrivée du front. On considèrera, notamment, l'enrichissement du liquide en soluté du à la présence des grains équiaxes. Ceci va être expliqué plus dans le paragraphe [2.3.1](#) dans la partie décrivant l'apparition des sous-structures colonnaires.

## 1.2 Suivi du front colonnaire

Après l'étude de plusieurs approches utilisées pour décrire l'avancée du front [\[18\]](#), [\[19\]](#), [\[34\]](#), [\[38\]](#), le choix a été fait d'utiliser la méthode Level Set [\[39\]](#), [\[40\]](#).

Dans le contexte de la méthode Level Set, deux sous domaines sont définis : un domaine derrière le front colonnaire et un domaine devant le front colonnaire, séparés par une interface  $\psi = 0$  où  $\psi = \psi(x, t)$  est la fonction distance signée par rapport à l'interface schématisée sur la figure [2.1](#) [\[41\]](#). La fonction distance est convectée selon l'équation suivante :

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \mathbf{v}_{front} \cdot \nabla \psi = 0 \quad (1.1)$$

avec  $\mathbf{v}_{front}$  la vitesse d'avancée du front colonnaire.

Le choix a été fait de prendre le gradient de la température normé pour définir la direction de  $\mathbf{v}_{front}$  :

$$\mathbf{v}_{front} = v_{front} \frac{\nabla T}{\|\nabla T\|} \quad (1.2)$$

Le calcul de  $v_{front}$  est décrit au niveau du paragraphe [1.2.1](#) suivant. Le fait d'employer une méthode de suivi de front colonnaire par l'approche Level Set

est associé à la résolution par éléments finis. Ceci permet de s'affranchir de la zone mixte comme mise en œuvre par Leriche [9].

**Notion de variable globale ou totale :** On appellera variable globale ou totale une variable qui n'est pas relative à une seule structure. Comme les structures équiaxes qui se sont formés avant le passage du front sont intégrés à la zone colonnaire, alors si on se trouve derrière le front colonnaire, la variable globale est égale à celle de la structure colonnaire  $X^{\alpha(1)}$  sinon elle est égale à celle de la structure équiaxe  $X^{\alpha(2)}$  avec  $\alpha = s$  ou  $\alpha = l$ .

$$X^\alpha = \begin{cases} X^{\alpha(2)} & \text{si } \psi \leq 0 \\ X^{\alpha(1)} & \text{si } \psi > 0 \end{cases} \quad (1.3)$$

avec  $\alpha = s$  désignant la phase solide ou  $\alpha = l$  désignant le liquide totale (liquide intragranulaire +liquide extragranulaire).

### 1.2.1 Calcul de la vitesse du front

Pour calculer la vitesse front, on utilise le modèle KGT [42] pour la croissance des pointes de dendrites qui a été décrit sous sa forme la plus générale dans le paragraphe 1.2.3 du chapitre 1. Dans ce cas particulier de croissance colonnaire, la surfusion solutale et de courbure seront considérées comme moteurs de l'avancement du front et la surfusion thermique sera négligée.

Dans ce cas la composition à l'interface est  $w^{l(s/l)} = w_1^{l_1^{(k)}(s^{(k)}/l_1^{(k)})}$ , la composition vue par les pointes de dendrites est celle du liquide total devant le front  $w^{l\infty} = \langle w^l \rangle^l$ . Par la suite, la surfusion solutale est

$$\Delta T_w = -m^l (w_1^{l_1^{(k)}(s^{(k)}/l_1^{(k)})} - \langle w^l \rangle^l) = m_l \langle w^l \rangle^l \left( 1 - \frac{1}{1 - (1 - k)\Omega_w} \right) \quad (1.4)$$

La surfusion due à la courbure est

$$\Delta T_R = \frac{2\Gamma}{R_{pointe}} \quad (1.5)$$

Avec  $\Gamma$  le coefficient de Gibbs-Thomson. La surfusion totale est

$$\Delta T = \Delta T_w + \Delta T_R \quad (1.6)$$

En utilisant les définitions précédentes, on obtient l'équation suivante :

$$\Delta T = -m_l \langle w^l \rangle^l \left[ \frac{(1-k)Iv(Pe_w)}{1 - (1-k)Iv(Pe_w)} \right] + \frac{2\Gamma}{R_{pointe}} \quad (1.7)$$

avec

$$\Delta T = T_f + m_l \langle w^l \rangle^l - T \quad (1.8)$$

Par la suite, avec le critère de stabilité marginale [43] et en négligeant le gradient thermique, le rayon de pointe est estimé selon l'équation suivante :

$$R_{pointe} = 2\pi \sqrt{\frac{\Gamma}{m_l G_w^{s^{(k)}/l_1^{(k)}}}} = 4\pi^2 \Gamma \left( -\frac{2Pe_w m_l \langle w^{l_2^{(1)}} \rangle^{l_2^{(1)}} (1-k)}{1 - (1-k)Iv(Pe_w)} \right)^{-1} \quad (1.9)$$

avec

$$G_w^{s^{(k)}/l_1^{(k)}} = -v_{front} (1-k) w^{l_1^{(k)}(s^{(k)}/l_1^{(k)})} / D^l \quad (1.10)$$

$G_w^{s^{(k)}/l_1^{(k)}}$  étant le gradient chimique à l'interface  $s^{(k)}/l_1^{(k)}$ . En introduisant l'expression de  $R_{pointe}$  dans l'équation [1.7], on obtient une équation dont le seul inconnue est le nombre de Péclet solutal  $Pe_w$ . On utilisera, par la suite, la méthode de Brent [44] pour la trouver. Enfin, en utilisant la définition du nombre de Péclet, on déduit le rayon de pointe et la vitesse :

$$v_{front} = \frac{2D^l Pe_w}{R_{pointe}} \quad (1.11)$$

Le résultat de la routine a été comparé à un calcul de référence et les résultats coïncident. A chaque pas de temps, un champ de vitesses de pointes est calculé selon le modèle précédemment décrit. Par la suite, on remet à zero les vitesses calculées sauf dans une bande autour de la position 0 de la fonction Level Set d'une largeur de l'ordre d'une taille de maille comme montré à la figure [2.3]. On utilise ensuite ce dernier champ pour convecter la fonction Level Set.

Pour assurer que la fonction obtenue après convection est toujours une fonction distance i.e qu'elle a la propriété eikonal :  $\|\nabla\psi\| = 1$ , une étape appelée de réinitialisation est réalisée [45] permettant de calculer géométriquement les nouvelles valeurs de la fonction  $\psi$  à partir de sa position  $\psi = 0$  de manière à assurer un gradient unitaire.

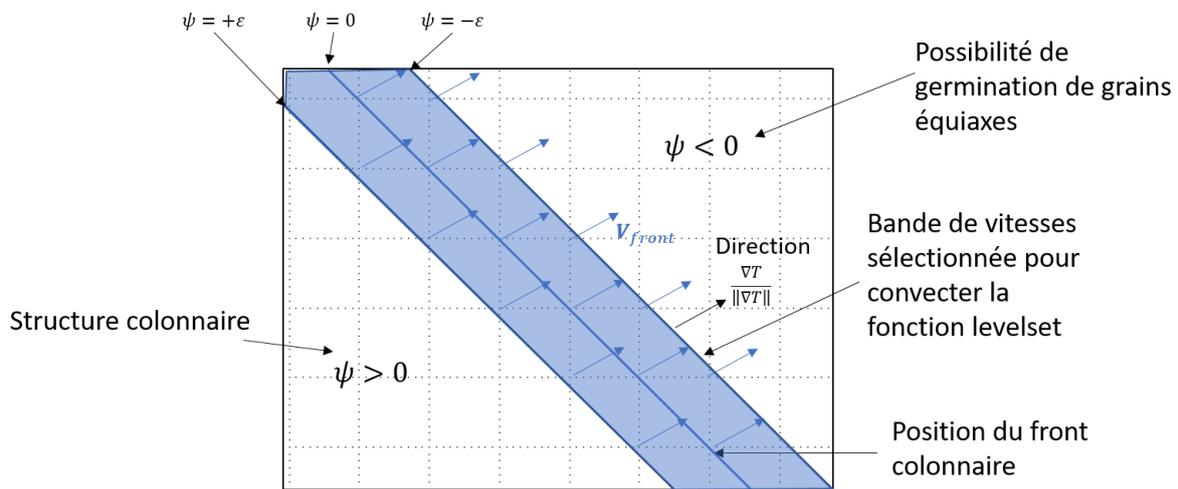


FIGURE 2.3: Représentation de la méthode de convection de la fonction levelset et détermination de la position du front et des structures.

## 1.2.2 Blocage du front et transition colonnaire-équiaxe

### Blocage mécanique

D'une part, le front colonnaire peut être bloqué mécaniquement selon le critère de Hunt [15] qui est décrit dans le paragraphe 1.3.1 du 1<sup>er</sup> chapitre. Dans le cadre d'un modèle dendritique, on se base sur la fraction d'enveloppe de grains équiaxes pour déterminer l'arrêt ou la poursuite de l'avancement du front. Si la fraction d'enveloppe (solide + liquide intragranulaire) des grains équiaxes  $g^{env(2)}$  est supérieure à une valeur limite  $g_{Hunt}$  ( $g^{env(2)} > g_{Hunt}$ ), le front colonnaire est mécaniquement bloqué. Dans le cas contraire, le front continue sa progression.

### Blocage solutal

D'autre part, le front est bloqué solutalement quand le liquide devant le front

est suffisamment enrichi par le soluté. Comme le moteur principal de la croissance du front colonnaire est la différence entre la composition interfaciale et la composition du liquide devant le front ( $\Delta w = w_1^{l^{(k)}}(s^{(k)}/l_1^{(k)}) - \langle w^l \rangle^l$ ), l'enrichissement du liquide diminue la vitesse d'avancée du front. Par la suite, le front est solutalement bloqué car sa vitesse est considérablement réduite.

### 1.3 Equations de conservation moyennées

L'évolution du système suivant notre modèle est décrite par les équations de conservation suivantes : la conservation de l'énergie, la conservation de la masse totale et de la masse de soluté ainsi que la conservation de la quantité de mouvement déterminée pour chaque phase, solide et liquide, présentées successivement dans cette partie.

Avec l'hypothèse du paragraphe [1.1](#) du 1<sup>er</sup> chapitre suivant laquelle les bras colonnaires sont formés de sous-structures semblables aux grains équiaxes, l'ensemble des équations suivantes décrivent à la fois la croissance des sous-structures colonnaires et les grains équiaxes. La différence majeure reste le fait que les sous-structures colonnaires ont un mécanisme d'apparition qui est différent de celui des grains équiaxes. En effet, contrairement aux grains équiaxes qui apparaissent suivant un critère (e.g., lorsque, le liquide atteint une certaine surfusion de germination  $\Delta T_N$ ), les sous-structures colonnaires sont guidées par la croissance du front colonnaire telle que décrite dans le paragraphe [1.2](#) précédent. De plus, lors de l'apparition des sous-structures colonnaires, on tiendra compte de l'apparition préalable des grains équiaxes dans le milieu si celle-ci est intervenue. Ceci sera décrit en détail dans le paragraphe [2.3.1](#) de ce chapitre.

Les équations sont écrites sous leur forme moyennée. On part des équations locales de conservation qu'on moyenne sur un VER comme décrit à l'annexe [A](#). Par la suite, ces équations décrivent l'évolution des grandeurs moyennes, notées  $\langle x \rangle$ , des quantités  $x$ .

### 1.3.1 Conservation de l'énergie

La résolution de l'équation de conservation de l'énergie permet d'obtenir l'évolution de l'enthalpie moyenne du VER dans le système. Cette équation a été établie dans le cadre des travaux de Nguyen [26] pour un système où seule la structure équiaxe peut évoluer. On gardera la même équation dans le cadre de notre travail à la différence que toutes les variables qui sont dans l'équation sont des variables globales égales à celles de la zone colonnaire si on est derrière le front colonnaire et à celles de la zone équiaxe si on est devant le front colonnaire.

Parmi les hypothèses les plus importantes qui ont été utilisées pour établir cette équation, il faut noter que :

- Les densités des phases solide et liquide, respectivement  $\langle \rho^l \rangle^l$  et  $\langle \rho^s \rangle^s$ , sont constantes et égales, notées  $\rho$ .

$$\langle \rho^l \rangle^l = \langle \rho^s \rangle^s = \rho \quad (1.12)$$

- La température des deux phases solide et liquide est supposée identique en raison d'une grande diffusivité thermique.

$$\langle T^l \rangle^l = \langle T^s \rangle^s = T \quad (1.13)$$

On aboutit ainsi à l'équation :

$$\begin{aligned} & \rho \left[ \frac{\partial}{\partial t} \langle h \rangle + \langle \mathbf{v} \rangle \cdot \nabla \langle h \rangle - \nabla \cdot (D_M \nabla \langle h \rangle) \right] - \nabla \cdot (\langle \kappa \rangle \nabla T) \\ & = \rho \left[ -\nabla \cdot \left( g^s \langle h^s \rangle^s \langle \mathbf{v}^s \rangle^s + g^l \langle h^l \rangle^l \langle \mathbf{v}^l \rangle^l \right) + \nabla \cdot (\langle \mathbf{v} \rangle \langle h \rangle) \right] \end{aligned} \quad (1.14)$$

avec  $\langle h \rangle$  l'enthalpie moyenne à l'échelle du VER,  $\langle \mathbf{v} \rangle = g^l \langle \mathbf{v}^l \rangle^l + g^s \langle \mathbf{v}^s \rangle^s$  la vitesse moyenne,  $\langle \mathbf{v}^s \rangle^s$  la vitesse intrinsèque du solide,  $\langle \mathbf{v}^l \rangle^l$  la vitesse intrinsèque du liquide,  $\langle \kappa \rangle$  la conductivité thermique moyenne,  $\rho$  la masse volumique,  $g^s$  et  $g^l$  successivement les fractions solide et liquide,  $T$  la température et  $D_M$  un coefficient de diffusion artificielle dont l'utilité et l'expression vont être explicitées au paragraphe 2.2.

Dans ce qui suit, nous allons présenter les bilans interfaciaux, de masse totale et de masse de soluté totale pour des quantités moyennés sur le VER. Le passage des bilans locaux à ceux moyennés est expliqué en détail dans l'annexe [A](#).

### 1.3.2 Bilans interfaciaux

Les bilans interfaciaux sont obtenus en appliquant les équations [\(4.6\)](#) et [\(4.8\)](#) de l'annexe [A](#) successivement au niveau des interfaces solide  $s^{(k)}$  / liquide intragranulaire  $l_1^{(k)}$  et liquide intragranulaire  $l_1^{(k)}$  / liquide extragranulaire  $l_2^{(k)}$  :

**Interface solide  $s^{(k)}$  / liquide intragranulaire  $l_1^{(k)}$**

Bilan de masse :

$$\Gamma^{s^{(k)}/l_1^{(k)}} + \Gamma^{l_1^{(k)}/s^{(k)}} = 0 \quad (1.15)$$

Bilan de soluté :

$$w^{s^{(k)}/l_1^{(k)}} \Gamma^{s^{(k)}/l_1^{(k)}} + w^{l_1^{(k)}/s^{(k)}} \Gamma^{l_1^{(k)}/s^{(k)}} - J_n^{s^{(k)}/l_1^{(k)}} - J_n^{l_1^{(k)}/s^{(k)}} = 0 \quad (1.16)$$

où  $\Gamma^{\alpha/\beta}$  est le taux de production de la phase  $\alpha$  à l'interface  $\alpha/\beta$  du à la croissance,  $J_n^{\alpha(\alpha/\beta)}$  est le flux interfacial de soluté échangé à l'interface  $\alpha/\beta$  par diffusion dans la phase  $\alpha$ , avec  $(\alpha, \beta) \in \{s^{(k)}, l_1^{(k)}\}$  et  $k \in \{1, 2\}$ .

**Interface liquide intragranulaire  $l_1^{(k)}$  / liquide extragranulaire  $l_2^{(k)}$**

Bilan de masse :

$$\Gamma^{l_1^{(k)}/l_2^{(k)}} + \Gamma^{l_2^{(k)}/l_1^{(k)}} = 0 \quad (1.17)$$

Bilan de soluté :

$$w^{l_1^{(k)}(l_1^{(k)}/l_2^{(k)})\Gamma^{l_1^{(k)}/l_2^{(k)}} + w^{l_2^{(k)}(l_1^{(k)}/l_2^{(k)})\Gamma^{l_2^{(k)}/l_1^{(k)}} - J_n^{l_1^{(k)}(l_1^{(k)}/l_2^{(k)})} - J_n^{l_2^{(k)}(l_1^{(k)}/l_2^{(k)})} = 0 \quad (1.18)$$

avec  $\Gamma^{\alpha/\beta}$  le taux d'évolution de l'enveloppe définie par l'interface  $\alpha/\beta$ ,  $J_n^{\alpha(\alpha/\beta)}$  le flux interfacial de soluté échangé à l'interface  $\alpha/\beta$  par diffusion dans la phase  $\alpha$ , avec  $(\alpha, \beta) \in \{l_1^{(k)}, l_2^{(k)}\}$  et  $k \in \{1, 2\}$ .

### 1.3.3 Bilans de masse totale par phase

**Solide**  $s^{(k)}$

En appliquant l'équation (4.2) à la phase solide  $s^{(k)}$ , on obtient

$$\frac{\partial}{\partial t}(g^{s^{(k)}} \rho^s) + \text{div}(g^{s^{(k)}} \rho^s \langle \mathbf{v}^{s^{(k)}} \rangle^{s^{(k)}}) = \Gamma^{s^{(k)}/l_1^{(k)}} + \Phi^{s^{(k)}} \quad (1.19)$$

avec  $\Phi^{s^{(k)}}$  le taux de formation du solide dû à la germination. Cette équation traduit le fait que l'évolution de la fraction solide est due au transport des grains,  $\text{div} \left( g^{s^{(k)}} \rho^s \langle \mathbf{v}^{s^{(k)}} \rangle^{s^{(k)}} \right)$ , à la croissance,  $\Gamma^{s^{(k)}/l_1^{(k)}}$ , à la germination des grains dans le cas équiaxe,  $\Phi^{s^{(2)}}$  ou à l'apparition de nouvelles sous-structures dans le cas colonnaire,  $\Phi^{s^{(1)}}$ .

**Liquide intragranulaire**  $l_1^{(k)}$

En appliquant l'équation (4.2) (Annexe A) avec  $\alpha = l_1^{(k)}$  et en utilisant l'équilibre de masse au niveau de l'interface  $s^{(k)}/l_1^{(k)}$  (équation 1.15) on obtient

$$\frac{\partial}{\partial t}(g^{l_1^{(k)}} \rho^l) + \text{div}(g^{l_1^{(k)}} \rho^l \langle \mathbf{v}^{l_1^{(k)}} \rangle^{l_1^{(k)}}) = \Gamma^{l_1^{(k)}/l_2^{(k)}} - \Gamma^{s^{(k)}/l_1^{(k)}} - \Phi^{s^{(k)}} \quad (1.20)$$

Cette équation traduit le fait que l'évolution temporelle de la fraction du liquide intragranulaire est due, d'une part, au transport,  $\text{div} \left( g^{l_1^{(k)}} \rho^l \langle \mathbf{v}^{l_1^{(k)}} \rangle^{l_1^{(k)}} \right)$ , d'autre part aux échanges avec le solide,  $-\Gamma^{s^{(k)}/l_1^{(k)}}$ , le liquide extragranulaire,

$\Gamma_{l_1^{(k)}/l_2^{(k)}}$  ou encore à la germination,  $-\Phi^{s^{(k)}}$ .

**Liquide extragranulaire**  $l_2^{(k)}$

En appliquant l'équation (4.2) avec  $\alpha = l_2^{(k)}$  et en utilisant l'équation d'équilibre de masse totale au niveau de l'interface ( $l_1^{(k)}/l_2^{(k)}$ ) (Eq. 1.17) :

$$\frac{\partial}{\partial t}(g^{l_2^{(k)}} \rho^l) + \text{div}(g^{l_2^{(k)}} \rho^l \langle \mathbf{v}^{l_2^{(k)}} \rangle^{l_2^{(k)}}) = -\Gamma_{l_1^{(k)}/l_2^{(k)}} \quad (1.21)$$

Cette équation traduit l'évolution de la fraction du liquide extragranulaire, due à l'échange avec le liquide intragranulaire,  $-\Gamma_{l_1^{(k)}/l_2^{(k)}}$  ou au transport,  $\text{div} \left( g^{l_2^{(k)}} \rho^l \langle \mathbf{v}^{l_2^{(k)}} \rangle^{l_2^{(k)}} \right)$ .

### 1.3.4 Bilans de masse de soluté par phase

**Solide**  $s^{(k)}$

En appliquant l'équation (4.4) avec  $\alpha = s^{(k)}$ , on obtient l'équation suivante :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(g^{s^{(k)}} \rho^s \langle w^{s^{(k)}} \rangle^{s^{(k)}}) + \text{div}(g^{s^{(k)}} \rho^s \langle w^{s^{(k)}} \rangle^{s^{(k)}} \langle \mathbf{v}^{s^{(k)}} \rangle^{s^{(k)}}) \\ & = w^{s^{(k)}(s^{(k)}/l_1^{(k)})} \Gamma_{s^{(k)}/l_1^{(k)}} - J_n^{s^{(k)}(s^{(k)}/l_1^{(k)})} + \Phi^{s^{(k)}} k \langle w^{l^{(k)}} \rangle^{l^{(k)}} \end{aligned} \quad (1.22)$$

Cette équation traduit la variation de la masse de soluté dans la phase solide, due d'une part au transport du solide,  $\text{div} \left( g^{s^{(k)}} \rho^s \langle w^{s^{(k)}} \rangle^{s^{(k)}} \langle \mathbf{v}^{s^{(k)}} \rangle^{s^{(k)}} \right)$ , à la croissance de la phase solide,  $w^{s^{(k)}(s^{(k)}/l_1^{(k)})} \Gamma_{s^{(k)}/l_1^{(k)}}$ , à la diffusion dans le solide depuis l'interface solide/liquide intragranulaire,  $-J_n^{s^{(k)}(s^{(k)}/l_1^{(k)})}$ , et à la germination,  $\Phi^{s^{(k)}} k \langle w^{l^{(k)}} \rangle^{l^{(k)}}$ .

**Liquide intragranulaire**  $l_1^{(k)}$

En appliquant l'équation (4.4) avec  $\alpha = l_1^{(k)}$  et en utilisant l'équilibre de masse

au niveau de l'interface  $s^{(k)}/l_1^{(k)}$  (Eq. 1.15) on obtient :

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial}{\partial t} (g^{l_1^{(k)}} \rho^l \langle w^{l_1^{(k)}} \rangle^{l_1^{(k)}}) + \text{div} (g^{l_1^{(k)}} \rho^l \langle w^{l_1^{(k)}} \rangle^{l_1^{(k)}} \langle \mathbf{v}^{l_1^{(k)}} \rangle^{l_1^{(k)}}) \\
 & = w^{l_1^{(k)}}(l_1^{(k)}/l_2^{(k)}) \Gamma^{l_1^{(k)}/l_2^{(k)}} - w^{l_1^{(k)}}(s^{(k)}/l_1^{(k)}) \Gamma^{s^{(k)}/l_1^{(k)}} - J_n^{l_1^{(k)}}(s^{(k)}/l_1^{(k)}) \\
 & - J_n^{l_1^{(k)}}(l_1^{(k)}/l_2^{(k)}) - \Phi^{s^{(k)}} k \langle w^{l_1^{(k)}} \rangle^{l_1^{(k)}}
 \end{aligned} \tag{1.23}$$

Cette équation traduit la variation du soluté dans le liquide intragranulaire, due au transport du liquide,  $\text{div} \left( g^{l_1^{(k)}} \rho^l \langle w^{l_1^{(k)}} \rangle^{l_1^{(k)}} \langle \mathbf{v}^{l_1^{(k)}} \rangle^{l_1^{(k)}} \right)$ , aux échanges par croissance avec le solide et le liquide extragranulaire,  $w^{l_1^{(k)}}(l_1^{(k)}/l_2^{(k)}) \Gamma^{l_1^{(k)}/l_2^{(k)}} - w^{l_1^{(k)}}(s^{(k)}/l_1^{(k)}) \Gamma^{s^{(k)}/l_1^{(k)}}$ , à la diffusion depuis les interfaces solide/liquide intragranulaire et liquide intragranulaire /liquide extragranulaire,  $-J_n^{l_1^{(k)}}(s^{(k)}/l_1^{(k)}) - J_n^{l_1^{(k)}}(l_1^{(k)}/l_2^{(k)})$  et à la germination  $-\Phi^{s^{(k)}} k \langle w^{l_1^{(k)}} \rangle^{l_1^{(k)}}$ .

### Liquide extragranulaire $l_2^{(k)}$

En appliquant l'équation (4.4) avec  $\alpha = l_2^{(k)}$  et en utilisant l'équation d'équilibre de masse au niveau de l'interface  $l_1^{(k)}/l_2^{(k)}$  (Eq. 1.17) on obtient :

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial}{\partial t} (g^{l_2^{(k)}} \rho^l \langle w^{l_2^{(k)}} \rangle^{l_2^{(k)}}) + \text{div} (g^{l_2^{(k)}} \rho^l \langle w^{l_2^{(k)}} \rangle^{l_2^{(k)}} \langle \mathbf{v}^{l_2^{(k)}} \rangle^{l_2^{(k)}}) \\
 & = -w^{l_2^{(k)}}(l_1^{(k)}/l_2^{(k)}) \Gamma^{l_1^{(k)}/l_2^{(k)}} - J_n^{l_2^{(k)}}(l_1^{(k)}/l_2^{(k)})
 \end{aligned} \tag{1.24}$$

Cette équation traduit la variation du soluté dans le liquide extragranulaire due au transport du liquide,  $\text{div} \left( g^{l_2^{(k)}} \rho^l \langle w^{l_2^{(k)}} \rangle^{l_2^{(k)}} \langle \mathbf{v}^{l_2^{(k)}} \rangle^{l_2^{(k)}} \right)$ , aux échanges par croissance avec le liquide intragranulaire,  $-w^{l_2^{(k)}}(l_1^{(k)}/l_2^{(k)}) \Gamma^{l_1^{(k)}/l_2^{(k)}}$ , et à la diffusion depuis l'interface entre le liquide intragranulaire et le liquide extragranulaire,  $-J_n^{l_2^{(k)}}(l_1^{(k)}/l_2^{(k)})$ .

### 1.3.5 Bilan de conservation de la densité de grains

L'évolution de la densité  $N^{(k)}$  des grains équiaxes et des sous structures colonnaires est décrite par l'équation suivante :

$$\frac{\partial N^{(k)}}{\partial t} + \nabla \cdot (N^{(k)} \langle \mathbf{v}^{s^{(k)}} \rangle^{s^{(k)}}) = \dot{N}^k \quad (1.25)$$

avec  $\langle \mathbf{v}^{s^{(k)}} \rangle^{s^{(k)}}$  la vitesse de transport, considérée nulle dans le cas des sous-structures colonnaires et  $\dot{N}^k$  le terme source dû à l'apparition des grains équiaxes ou sous-structures colonnaires.

Pour les grains équiaxes, plus particulièrement, la variation de leur densité  $N^{(2)}$  est due, à l'échelle microscopique, à deux sources : la fragmentation  $\Phi_{frag}$  et la germination hétérogène,  $\Phi_{nucl}$ .

$$\dot{N}^{(2)} = \Phi_{nucl} + \Phi_{frag} \quad (1.26)$$

avec

$$\Phi_{nucl} = \begin{cases} \frac{N_0}{dt} & \text{si } \Delta T > \Delta T_N \text{ et } N^{(2)} = 0 \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (1.27)$$

où  $N_0$  est la densité des germes initiaux et  $\Delta T_N$  la surfusion à laquelle la germination des grains équiaxes est activée.

La fragmentation est un mécanisme important des coulées non-inoculés d'aciers. Souvent à partir de la zone de peau ou encore au cours de solidification plus tard, des fragments peuvent se détacher à partir de la zone colonnaire.

D'un point de vue pratique, on calcule la contribution de la fragmentation dans un élément P de volume  $V_0$  selon la formule suivante :

$$\Phi_{frag} = \frac{1}{V_0} \iint_{S_{\psi/P}} \varphi_{frag} ds \quad (1.28)$$

avec  $S_{\psi/P}$  la surface d'intersection entre l'élément P et une isovaleur de la fonction Level Set  $\psi$  qui se trouve devant le front colonnaire et  $\varphi_{frag}$  un flux de fragmentation à préciser. Plus d'explication sur cette manière pratique de modélisation de la fragmentation sera présenté dans le paragraphe [2.3.1](#). En

s'inspirant des travaux de Leriche [9] qui a montré l'importance d'un critère sur le gradient thermique pour activer la fragmentation pour mieux prédire les résultats, la fragmentation dans notre cas n'est activée que lorsque le gradient de la température au niveau de l'élément P :  $\|\nabla T\| < \|\nabla T\|_{critique}$  où  $\|\nabla T\|_{critique}$  est une valeur seuil de déclenchement de la fragmentation.

Pour les structures colonnaires, l'évolution de la densité des sous-structures colonnaires est déterminée de la manière suivante :

$$\dot{N}^{(1)} = \frac{1}{dt} \left( \frac{1}{\lambda_1^3} + N^{(2)} \right) \quad \text{si } \psi > 0 \text{ et } N^{(1)} = 0 \quad (1.29)$$

avec  $1/\lambda_1^3$  est la densité des sous-structures colonnaires justifiée par Leriche [9].  $N^{(2)}$  désigne la densité des grains équiaxes qui ont germé sans pouvoir bloquer le front car on fait l'hypothèse que ces grains sont intégrés à la structure colonnaire.

### 1.3.6 Bilan de l'enveloppe

$$\frac{\partial g^{(env^{(k)})}}{\partial t} + \nabla \cdot (g^{(env^{(k)})} \langle \mathbf{v}^{s^{(k)}} \rangle^{s^{(k)}}) = \Gamma^{env^{(k)}} \quad (1.30)$$

En pratique et en utilisant la méthode de la séparation des échelles (splitting [31]), on détermine l'évolution de  $g^{(env^{(k)})}$  dû au transport dans un premier lieu. Ensuite, on détermine l'évolution de  $g^{(env^{(k)})}$  par croissance en déterminant l'évolution du rayon de l'enveloppe  $R^{env^{(k)}}$ .

Pour calculer la vitesse de croissance des enveloppes, le modèle KGT [42] pour la croissance des pointes de dendrites, qui a été décrit sous sa forme la plus générale dans le paragraphe 1.2.3 du chapitre 1, est utilisé. Dans ce cas particulier de croissance équiaxe ou de sous-structures colonnaires, les surfusions solutale ainsi que thermique seront considérées comme moteurs de l'avancement des pointes de dendrites et la surfusion de courbure sera négligée.

La surfusion thermique n'est pas négligée dans ce cas contrairement au cas précédent (paragraphe 1.2.1), décrivant la croissance des pointes de dendrites colonnaires, et qui visait à déterminer la nouvelle position du front. En fait, la

surfusion thermique est négligée dans le cas du front colonnaire car ce mode de croissance est contraint i.e. le gradient thermique est imposé et la chaleur est extraite dans le solide. Toutefois, pour les grains équiaxes, la croissance est non contrainte. En solidifiant, les grains libèrent de la chaleur latente dans le liquide, ce qui peut influencer, par la suite, leur croissance. Le gradient thermique devant les pointes est inversé.

La composition à l'interface est  $w^{l_1^{(k)}(s^{(k)}/l_1^{(k)})}$ , la composition vue par les pointes de dendrites est celle du liquide extragranulaire  $w^{l_\infty} = \langle w^{l_2^{(k)}} \rangle^{l_2^{(k)}}$ .

Par la suite la surfusion totale est la somme de la surfusion solutale  $\Delta T_w$  et de la surfusion thermique  $\Delta T_{th}$  :

$$\Delta T = \Delta T_w + \Delta T_{th} \quad (1.31)$$

avec

$$\Delta T_w = -m_l \left( w^{l_1^{(k)}(s^{(k)}/l_1^{(k)})} - \langle w^{l_2^{(k)}} \rangle^{l_2^{(k)}} \right) = m_l \langle w^{l_2^{(k)}} \rangle^{l_2^{(k)}} \left( 1 - \frac{1}{1 - (1 - k)\Omega_w} \right) \quad (1.32)$$

et

$$\Delta T_{th} = \frac{L_f}{c_p} \Omega_{th} \quad (1.33)$$

$$\Delta T = T_f + m_l \langle w^{l_2^{(k)}} \rangle^{l_2^{(k)}} - T \quad (1.34)$$

On utilise les deux définitions suivantes :

$$\Omega_{w/th} = \text{Iv}(Pe_{w/th}) \quad (1.35)$$

$$Pe_{w/th} = \frac{v_{pointe} R_{pointe}}{2D_{w/th}^l} \quad (1.36)$$

avec  $D_w^l$  et  $D_{th}^l$  sont respectivement les coefficients de diffusion solutal et thermique dans le liquide.

On obtient à partir de l'équation [1.31](#), une équation dont la seule inconnue est le produit  $R_{pointe} v_{pointe}$  qu'on détermine en utilisant la méthode de Brent.

Pour déterminer indépendamment le rayon de la pointe de dendrite  $R_{pointe}$  et sa vitesse  $v_{pointe}$ , on utilise le critère de stabilité marginale [43] :

$$R_{pointe} = 2\pi \sqrt{\frac{\Gamma}{m_l G_w^{s^{(k)}/l_1^{(k)}} - G_t}} \quad (1.37)$$

avec

$$G_w^{s^{(k)}/l_1^{(k)}} = -\frac{2Pe_w w^{l_1^{(k)}(s^{(k)}/l_1^{(k)})}(1-k)}{R_{pointe}} \xi_w \quad (1.38)$$

avec

$$\xi_w = 1 - \frac{2k}{(1 + (\frac{2\pi}{Pe_w})^2)^{0.5} - 1 + 2k} \quad (1.39)$$

et

$$G_t = -\frac{Pe_{th} L_f}{R_{pointe} c_p} \quad (1.40)$$

En utilisant la vitesse  $v_{pointe}$  calculée comme expliqué ci-dessus, on peut déterminer l'évolution de la fraction des enveloppes  $g^{env^{(k)}}$  selon l'équation ci-dessous :

$${}_{t_m+\delta t} g^{env^{(k)}} = \frac{4}{3} N^{(k)} ({}_{t_m+\delta t} v_{pointe} \delta t + {}_{t_m} R^{env^{(k)}})^3 \quad (1.41)$$

avec  ${}_{t_m+\delta t} g^{env^{(k)}}$  la fraction de l'enveloppe à l'instant  $t_m + \delta t$ ,  $t_m$  étant le temps micro et  $\delta t$  le pas de temps micro,  $N^{(k)}$  est la densité des grains équiaxes ou des sous-structures colonnaires,  ${}_{t_m} R^{env^{(k)}}$  le rayon de l'enveloppe à l'instant  $t_m$ , dans l'approche de la méthode de splitting (séparation des échelles [31]).

### 1.3.7 Conservation de la quantité de mouvement

Ces équations ont été reprises du travail de Nguyen [26] avec une modification (introduction d'un nouveau coefficient  $\alpha_t$ ) qui est liée à la prise en compte de la présence de la structure colonnaire et qui sera détaillée dans ce qui suit.

Nous présentons ces équations sous leur forme implémentées, c'est à dire en tenant compte de la méthode de splitting (séparation des échelles [31]) mise en œuvre pour résoudre le système d'équations.

**Pour le liquide**

Pour déterminer la vitesse du liquide ainsi que la pression, l'équation de conservation de la quantité de mouvement dans la phase liquide est résolue en plus de l'équation de continuité [26].

$$\begin{aligned} & \frac{\rho}{g^l} \left[ \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{v}^l \rangle_{tr} + \nabla \cdot \left( \langle \mathbf{v}^l \rangle_{tr} \otimes \langle \mathbf{v}^l \rangle^l \right) \right] \\ & = -\nabla p + \frac{\mu^l \nabla \cdot (\nabla \langle \mathbf{v}^l \rangle_{tr} + {}^T \nabla \langle \mathbf{v}^l \rangle_{tr})}{g^l} + \rho_B^l \mathbf{g} - \frac{\mathbf{M}^{d,s}}{g^l} \end{aligned} \quad (1.42)$$

$$\nabla \cdot \langle \mathbf{v}^l \rangle_{tr} = \nabla \cdot (g_{tr}^s \langle \mathbf{v}^s \rangle^s) \quad (1.43)$$

avec  $\rho$  la masse volumique du liquide,  $\langle \mathbf{v}^l \rangle^l$  la vitesse intrinsèque du liquide,  $\langle \mathbf{v}^l \rangle_{tr} = g_{tr}^l \langle \mathbf{v}^l \rangle^l$  avec  $g_{tr}^l$  la fraction du liquide après l'étape de transport (qui sera détaillée dans le paragraphe 2.2),  $p$  la pression,  $g^l$  la fraction du liquide,  $\mu^l$  la viscosité dynamique,  $\mathbf{g}$  le vecteur gravité,  $\langle \mathbf{v}^l \rangle^l$  la vitesse intrinsèque du liquide et  $g^s$  la fraction solide. On utilise ici l'approximation de Boussinesq. Ainsi la masse volumique du liquide  $\rho$  est supposé constante, à l'exception du terme de gravité où  $\rho^l$  est remplacé par  $\rho_B^l$  défini par :

$$\rho_B^l = \rho_{ref} \left( 1 - \beta_T (T - T_{ref}) - \beta_w (\langle w^l \rangle^l - w_{ref}) \right) \quad (1.44)$$

avec  $\rho_{ref}$  la densité à une température référence  $T_{ref}$  et à une concentration référence  $w_{ref}$ . Dans ce cas :  $\rho_{ref} = \rho$ , la valeur de la densité prise sur les phases liquide et solide précédemment.

$$\frac{\mathbf{M}^{d,s}}{g^l} = [\alpha_t \mathcal{M}_{slurry} + (1 - \alpha_t) \mathcal{M}_{packed}] (\langle \mathbf{v}^l \rangle_{tr} - g^l \langle \mathbf{v}^s \rangle^s) \quad (1.45)$$

où  $\mathbf{M}^{d,s}$  est la quantité de mouvement transférée due aux contraintes interfaciales et  $\alpha_t$  sera détaillée dans le paragraphe suivant.

Dans le cas où la fraction des enveloppes des grains équiaxes est inférieure

à celle de la limite de d'empilement 'packing', la phase solide est considérée comme un milieu continu et l'interaction solide/liquide est décrite selon le modèle de Agarwal et O'Neill [46].

$$\mathcal{M}_{slurry} = \frac{\frac{3g^s \rho C_{d\_ZC}}{4d_g} \|\langle \mathbf{v}^l \rangle^l - \langle \mathbf{v}^s \rangle^s\|}{(g^l)^2} \quad (1.46)$$

avec

$$C_{d\_ZC} = \frac{48C_{ke}g^s}{Re} + C_{ie} \quad (1.47)$$

$$C_{ke} = \begin{cases} \frac{25}{6} & \text{si } g^l \leq 0.5 \\ \frac{1}{2} \frac{(g^l)^3}{1-g^l} \frac{1+4.7(1-g^l)}{1-1.83(1-g^l)} & \text{si } g^l > 0.5 \end{cases} \quad (1.48)$$

$$C_{ie} = \begin{cases} \frac{7}{3} & \text{si } g^l \leq 0.5 \\ \frac{24(10^E - 1)}{Re[1 - 0.9(g^l - 0.25)^{1/3}(1-g^l)^{2/3}]^3} & \text{si } g^l > 0.5 \end{cases} \quad (1.49)$$

avec

$$E = 0.261Re^{0.369} - 0.105Re^{0.431} - \frac{0.124}{1 + (\log_{10} Re)^2} \quad (1.50)$$

Re est le nombre de Reynolds associé aux grains équiaxes :

$$Re = \frac{\rho d_g g^l}{\mu^l} \|\langle \mathbf{v}^l \rangle^l - \langle \mathbf{v}^s \rangle^s\| \quad (1.51)$$

avec  $C_{ke}$  et  $C_{ie}$  des coefficients de trainée,  $d_g$  le diamètre du grain équiaxe,  $\langle \mathbf{v}^s \rangle^s$  la vitesse intrinsèque du solide.

Dans le cas où la fraction d'enveloppe des grains équiaxes est supérieure à la limite d'empilement ou qu'on est dans la structure colonnaire, les grains solides sont considérés comme bloqués et forment un lit solide poreux fixe où le mouvement du liquide est drastiquement ralenti et modélisé par la loi de Carman-Kozeny pour la perméabilité :

$$\mathcal{M}_{Packed} = \frac{\mu^l}{K_{CK}} = \frac{180(1-g^l)^2 \mu^l}{\lambda_2^2 (g^l)^3} \quad (1.52)$$

où la perméabilité  $K_{CK}$  est définie par :

$$K_{CK} = \frac{\lambda_2^2 g^l{}^3}{180(1 - g^l)^2} \quad (1.53)$$

avec  $d_g$  le diamètre du grain,  $Re$  le nombre de Reynolds,  $\mu^l$  la viscosité dynamique,  $\lambda_2$  la distance interdendritique secondaire,  $\rho$  la densité.  $g^l$  et  $g^s$  sont respectivement les fractions liquide et solide.

### Pour le solide

Les grains équiaxes peuvent bouger mais seulement devant le front colonnaire tant que leur fraction d'enveloppe n'a pas atteint une limite appelée limite de "packing"  $g_c^{env(2)}$ . La figure 2.4 ci dessous présente 3 différentes zones : une zone limitée par une ligne noire qui représente la zone colonnaire, une deuxième zone limitée par une ligne rouge qui présente la zone des grains empilés i.e. la zone ou  $g^{env(2)} \geq g_c^{env(2)}$  et une troisième zone limitée par une ligne verte discontinue qui est la zone où le mouvement du solide est annulé qui est l'union des deux zones précédentes.

La zone empilée peut se trouver derrière le front colonnaire car généralement la fraction d'empilement critique  $g_c^{env(2)}$  est inférieure à la limite de blocage mécanique  $g_{Hunt}$ . En conséquence, le front colonnaire peut avancer sans être bloqué et dépasser la limite de la zone empilée.

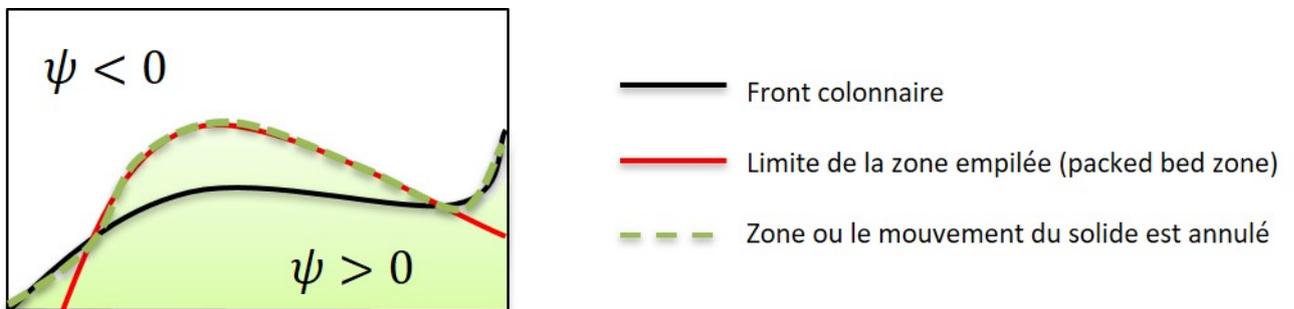


FIGURE 2.4: Représentation de la zone où le mouvement du solide est annulé.

En se basant sur les travaux de Nguyen [26] pour la description du mouvement des grains équiaxes, on résout la conservation de la quantité de mouvement

pour la phase solide totale :

$$-g^s \nabla p + g^s \rho_B^s \mathbf{g} + \mathbf{M}^{d,s} = 0 \quad (1.54)$$

en utilisant

$$\mathbf{M}^{d,s} = \mathcal{M}_{regime} (g^l)^2 \left( \langle \mathbf{v}^l \rangle^l - \langle \mathbf{v}^s \rangle^s \right) \quad (1.55)$$

avec  $\mathcal{M}_{regime} = \mathcal{M}_{slurry}$  ou  $\mathcal{M}_{regime} = \mathcal{M}_{Packed}$  définis dans le paragraphe précédent. On obtient pour la zone où les grains équiaxes sont en mouvement :

$$\langle \mathbf{v}^s \rangle^s = \langle \mathbf{v}^l \rangle^l + \frac{g^s (\rho_B^s g \mathbf{u}_g - \nabla p)}{\mathcal{M}_{slurry} (g^l)^2} \quad (1.56)$$

avec  $\mathbf{u}_g$  le vecteur unitaire de gravité. Pour ne pas avoir un passage abrupt entre la zone où les grains équiaxes sont en mouvement et la zone où la structure des grains est fixe, on utilise l'expression :

$$\langle \mathbf{v}^s \rangle^s = \alpha_t \left( \langle \mathbf{v}^l \rangle^l + \frac{g^s (\rho_B^s g \mathbf{u}_g - \nabla p)}{\mathcal{M}_{slurry} (g^l)^2} \right) \quad (1.57)$$

avec

$$\alpha_t = \alpha_{g^{env(2)}} \times \alpha_\psi \quad (1.58)$$

tel que

$$\alpha_{g^{env(2)}} = 0.5(1 + \tanh(\alpha_0 (g_c^{env(2)} - g^{env(2)}))) \quad (1.59)$$

est un coefficient introduit par Nguyen [26] pour séparer la résolution entre le domaine où les grains équiaxes sont empilés (packed bed) et celui où les grains peuvent bouger .

$$\alpha_\psi = 0.5(1 + \tanh(-\alpha_1 (\psi + \varepsilon_x))) \quad (1.60)$$

$\alpha_\psi$  est un coefficient introduit dans le cadre du travail actuel afin de prendre en considération la zone colonnaire où les sous-structures sont immobiles.  $\varepsilon_x$  est une valeur de l'ordre d'une à deux tailles de maille pour que la vitesse soit

complètement nulle au niveau du front et qu'il n'y ait pas de vitesse parasite derrière le front colonnaire, ce qui peut entraîner un mouvement artificiel de grains de la zone colonnaire vers la zone équiaxe.

La fonction  $\alpha_{g^{env(2)}}$  est égale à 1 quand  $g^{env(2)} \leq g_c^{env(2)}$ , 0 et avec une transition progressive entre les deux valeurs. La fonction  $\alpha_\psi$ , quand à elle, vaut 1 quand  $\psi < 0$  (devant le front colonnaire) et 0 sinon. La multiplication des deux fonctions fait qu'on a une fonction  $\alpha_t$  qui vaut 1 tant qu'on est devant le front colonnaire et qu'on est dans une zone où les grains ne sont pas empilés ce qui est représentée sur la figure 2.5.

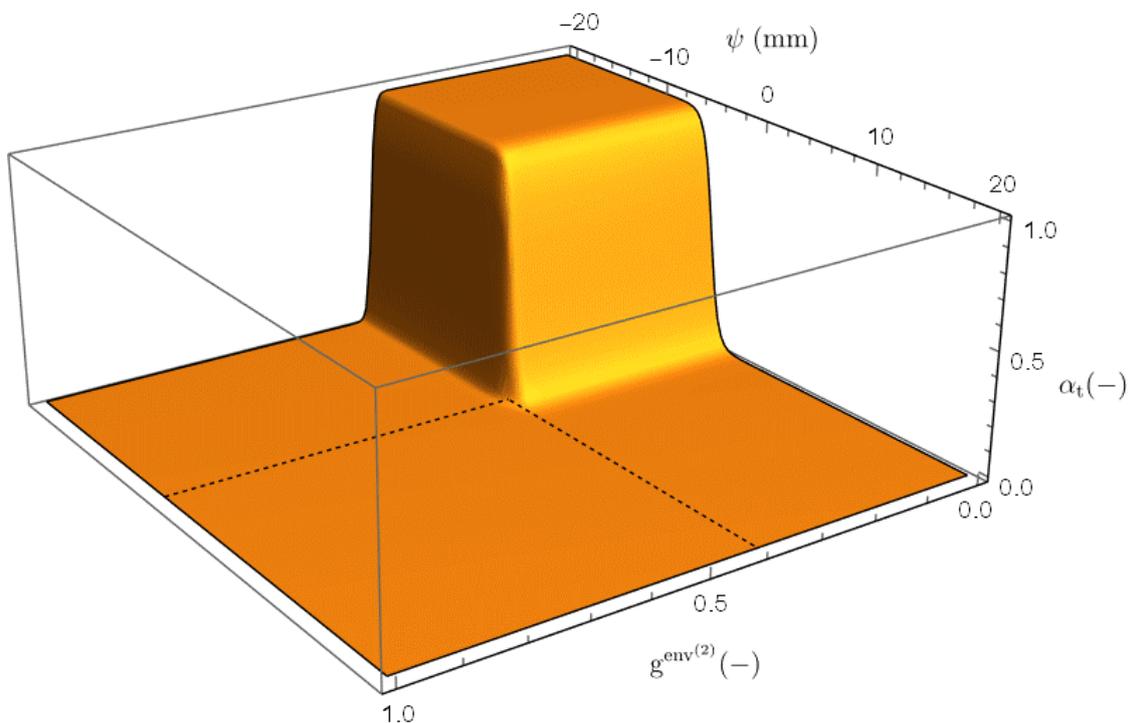


FIGURE 2.5: Représentation de la fonction  $\alpha_t$  en fonction de  $g^{env(2)}$  et  $\psi$  pour  $\alpha_0 = 100$  et  $\alpha_1 = 1000$  ( $\epsilon_x = 4\text{mm}$  et  $g_c^{env(2)} = 0.4$ )

## 2 Algorithme et implémentation

### 2.1 L'algorithme générale

Selon Combeau et Založnik [31], si le temps caractéristique pour la germination et la croissance est moins important que celui du transport, il est possible de mettre en œuvre une résolution du système d'équations par une méthode de

splitting que nous présentons maintenant. Deux échelles de temps différentes sont utilisées pour résoudre les équations décrivant chaque phénomène. En pratique, les équations de conservation précédemment présentées sont divisées en deux parties. D'une part, la partie décrivant le transport (échelle macroscopique) et d'autre part la partie décrivant la germination et la croissance des grains ou sous-structures colonnaires (échelle microscopique). Cette approche correspond à la séparation des échelles proposée par Combeau [31] et Thévoz [30]. L'algorithme général est présenté à la figure 2.6. Après une étape d'initialisation des différents champs, une boucle en pas de temps est réalisée. A chaque pas de temps, différents modèles sont appelés avec principalement le transport de la fonction Level Set, une boucle itérative qui contient les étapes principales du modèle : la résolution de l'équation de conservation de l'énergie, le transport des grains équiaxes et de soluté, la germination et la croissance, la détermination des vitesses des phases solide et liquide et enfin le calcul de la vitesse du front colonnaire.

La figure 2.7 présente l'algorithme détaillé. A chaque étape de la résolution, on présente en noir le nom de l'étape ainsi que l'équation résolue pendant cette étape. On présente en bleu les variables qui sont utilisées en entrée de cette étape et en rouge les variables qui sont déterminées à son issue. A chaque pas de temps, une étape de transport de la fonction Level Set pour déterminer la nouvelle position du front est réalisée comme cela a été décrit dans le paragraphe 1.2 de ce chapitre. Ensuite, une boucle itérative ( itération  $\nu$  ) est réalisée. A l'intérieur de cette boucle, on résout tout d'abord le bilan d'énergie (1.14) à l'issue duquel on détermine une variation d'enthalpie. Ensuite, on transporte les grains équiaxes et le liquide. Cette étape est réalisée à travers la résolution des quatre équations présentées sur l'algorithme et expliquées dans le paragraphe 2.2 ( Les équations 2.1, 2.2, 2.3 et 2.4 ). Par la suite, suivant le signe de la fonction distance on distingue deux chemins de résolution :

1. si  $\psi > 0$  alors l'apparition des sous-structures colonnaires et leur croissance est résolue comme décrit dans les paragraphes 2.3.1 et 2.3.2 suivants. Dans ce cas, les variables équiaxes prennent leurs valeurs au pas de

temps précédent. Ceci permet de garder l'information sur l'historique des grains équiaxes qui se sont formés avant le passage du front colonnaire. Toutefois, comme on fait l'hypothèse que les grains équiaxes sont intégrés à la structure colonnaire si le front n'est pas arrêté, les variables totales sont égales, dans ce cas, à celles associées à la structure colonnaire.

2. si  $\psi \leq 0$ , alors la germination des grains équiaxes et leur croissance sont résolues comme décrit dans les paragraphes [2.3.1](#) et [2.3.2](#) suivants. Les variables colonnaires prennent une valeur nulle et les variables totales prennent les valeurs associées à la structure équiaxe.

Enfin, la dernière étape de cette boucle consiste à résoudre les équations de conservation de quantité de mouvement au niveau des deux phases solide et liquide comme décrit dans le paragraphe [1.3.7](#). Après convergence, on calcule enfin la vitesse du front pour le pas de temps suivant.

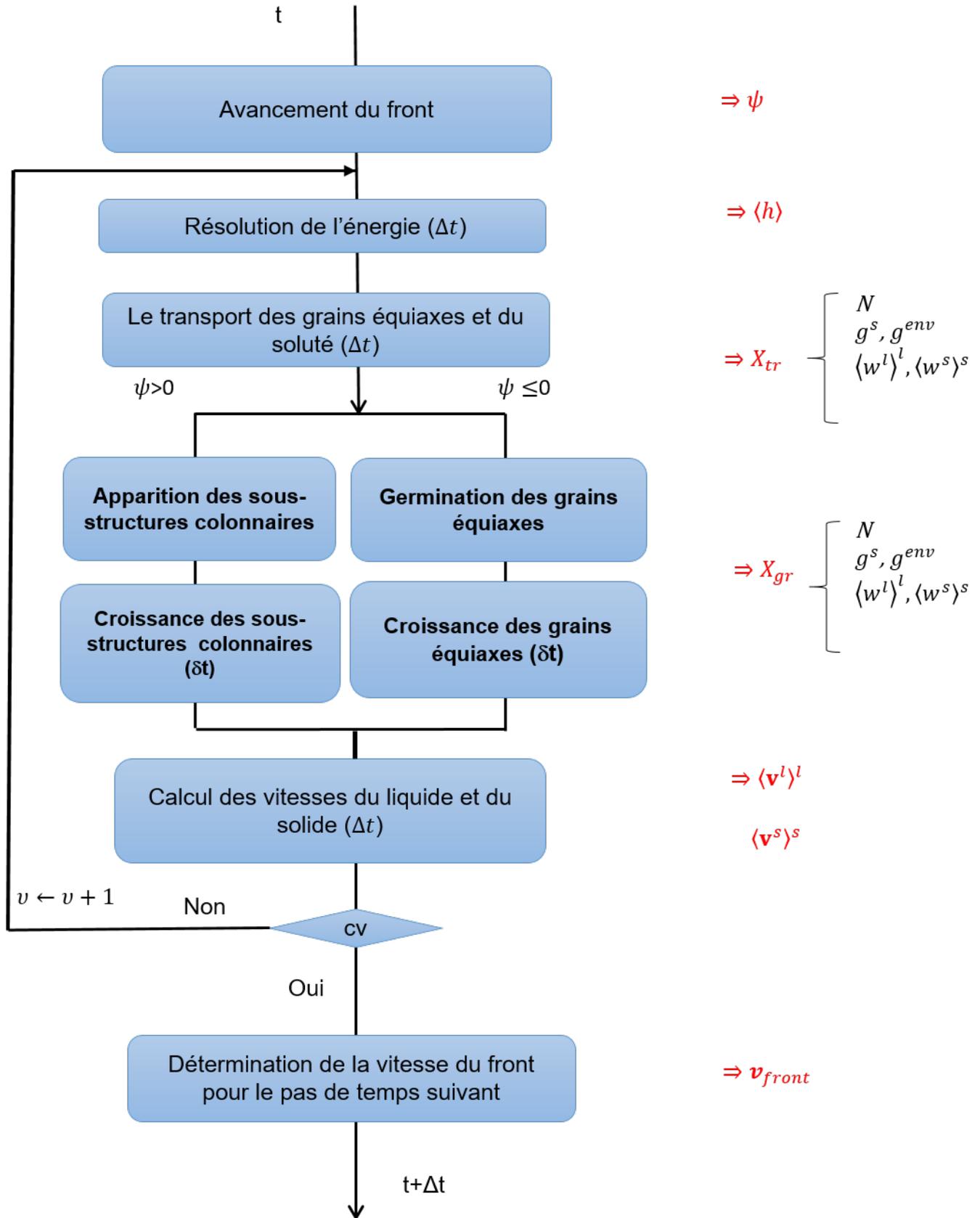


FIGURE 2.6: Présentation générale de l'algorithme de résolution.

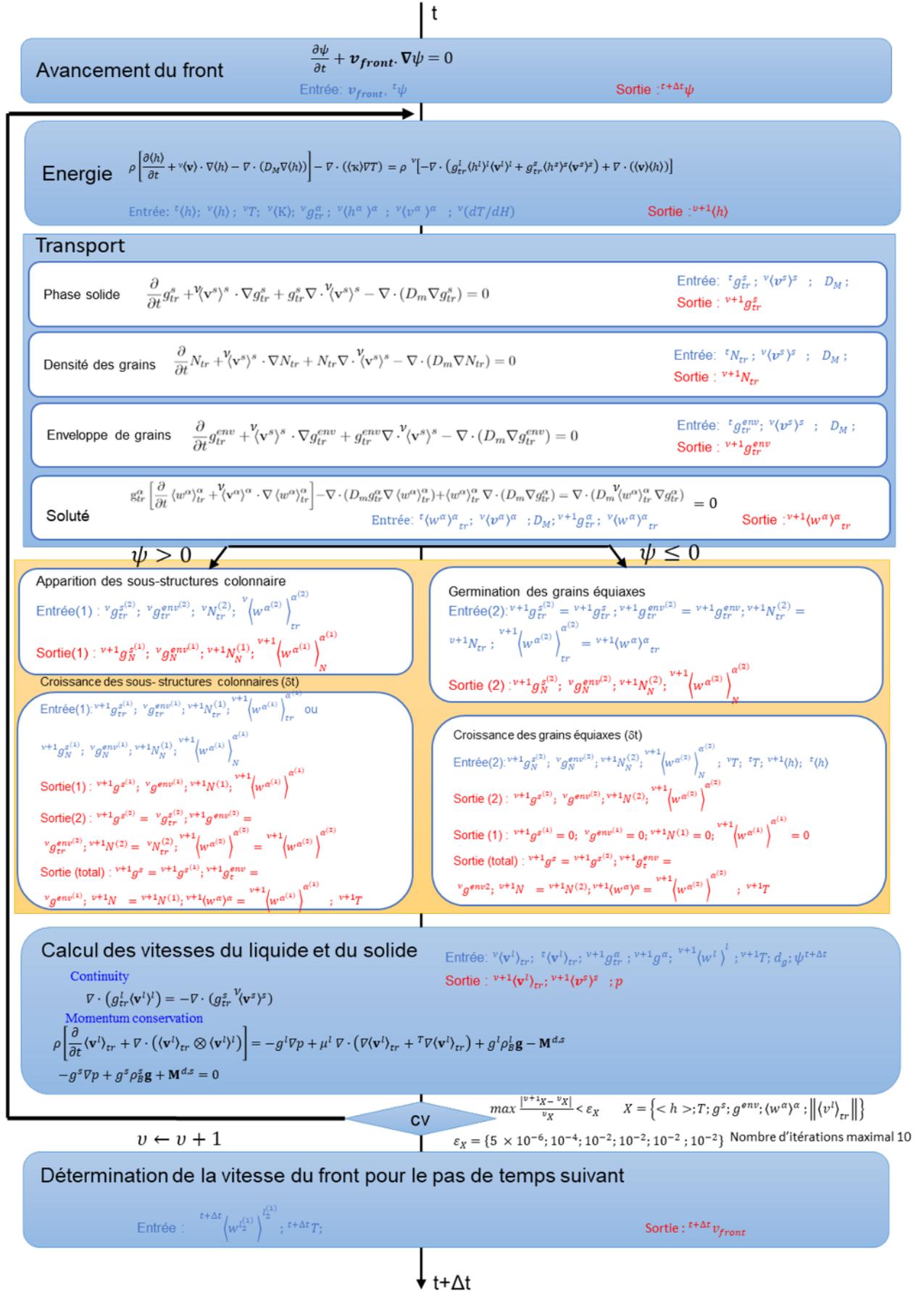


FIGURE 2.7: Présentation détaillée de l'algorithme de résolution.

## 2.2 Le transport

Après la détermination de la nouvelle position du front colonnaire, une étape de transport des grains est réalisée. Pour ceci cinq équations de transport sont résolues comme montré à la figure 2.7. Elles correspondent successivement au transport de la fraction solide  $g_{tr}^s$ , de la densité des grains  $N_{tr}$ , de la fraction d'enveloppe  $g_{tr}^{env}$  et de la composition de soluté  $\langle w^\alpha \rangle_{tr}^\alpha$ , avec  $\alpha = s$  pour le solide et  $\alpha = l$  pour le liquide. L'indice  $tr$  fait référence à une grandeur obtenue après l'étape de transport. Ces équations s'écrivent :

$$\frac{\partial}{\partial t} g_{tr}^s + \langle \mathbf{v}^s \rangle^s \cdot \nabla g_{tr}^s + g_{tr}^s \nabla \cdot \langle \mathbf{v}^s \rangle^s - \nabla \cdot (D_M \nabla g_{tr}^s) = 0 \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} N_{tr} + \langle \mathbf{v}^s \rangle^s \cdot \nabla N_{tr} + N_{tr} \nabla \cdot \langle \mathbf{v}^s \rangle^s - \nabla \cdot (D_M \nabla N_{tr}) = 0 \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} g_{tr}^{env} + \langle \mathbf{v}^s \rangle^s \cdot \nabla g_{tr}^{env} + g_{tr}^{env} \nabla \cdot \langle \mathbf{v}^s \rangle^s - \nabla \cdot (D_M \nabla g_{tr}^{env}) = 0 \quad (2.3)$$

$$g_{tr}^\alpha \left[ \frac{\partial}{\partial t} \langle w^\alpha \rangle_{tr}^\alpha + \langle \mathbf{v}^\alpha \rangle^\alpha \cdot \nabla \langle w^\alpha \rangle_{tr}^\alpha \right] - \nabla \cdot (D_M g_{tr}^\alpha \nabla \langle w^\alpha \rangle_{tr}^\alpha) + \langle w^\alpha \rangle_{tr}^\alpha \nabla \cdot (D_M \nabla g_{tr}^\alpha) = \nabla \cdot (D_M \langle w^\alpha \rangle_{tr}^\alpha \nabla g_{tr}^\alpha) \quad (2.4)$$

où le terme de diffusion numérique est défini par :

$$D_M = (h_e^{\mathbf{v}^s})^2 (\alpha |\nabla \cdot \langle \mathbf{v}^s \rangle| + \beta |\nabla \cdot \langle \mathbf{v}^s \rangle^s|) \quad (2.5)$$

avec

$$h_e^{\mathbf{v}^s} = \frac{2 \|\mathbf{v}_{center}^s\|}{\sum_i^{N_n} |\mathbf{v}_{center}^s \cdot \nabla \varphi_i|} \quad (2.6)$$

avec  $\varphi_i$  la fonction d'interpolation associée au noeud  $i$  et  $\mathbf{v}_{center}^s$  la vitesse du solide au centre de l'élément. Le coefficient  $D_M$  est un coefficient de diffusion artificielle ajouté dans le cadre des travaux de Nguyen [47] pour éviter

les problèmes numériques liés à la résolution des équations purement convectives par la méthode des éléments finis. La justification et l'étude de l'effet de l'introduction de ce coefficient sont données dans la thèse de Nguyen [26].

Dans le cadre du modèle colonnaire-équiaxe, on a constaté que ce coefficient peut créer un problème de diffusion artificielle de champs entre la zone colonnaire et la zone équiaxe. Ceci s'explique par la méthode numérique qu'on utilise pour calculer la divergence  $\nabla \cdot \langle \mathbf{v}^s \rangle^s$ . En effet, on calcule la divergence au niveau des éléments (P0) puis on déduit sa valeur nodale (P1). Par la suite, on peut avoir une valeur non nulle au niveau de certains noeuds derrière le front colonnaire (dans la zone colonnaire) alors que les sous-structures colonnaires sont fixes ( $\langle \mathbf{v}^s \rangle^s = 0$ ). Pour éviter ce problème, on calcule  $D_M$  de la manière suivante .

$$D_M = H \times (h_e^{\mathbf{v}^s})^2 (\alpha |\nabla \cdot \langle \mathbf{v}^s \rangle^s| + \beta |\nabla \cdot \langle \mathbf{v}^s \rangle^s|) \quad (2.7)$$

Avec

$$H = \begin{cases} 1 & \text{si } \psi < 0 \\ 0 & \text{si } \psi \geq 0 \end{cases} \quad (2.8)$$

En résolvant ces équations, les variables moyennées totales relatives à la phase solide sont transportées à la vitesse du solide  $\langle \mathbf{v}^s \rangle^s$  qui est nulle dans la zone colonnaire :  $\langle \mathbf{v}^s \rangle^s = 0$  si  $\psi > 0$ . Par la suite, ceci n'a aucun effet sur les sous-structures colonnaires qui restent immobiles. La composition du liquide totale  $\langle w^l \rangle^l$  est transportée à la vitesse du liquide  $\langle \mathbf{v}^l \rangle^l$ . La composition intrinsèque du solide  $\langle w^s \rangle^s$  est transportée à la vitesse du solide  $\langle \mathbf{v}^s \rangle^s$ . Ensuite, les grandeurs moyennées totales transportées sont passées comme variables d'entrée pour l'étape de germination aussi bien pour la structure colonnaire que pour la structure équiaxe. Pour ceci, on commence par affecter à chaque variable relative à la structure  $X_{tr}^{(k)}$  la valeur obtenue après transport pour la variable totale  $X_{tr}$ .

$$g_{tr}^{s(k)} = g_{tr}^s \quad (2.9)$$

$$N_{tr}^{(k)} = N_{tr} \quad (2.10)$$

$$g_{tr}^{env^{(k)}} = g_{tr}^{env} \quad (2.11)$$

$$\left\langle w^{l^{(k)}} \right\rangle_{tr}^{l^{(k)}} = \left\langle w^l \right\rangle_{tr}^l \quad (2.12)$$

$$\left\langle w^{s^{(k)}} \right\rangle_{tr}^{s^{(k)}} = \left\langle w^s \right\rangle_{tr}^s \quad (2.13)$$

## 2.3 Germination et croissance

Après l'étape de transport qui est réalisée à l'échelle macroscopique en utilisant un pas de temps macroscopique  $\Delta t$ , une étape de germination est effectuée suivie par l'étape de croissance qui est résolue à chaque nœud en utilisant un pas de temps micro,  $\delta t$ . La germination peut être hétérogène pour les grains équiaxes. C'est le mécanisme prédominant dans les alliages inoculés. Ceci correspond à la croissance de grains à partir de germes déjà présents dans le liquide [48]. Les sous-structures colonnaires, quand à elles, ont un mécanisme d'apparition différent guidé par la position du front. Ce mécanisme est décrit au paragraphe 1.3.5

### 2.3.1 Germination

#### Germination de l'équiaxe

Si la surfusion de germination est atteinte et en l'absence de grains équiaxes, la densité des grains après germination  $N_N^{(2)}$  est celle après le transport  $N_{tr}^{(2)}$  à laquelle on ajoute la densité nominale des germes pour la germination hétérogène,  $N_{gh}^{(2)}$ , ainsi que la densité des fragments générés par fragmentation  $N_{frag}^{(2)}$ . Soit  $N_0^{(2)} = N_{gh}^{(2)} + N_{frag}^{(2)}$  :

$$N_N^{(2)} = N_{tr}^{(2)} + N_0^{(2)} \quad (2.14)$$

$N_{frag}^{(2)}$  est préalablement déterminée de la manière suivante : Si au niveau d'un élément P devant le front colonnaire ( $\psi < 0$ ), on a  $\|\nabla T\| < \|\nabla T\|_{critique}$  où  $\|\nabla T\|_{critique}$  est une valeur seuil, alors on active la fragmentation à préciser. Par la suite, La valeur de la densité des fragments ou grains équiaxes générés par fragmentation sera déterminée de la manière suivante :

$$\frac{dN_{frag}^{(2)}}{dt} = \Phi_{frag} = \frac{1}{V_0} \iint_{S_{\psi/P}} \varphi_{frag} ds \quad (2.15)$$

avec  $S_{\psi/P}$  la surface d'intersection entre un élément P et une isovaleur nulle de la fonction levelset  $\psi$  (figure 2.8) et  $V_0$  le volume de l'élément P . Comme on prend  $\varphi_{frag} = cste$  alors

$$\Phi_{frag} = \frac{S_{\psi/P} \varphi_{frag}}{V_0} \quad (2.16)$$

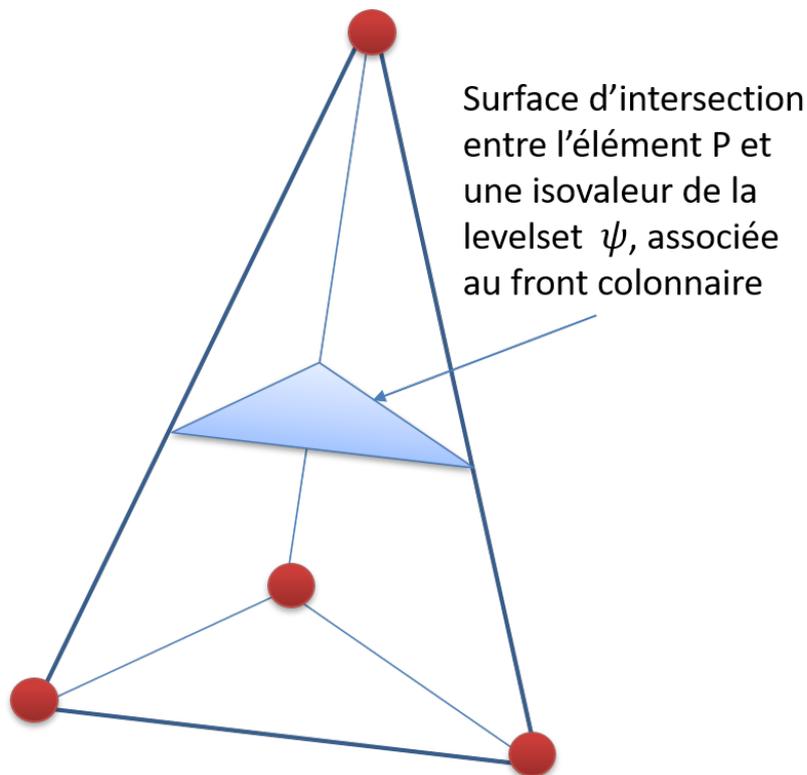


FIGURE 2.8: Un élément tétraédrique P avec la surface de fragmentation  $S_{\psi/P}$ .

Par la suite, les différentes variables liées à la structure équiaxe varient de la

manière suivante. Pour le liquide équiaxe total :

$$g_N^{l(2)} = g_{tr}^{l(2)} - V_{germ} N_0^{(2)} \quad (2.17)$$

avec  $g_N^{l(2)}$ , la fraction du liquide équiaxe après l'étape de germination,  $g_{tr}^{l(2)}$  celle après l'étape de transport et  $V_{germ}$  le volume du grain à la germination, préalablement fixé. On considère que les grains équiaxes germent avec une morphologie sphérique globulitique. Par la suite leur volume est  $V_{germ} = \frac{4}{3}\pi R_g^3$  avec  $R_g = 0.5\mu\text{m}$ .

Pour le solide équiaxe :

$$g_N^{s(2)} = 1 - g_N^{l(2)} \quad (2.18)$$

Pour l'enveloppe des grains équiaxes :

$$g_N^{env(2)} = g_{tr}^{env(2)} + V_{germ} N_0^{(2)} \quad (2.19)$$

Pour la composition du liquide équiaxe :

$$\left\langle w^{l(2)} \right\rangle_N^{l(2)} = \frac{\left\langle w^{l(2)} \right\rangle_{tr}^{l(2)}}{g_N^{l(2)}} \left( g_{tr}^{l(2)} - V_{germ} N_0^{(2)} k \right) \quad (2.20)$$

avec  $\left\langle w^{l(2)} \right\rangle_N^{l(2)}$  la composition du liquide équiaxe après l'étape de germination,  $\left\langle w^{l(2)} \right\rangle_{tr}^{l(2)}$  celle après l'étape de transport,  $k$  le coefficient de partage.

Pour la composition du solide équiaxe :

$$\left\langle w^{s(2)} \right\rangle_N^{s(2)} = \frac{1}{g_N^{s(2)}} \left( \left\langle w^{s(2)} \right\rangle_{tr}^{s(2)} g_{tr}^{s(2)} + V_{germ} N_0^{(2)} k \left\langle w^{l(2)} \right\rangle_{tr}^{l(2)} \right) \quad (2.21)$$

avec  $\left\langle w^{s(2)} \right\rangle_N^{s(2)}$  la composition du solide équiaxe après l'étape de germination et  $\left\langle w^{s(2)} \right\rangle_{tr}^{s(2)}$  celle après l'étape de transport.

### Germination du colonnaire

Par hypothèse, les grains équiaxes qui se retrouvent dans la zone colonnaire sont intégrés en tant que sous-structures de cette zone [9]. Par la suite, la densité des grains après germination ne correspond pas seulement à  $N_0^{(1)} = \frac{1}{\lambda_1^3}$  qui est la densité des sous-structures colonnaires, ainsi  $N_N^{(1)} \neq N_0^{(1)}$ . Avec ces hypothèses, on obtient les équations suivantes.

Pour la densité des grains :

$$N_N^{(1)} = N_{tr}^{(2)} + N_0^{(1)} \quad (2.22)$$

où  $N_{tr}^{(2)}$  est la densité des grains équiaxes après le transport qui sera intégrée à la structure colonnaire,  $N_0^{(1)}$  la densité nominale des sous-structures colonnaires et  $N_N^{(1)}$  la densité finale des sous-structures colonnaires. Par la suite, les variables liées à la structure colonnaire varient suite à cette étape de la manière décrite ci-après.

Dans ce qui suit, on utilisera des variables liées à la structure équiaxe pour prendre en considération la formation des structures équiaxes juste avant l'arrivée du front colonnaire.

Pour la fraction du liquide colonnaire :

$$g_N^{l(1)} = g_{tr}^{l(2)} - V_{germ} N_0^{(1)} \quad (2.23)$$

avec  $g_{tr}^{l(2)}$  la fraction du liquide équiaxe juste avant l'arrivée du front colonnaire,  $g_N^{l(1)}$  la fraction du liquide colonnaire après l'étape de germination du colonnaire.

Pour la fraction du solide colonnaire :

$$g_N^{s(1)} = 1 - g_N^{l(1)} \quad (2.24)$$

Pour la fraction d'enveloppe colonnaire :

$$g_N^{env(1)} = g_{tr}^{env(2)} + V_{germ} N_0^{(1)} \quad (2.25)$$

avec  $g_{tr}^{env(2)}$  la fraction d'enveloppe de l'équiaxe avant le passage du front colonnaire.

Pour la composition du liquide colonnaire :

$$\left\langle w^{l(1)} \right\rangle_N^{l(1)} = \frac{\left\langle w^{l(2)} \right\rangle_{tr}^{l(2)}}{g_N^{l(1)}} \left( g_{tr}^{l(2)} - V_{germ} N_0^{(1)} k \right) \quad (2.26)$$

avec  $\left\langle w^{l(2)} \right\rangle_{tr}^{l(2)}$  la composition du liquide équiaxe avant le passage du front colonnaire. On prend ainsi en considération les conditions solutales existantes avant le passage du front colonnaire.

Pour la composition du solide colonnaire :

$$\left\langle w^{s(1)} \right\rangle_N^{s(1)} = \frac{1}{g_N^{s(1)}} \left( \left\langle w^{s(2)} \right\rangle_{tr}^{s(2)} g_{tr}^{s(2)} + V_{germ} N_0^{(1)} k \left\langle w^{l(2)} \right\rangle_{tr}^{l(2)} \right) \quad (2.27)$$

avec  $\left\langle w^{s(2)} \right\rangle_{tr}^{s(2)}$  et  $g_{tr}^{s(2)}$  respectivement, la composition intrinsèque ainsi que la fraction du solide équiaxe avant le passage du front.

### 2.3.2 Croissance

Le bilan des équations à résoudre pour décrire cette étape est d'une part celui associé à la conservation de l'enthalpie et d'autre part les équations de bilans de masse et de soluté dans les différentes phases.

#### Conservation de l'enthalpie

La variation de l'enthalpie moyenne pendant un micro pas de temps,  $\delta \langle h \rangle$ , en considérant les capacités thermiques,  $c_p$ , des différentes phases constantes et égales, peut s'écrire de la manière suivante :

$$\delta \langle h \rangle = c_p \delta T - \delta g^s L_f \quad (2.28)$$

avec  $c_p$  la capacité thermique,  $L_f$  la chaleur latente,  $\delta g^s$  la variation de la

fraction solide et  $\delta T$  la variation de la température.

$$\delta T = {}^{t^m+\delta t} T - {}^{t^m} T = (T_f + m^l w^{l_1^{(k)}}(s^{(k)}/l_1^{(k)})) - {}^{t^m} T \quad (2.29)$$

avec  ${}^{t^m} T$  la température à l'instant  $t^m$  (temps micro) et  ${}^{t^m+\delta t} T$  la température à l'instant  $t^m + \delta t$ , avec  $\delta t$  le micro pas de temps :  $\delta t = \Delta t/n$ ,  $\Delta t$  étant le macro pas de temps et  $n$  le nombre de micro pas de temps par macro pas de temps.

$$\delta \langle h \rangle = \frac{{}^{t+\Delta t} \langle h \rangle - {}^t \langle h \rangle}{n} \quad (2.30)$$

avec  $\delta \langle h \rangle$  la variation de l'enthalpie pendant un macro pas de temps,  ${}^{t+\Delta t} \langle h \rangle$  l'enthalpie à l'instant  $t + \Delta t$  et  ${}^t \langle h \rangle$  l'enthalpie à l'instant  $t$ .

Par la suite on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{{}^{t+\Delta t} \langle h \rangle - {}^t \langle h \rangle}{n} &= c_p \left( (T_f + m^l w^{l_1^{(k)}}(s^{(k)}/l_1^{(k)})) - {}^{t^m} T \right) \\ - L_f \left( \frac{{}^{t+\Delta t} g_{tr}^{s^{(k)}} - {}^t g^{s^{(k)}}}{n} + \frac{{}^{t+\Delta t} g_N^{s^{(k)}} - {}^{t+\Delta t} g_{tr}^{s^{(k)}}}{n} + \frac{\Gamma^{s^{(k)}}}{\rho^s} \delta t \right) \end{aligned} \quad (2.31)$$

avec  ${}^{t+\Delta t} g_{tr}^{s^{(k)}}$  la fraction solide à l'instant  $t + \Delta t$  après l'étape de transport,  ${}^t g^{s^{(k)}}$  la fraction solide à l'instant  $t$  et  ${}^{t+\Delta t} g_N^{s^{(k)}}$  la fraction solide à l'instant  $t + \Delta t$  après l'étape de germination. En réarrangeant les termes, on obtient :

$$\begin{aligned} &c_p m^l w^{l_1^{(k)}}(s^{(k)}/l_1^{(k)}) - \Gamma^{s^{(k)}/l_1^{(k)}} \frac{L_f}{\rho^s} \delta t \\ &= \frac{{}^{t+\Delta t} \langle h \rangle - {}^t \langle h \rangle}{n} - c_p (T_f - {}^{t^m} T) + L_f \left( \frac{{}^{t+\Delta t} g_N^{s^{(k)}} - {}^t g^{s^{(k)}}}{n} \right) \end{aligned} \quad (2.32)$$

### Bilans de masse totale et de soluté

En appliquant l'équation [4.2](#) et [4.4](#) de l'annexe [A](#) avec  $\alpha = s^{(k)}$  en ne prenant que les termes relatifs à la croissance (la prise en compte des termes dus au transport et à la germination est déjà réalisée précédemment du fait de la

méthode de séparations des échelles), on obtient :

$$\frac{\partial g^{s^{(k)}}}{\partial t} = \frac{\Gamma^{s^{(k)}/l_1^{(k)}}}{\rho} \quad (2.33)$$

$$\frac{\partial(\rho g^{s^{(k)}} \langle w^{s^{(k)}} \rangle^{s^{(k)}})}{\partial t} = \Gamma^{s^{(k)}/l_1^{(k)}} w^{s^{(k)}/l_1^{(k)}} + \frac{\rho^s S_v^{s^{(k)}/l_1^{(k)}} D^s}{\delta^{s^{(k)}/l_1^{(k)}}} (w^{s^{(k)}/l_1^{(k)}} - \langle w^{s^{(k)}} \rangle^{s^{(k)}}) \quad (2.34)$$

La justification de ces équations splittées est détaillée dans le paragraphe **B**.

Le bilan de masse de soluté pour le liquide total  $l^{(k)}$  est justifié en détails dans le paragraphe **2.2** de l'annexe **B** et s'écrit ainsi :

$$\frac{\partial}{\partial t} (g^{l^{(k)}} \rho^l \langle w^{l^{(k)}} \rangle^{l^{(k)}}) = -\Gamma^{s^{(k)}/l_1^{(k)}} w^{l_1^{(k)}/l_1^{(k)}} - \rho^l D^l S_v^{l_1^{(k)}/l_2^{(k)}} \frac{g^{l^{(k)}} w^{l_1^{(k)}/l_1^{(k)}} - \langle w^{l^{(k)}} \rangle^{l^{(k)}}}{g^{l_2^{(k)}} \delta^{l_2^{(k)}/l_2^{(k)}}} \quad (2.35)$$

### Bilans interfaciaux

$$\Gamma^{s^{(k)}/l_1^{(k)}} + \Gamma^{l_1^{(k)}/s^{(k)}} = 0 \quad (2.36)$$

$$\begin{aligned} \Gamma^{s^{(k)}/l_1^{(k)}} w^{l_1^{(k)}/l_1^{(k)}} (1 - k) &= \frac{\rho^s S_v^{l_1^{(k)}/l_2^{(k)}} D^s}{\delta^{s^{(k)}/l_1^{(k)}}} (k w^{l_1^{(k)}/l_1^{(k)}} - \langle w^{s^{(k)}} \rangle^{s^{(k)}}) \\ &+ \frac{\rho^l S_v^{l_1^{(k)}/l_2^{(k)}} D^l g^{l^{(k)}}}{\delta^{l_2^{(k)}/l_2^{(k)}}} (w^{l_1^{(k)}/l_1^{(k)}} - \langle w^{l^{(k)}} \rangle^{l^{(k)}}) \end{aligned} \quad (2.37)$$

Pour déterminer l'évolution des différentes grandeurs suite à l'étape de croissance, le système d'équations **2.32** et **2.37** est tout d'abord résolu d'une manière itérative pour déterminer  $\Gamma^{s^{(k)}/l_1^{(k)}}$  et  $w^{l_1^{(k)}/l_1^{(k)}}$ .

Ensuite les équations **2.33**, **2.34** et **2.35** sont utilisées pour déterminer les

différentes fractions et compositions des phases :  $g^{s^{(k)}}$ ,  $\langle w^{s^{(k)}} \rangle^{s^{(k)}}$ ,  $\langle w^{l^{(k)}} \rangle^{l^{(k)}}$

La figure 2.9 présente l'algorithme de l'étape de germination et croissance (bloc en orange dans la figure 2.7).

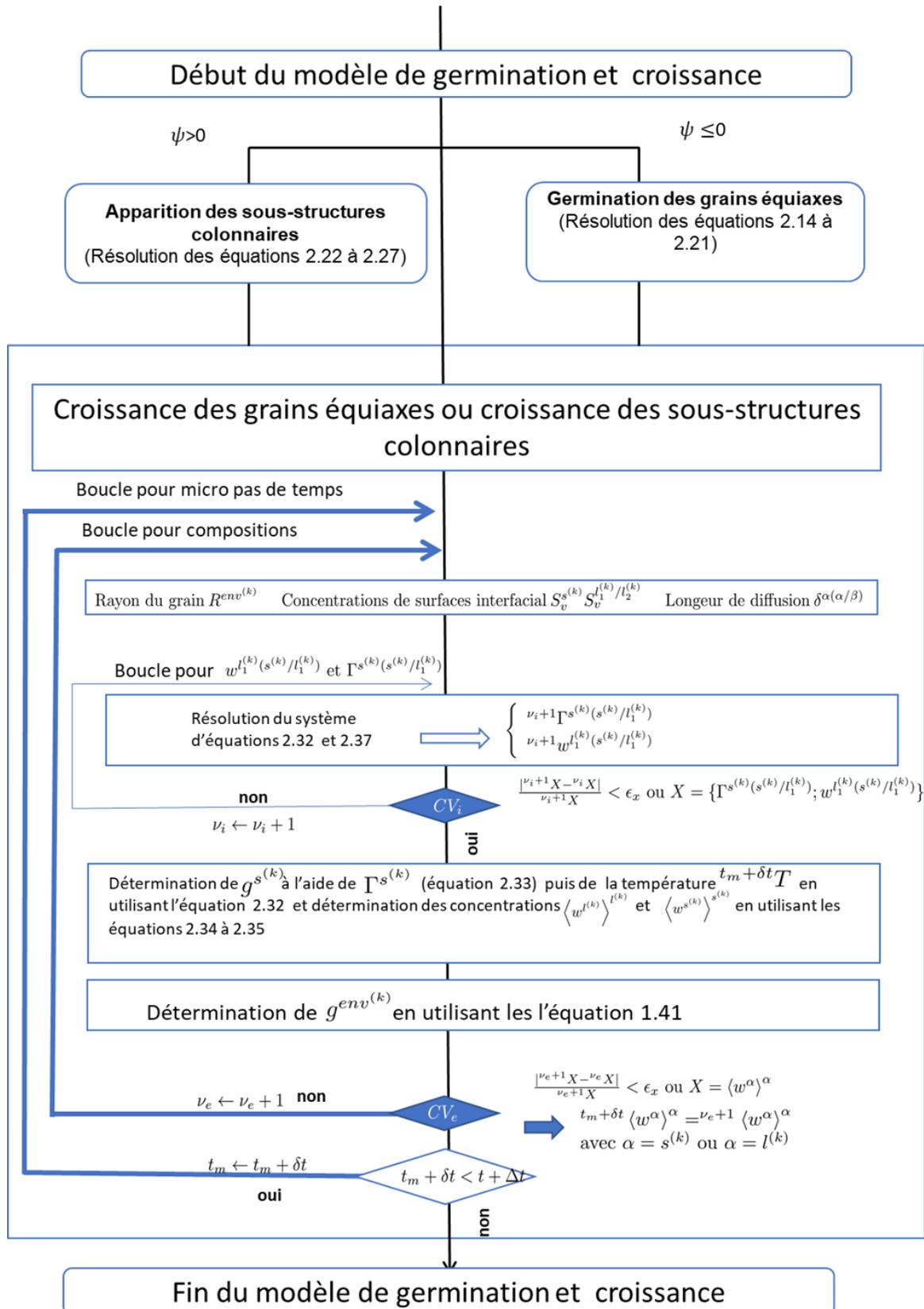


FIGURE 2.9: Présentation de l'algorithme de germination et croissance.

### 3 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté un modèle qui décrit la formation des structures colonnaire et équiaxe en prenant en considération la morphologie dendritique et le mouvement des grains équiaxes. Ce modèle est une extension du travail réalisé dans le cadre de la thèse de Nguyen [26] qui a développé un modèle en utilisant la méthode des éléments finis pour décrire la structure équiaxe et son transport.

Notre contribution se résume dans les points suivants :

- Mise en place d'un modèle décrivant la croissance simultanée de structures colonnaires et équiaxes.
- Développement d'une méthode de suivi de front basée sur la méthode Level Set pour déterminer la position du front colonnaire.
- Développement d'un module qui permet de calculer la vitesse du front colonnaire en utilisant un modèle de cinétique des pointes de dendrites.
- Implémentation d'un modèle de microségrégation à 3+3 phases simulant la germination et la croissance des deux structures colonnaire et équiaxe.
- Prédiction de la transition colonnaire équiaxe en utilisant un critère mécanique ainsi que par effet solutal.
- Réalisation des modifications nécessaires concernant le module de vitesse solide et de résolution du bilan de quantité de mouvement pour la phase liquide pour prendre en considération le mouvement du liquide et des grains équiaxes en présence d'un front colonnaire.
- Modélisation de la fragmentation comme source de grains équiaxes en plus de la germination hétérogène.



# Chapitre 3

## Applications expérimentales et validation

Dans ce chapitre, nous allons tester les différentes briques du modèle à travers 3 cas tests. Tout d'abord, nous allons tester le suivi du front et la croissance colonnaire pur dans un premier cas 1D. Par la suite, nous allons simuler la croissance simultanée des deux structures colonnaire et équiaxe ainsi que la TCE à travers le deuxième cas. Toutefois dans ce dernier, le solide est considéré comme fixe et on ne considère pas la convection du liquide. Enfin, nous appliquerons le modèle complet (avec transport des grains et convection du liquide) sur un troisième cas expérimental en 2D puis en 3D.

### 1 Croissance colonnaire et suivi du front :

#### 1.1 Description du cas test

Pour vérifier l'implémentation de la méthode de suivi de front, le modèle est testé dans un premier temps sur un cas 1D. Dans ce cas test, seul l'avancée du front colonnaire est décrite suivant la méthode expliquée dans le paragraphe 1.2 du chapitre 2 et en utilisant une vitesse des pointes calculée suivant la méthode décrite dans le même paragraphe. Ainsi, seule la convection de la Level Set, le bilan de l'énergie et le modèle de microségrégation en considérant seulement la présence d'une structure colonnaire sont résolus. Dans ce cadre, on ne considère pas la germination des grains équiaxes, ni la convection du liquide.

Nous considérons le domaine rectangulaire schématisé sur la figure 3.1 avec 100 mm de longueur et 1 mm d'épaisseur, refroidi du côté gauche ( $h_{ext} =$

$500 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$ ). Les autres côtés sont adiabatiques. La température initiale est de  $800^\circ\text{C}$  et la température extérieure est de  $T_{ext} = 100^\circ\text{C}$ . Six capteurs sont placés à l'intérieur du domaine : deux aux extrémités et quatre distants de 20 mm. Les propriétés thermodynamiques utilisées sont celles de l'alliage  $\text{Al} - 7 \text{ \%}pds \text{ Si}$  et sont détaillées dans l'annexe C. Sa température de liquidus est de  $618^\circ\text{C}$ . Les conditions thermiques et les paramètres numériques sont précisés successivement au tableau 3.1.

Une comparaison avec un calcul de référence a été réalisée. Le cas référence utilise un modèle de suivi de front établi par Gandin [49] développé pour comparer les températures de mesures expérimentales sur des lingots Al-Si.

Ce calcul a été effectué en parallèle sur 4 cœurs et a duré 25 min pour décrire environ 10 min de solidification.

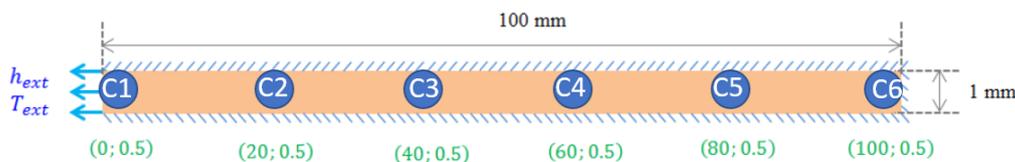


FIGURE 3.1: Schéma du cas de simulation [26].

Conditions thermiques		
$T_{ext}$	100	$^\circ\text{C}$
$T_{initial}$	800	$^\circ\text{C}$
$h_{ext}$	500	$\text{W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$
Paramètres numériques		
Taille de maille	1	mm
Pas de temps Macro	0.01	s
Macro/Micro pas de temps	10	-

TABLE 3.1: Conditions thermiques et paramètres numériques.

## 1.2 Résultats

Notre modèle permet de retrouver avec une bonne précision aussi bien les résultats au niveau de la thermique que la fraction solide. Sur les deux figures

3.2 et 3.3, les courbes en tirets noirs représentent les résultats du modèle de référence en suivi de front [23]. Les courbes en traits continus et colorés représentent successivement nos résultats au niveau des 6 différents capteurs C1 à C6. Seul un domaine restreint en température [570 K, 620 K] a été représenté.

### 1.2.1 Évolution de la température

Dans un premier temps et pour vérifier notre implémentation, l'évolution de la température a été représentée en fonction du temps au niveau des six capteurs successifs (C1 à C6) pour les solutions de référence ([23]) et comparée avec les solutions proposées avec notre approche (figure 3.2). Ces courbes montrent au début une descente rapide qui correspond au refroidissement du liquide puis une descente plus lente correspondant à la formation de la phase solide dans une zone pâteuse avec libération de la chaleur latente puis une descente rapide recommence correspondant au refroidissement du solide uniquement après solidification. Les changements entre ces 3 régimes sont d'autant plus marqués que l'on s'éloigne du refroidisseur.

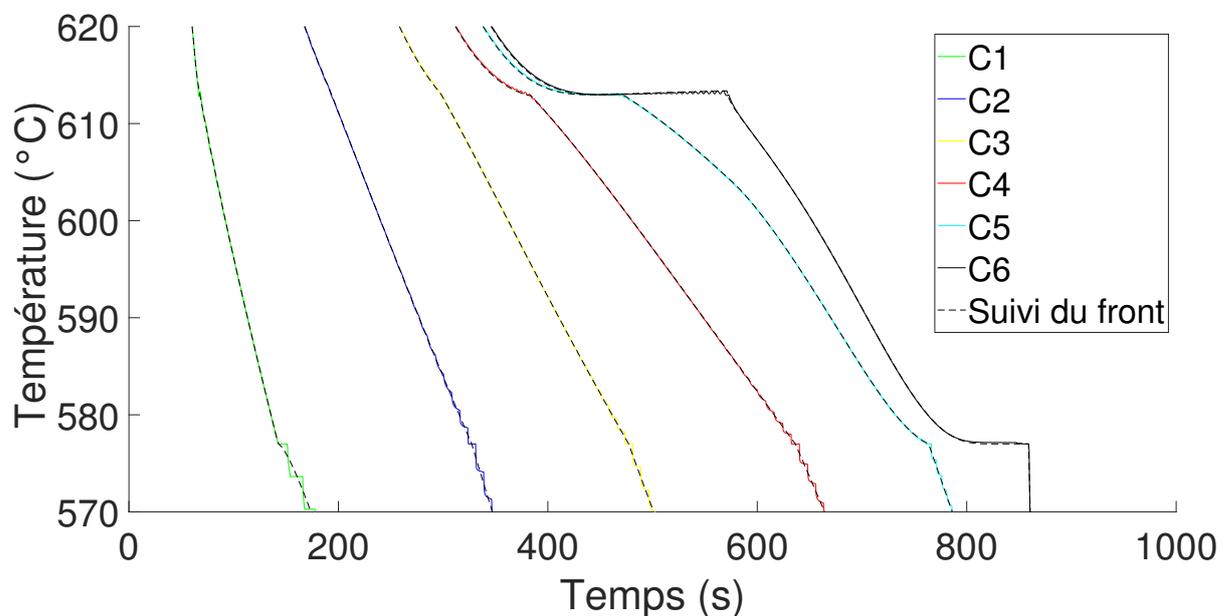


FIGURE 3.2: Évolution temporelle de la température sur les différents capteurs de C1 à C6 : les courbes en lignes pointillées correspondent aux résultats du modèle référence (suivi du front [23]), les courbes colorées en lignes continues correspondent aux résultats de notre modèle.

### 1.2.2 Fraction solide

En deuxième lieu, nous avons regardé l'évolution de la fraction solide (figure 3.3). On constate qu'au niveau des différents capteurs, il y a une tangente verticale au début de la solidification au moment où le front arrive. Ceci s'explique par le fait que l'avancement du front colonnaire se fait avec une surfusion  $\Delta T > 0$  comme on peut le voir sur la courbe de température qui montre un plateau à  $613^\circ\text{C}$  bien visible pour le dernier capteur alors que le liquidus de l'alliage est à  $618^\circ\text{C}$ . Par la suite, la solidification se fait à une surfusion de  $5^\circ\text{C}$  et un saut de fraction solide au début de solidification est observé de l'ordre de 0.12. Cette évolution est due à la transformation de phase qui remet le liquide, en surfusion initialement, à l'équilibre thermodynamique, selon la loi de solidification utilisée. En conséquence, une fraction de solide se forme immédiatement après le passage du front, en lien avec la température du front. Les courbes montrent aussi une augmentation très brutale de la fraction solide  $g^s$  qui arrive à l'instant où la température de  $577^\circ\text{C}$  est atteinte. Ceci correspond à la transformation eutectique.

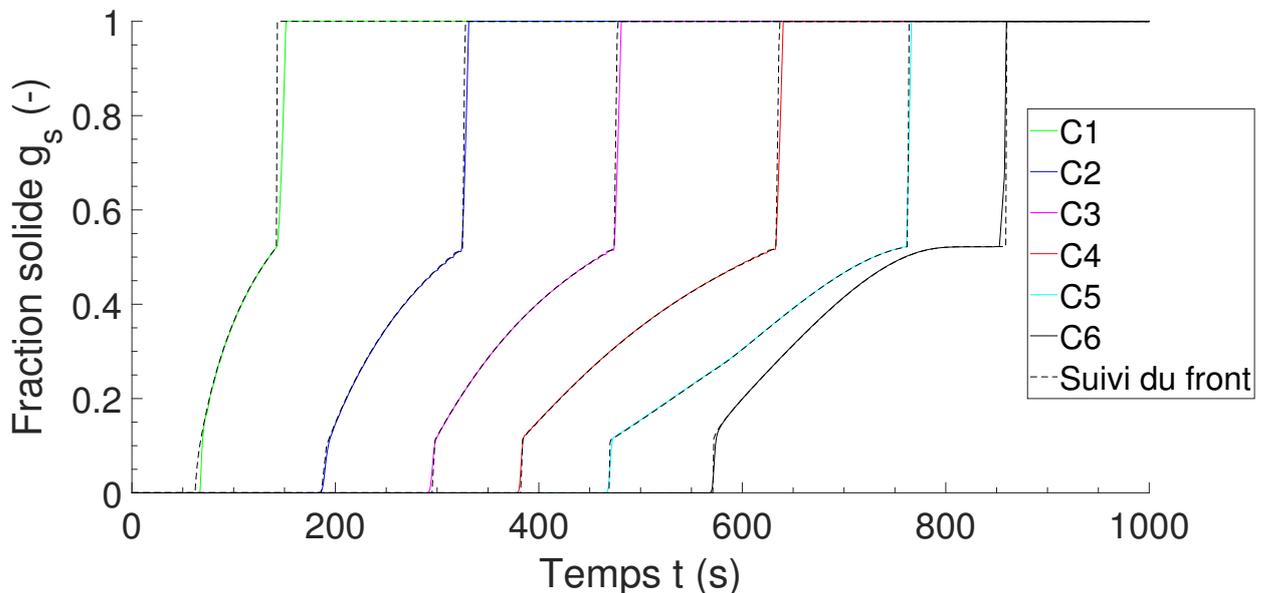


FIGURE 3.3: Évolution temporelle de la fraction solide sur les différents capteurs de C1 à C6 : les courbes en lignes pointillées correspondent aux résultats d'un modèle référence (suivi du front), les courbes colorées en lignes continues correspondent aux résultats de notre modèle.

On peut conclure que la modélisation de l'avancement du front via la mé-

thode Level Set ainsi que la description de l'évolution d'une structure purement colonnaire dans le cas 1D a été validée.

## 2 Transition colonnaire-équiaxe à solide fixe :

Dans un deuxième temps, une application avec le modèle en prenant en considération à la fois la croissance des structures colonnaires et équiaxes a été réalisée pour un lingot cylindrique où on a mesuré expérimentalement la position de la transition colonnaire-équiaxe (TCE) [19]. La solidification est dirigée, le front colonnaire se propage suivant la direction du grand axe du cylindre. C'est pourquoi, cette expérience a été modélisée en 1D. Le mouvement du liquide ainsi que le transport des grains équiaxes ne sont pas considérés dans ce cas. La vitesse de croissance des pointes de dendrites colonnaires est calculée selon une formule empirique  $v_{front} = A \cdot \Delta T^n$  avec  $\Delta T$  la surfusion au front,  $A = 2.9 \cdot 10^{-6} \text{m.s}^{-1} \cdot \text{K}^{-n}$  et  $n = 2.7$ . Pour le blocage du front, un critère mécanique est utilisé [15] avec une valeur de fraction d'enveloppe limite prise égale à 0.5.

### 2.1 Description du cas test

La solidification d'un lingot en Al-7% pds Si dont les propriétés thermodynamiques sont détaillées dans l'annexe C.2 est étudiée. Ses dimensions sont de 17.3 cm pour la hauteur et de 7 cm pour le diamètre. Étant donné l'extraction 1D de la chaleur, la largeur de ce domaine ne joue pas de rôle. Ainsi la géométrie du lingot est simplifiée et représentée par un domaine bidimensionnel (17.3 cm x 3.5 cm). On applique les conditions aux bords mentionnées dans le tableau (c) de la figure 3.4. Une seule classe de germes est considérée avec une densité homogène de  $N^{(2)} = 9 \times 10^6 \text{grains.m}^{-3}$  qui est activée pour  $\Delta T_n = 4.8 \text{ K}$ . Cette surfusion est choisie car elle correspond à la surfusion atteinte un peu avant le maximum de la vitesse du front colonnaire. Ce calcul a été effectué en parallèle sur 16 cœurs et a duré 1 heure pour décrire environ 25 min de solidification.

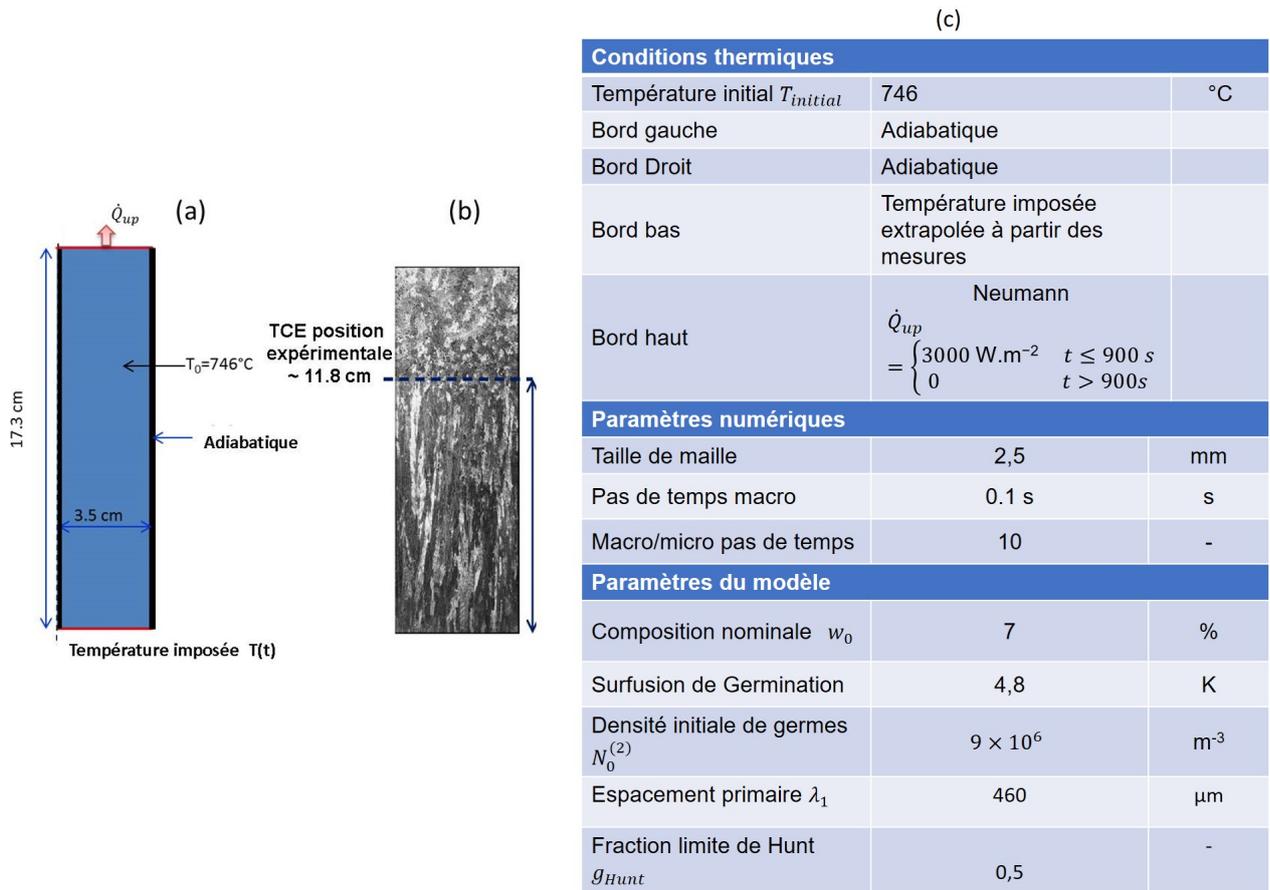


FIGURE 3.4: Présentation du cas test de solidification dirigée d'un lingot en Al-7% pds Si montrant (a) la géométrie du domaine simulé, (b) la structure des grains et position expérimentale de la TCE [19], (c) les conditions aux limites thermiques et paramètres numériques.

## 2.2 Résultats

La figure 3.5 présente l'évolution de la température en fonction du temps. Les courbes en tirets noirs représentent les résultats expérimentaux pour les différents thermocouples placés de 20 mm à 140 mm et espacés de 20 mm [19]. Les courbes continues colorées représentent les différents résultats pour l'ensemble des capteurs placés dans les mêmes positions que les thermocouples.

On constate une bonne coïncidence entre les résultats de la simulation et les résultats expérimentaux.

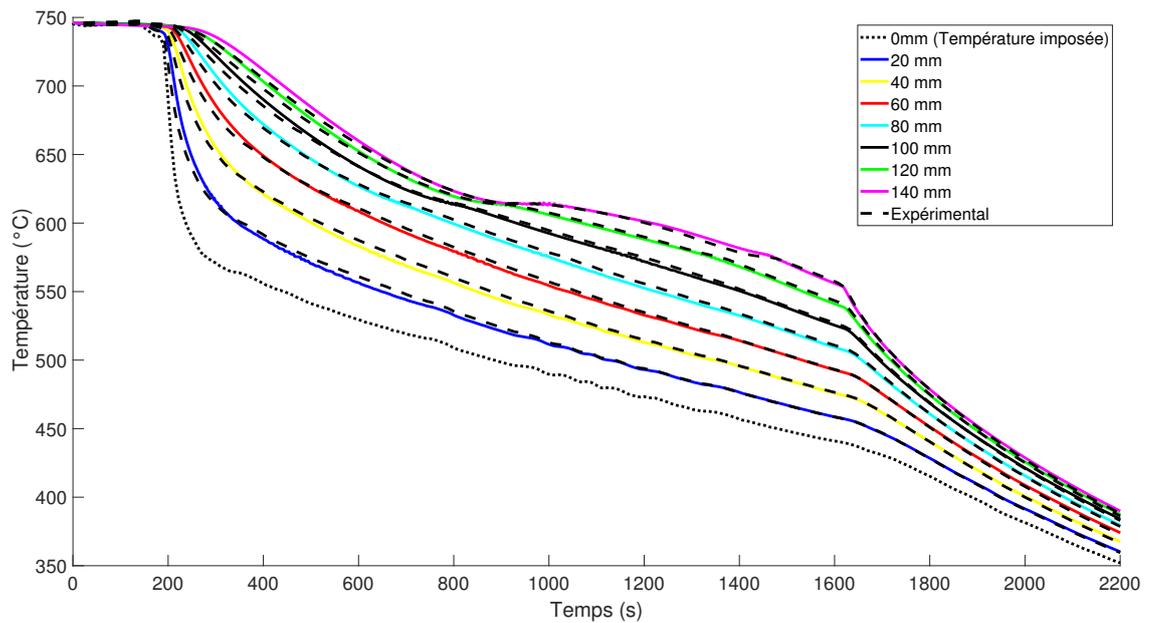


FIGURE 3.5: Évolution temporelle de la température : comparaison des résultats de simulation (courbes en lignes continues colorées) avec les mesures expérimentales (lignes noirs en tirets) pour les différents capteurs placés dans le domaine.

La figure [3.6](#) représente les résultats en fin de solidification. On présente à gauche la densité des grains colonnaires et à droite la fraction des enveloppes équiaxes.

Dans la partie inférieure du lingot, une structure purement colonnaire se développe (sauf un point peut être dû à une instabilité) avec une densité égale à  $1.027 \times 10^{10} \text{ grains.m}^{-3} = \frac{1}{\lambda_1^3}$  ([\[9\]](#)). Ensuite, les grains équiaxes commencent à apparaître avec une densité de  $9 \times 10^6 \text{ grains.m}^{-3}$  qui est la densité des germes initiaux imposée. Le front ne s'arrête pas tout de suite, le critère de blocage mécanique ( $g^{env(2)} > g_{hunt}$  avec  $g_{hunt} = 0.5$ ) n'étant pas encore atteint. Ceci donne naissance à une zone mixte où les grains équiaxes et colonnaires coexistent. Toutefois, on fait l'hypothèse dans notre modèle que les grains équiaxes qui ont germé et n'ont pas bloqué le front sont intégrés à la structure colonnaire après le passage du front. Ceci explique la densité de grains du domaine colonnaire ( $1.028 \times 10^{10} \simeq 1.027 \times 10^{10} + 9 \times 10^6$ )  $\text{grains.m}^{-3}$ .

Comme on peut le voir sur la figure [3.6](#), le modèle prédit une zone de transition où les grains équiaxes se forment mais leur fraction volumique est insuffi-

sante pour bloquer mécaniquement le front. Ensuite, le front continue à avancer et se bloque quand la fraction des enveloppes de grains équiaxes atteint la valeur limite de Hunt. Une position de TCE de 11.8 cm est alors prédite, une valeur qui coïncide avec le résultat expérimental (figure 3.6). Quelques irrégularités sont aperçus dans le champs de la densité de grains équiaxes et peuvent être dus à quelques instabilités numériques. Ces irrégularités peuvent diminuer en maillant plus finement mais comme la position de la TCE n'est pas fortement impactée, on a choisit de considérer ce résultat.

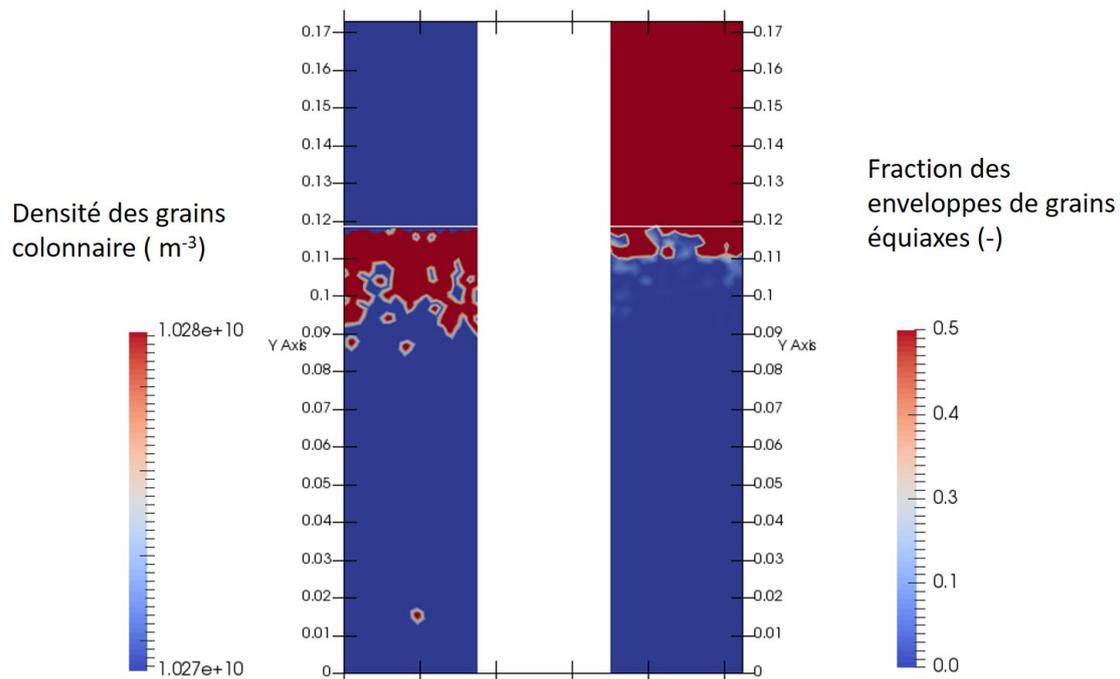


FIGURE 3.6: Densité finale de grains pour la structure colonnaire (à gauche) et fraction des enveloppes des grains équiaxes (à droite) ainsi que la position de la TCE (ligne blanche horizontale).

Sur la figure 3.7, les résultats du modèle de suivi de front pour une simulation de croissance colonnaire pur (en noir) et les résultats de notre modèle à 3+3 phases (en rouge) sont superposés. Sur la première courbe, le gradient de température au niveau du front est suivi en fonction de sa position. Sur la deuxième courbe, la vitesse du front colonnaire en fonction de sa position est présentée .

On constate que la TCE a eu lieu juste avant d'atteindre la valeur de vitesse de front maximale ou encore la valeur minimale de gradient thermique, ce qui correspond aux résultats attendus [19].

En effet, un mécanisme de déstabilisation du front a été proposé par Gandin [19] en se basant sur la solidification dirigée de lingots Al-Si et un modèle 1D : A mesure que la chaleur est évacuée à travers le solide et en l'absence de grains équiaxes, le gradient  $G_l$  dans le liquide devant le front va devenir de plus en plus faible. Si  $G_l$  est suffisamment faible, la chaleur latente dégagée par le front en croissance peut être évacuée en partie via le liquide et par la suite, un gradient local négatif  $G_l$  se forme dans le liquide. C'est ce passage d'une croissance contrainte à non-contrainte qui indique la déstabilisation des structures colonnaires favorisant la transition colonnaire équiaxe.

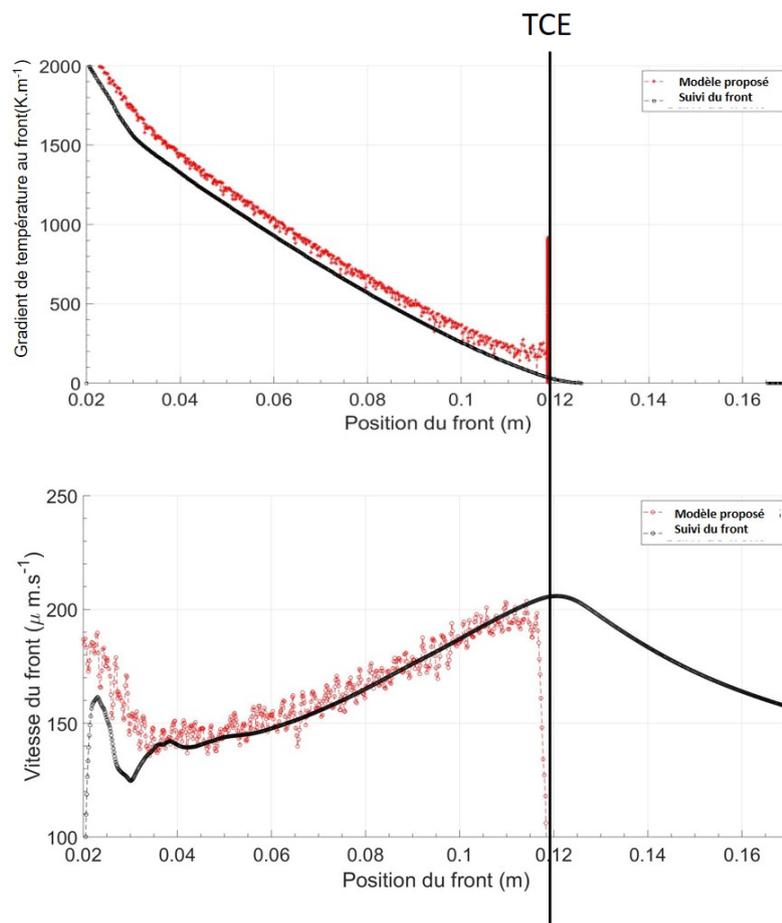


FIGURE 3.7: Comparaison du modèle actuel avec le modèle de suivi de front pour une croissance colonnaire pure [19] pour la vitesse du front (bas) et le gradient de température dans le liquide au niveau du front colonnaire (haut) en fonction de la position du front.

### 2.3 Etude paramétrique

Une étude paramétrique a été faite afin d'étudier l'influence de différents paramètres sur le résultat final de la position de la TCE. Plusieurs tailles de mailles ont été testées ainsi que plusieurs surfusions de germination et plusieurs densités de germes initiaux. La distance interdendritique primaire a été aussi variée. Le tableau ci-dessous présente une partie de l'étude paramétrique qui a été faite.

	Référence	1	2	3	4	5	6
Taille de maille $\Delta x$ (mm)	2,5	2,5	2,5	1	5	2,5	2,5
Surfusion de germination $\Delta T_N$ (K)	4,89	4,89	5	4,89	4,89	4,89	4,89
Densité de germination $N_0^{(2)}$ ( $m^{-3}$ )	$4,8 \times 10^7$	$10^7$	$9 \times 10^6$				
Espacement dendritique primaire $\lambda_1$ ( $\mu m$ )	460	5000	460	460	460	460	460
Position TCE (cm)	10,857	10,64	11,29	10,609	11,93	11,27	11,8

FIGURE 3.8: Position de la TCE calculée en fonction de la valeur de différents paramètres physiques et numériques du modèle (en rouge : les valeurs modifiées par rapport au premier cas de référence).

D'après cette étude, on a remarqué que la densité des grains équiaxes a une influence sur les résultats. En effet, plus la densité de germination des grains équiaxes est faible plus la position de la TCE est éloignée. Dans notre cas, une densité de  $9 \times 10^6 m^{-3}$  permet de retrouver le résultat expérimental. Néanmoins, ceci a une influence sur la taille finale des grains. En effet, une densité de  $9 \times 10^6 m^{-3}$  permet de retrouver une taille finale de 2.9 mm qui peut être une taille plus grossière que celle estimée par Leriche [9] de 1.5 mm (obtenue pour une densité de  $4.8 \times 10^7$ ). Le résultat est peu influencé dès lors que la taille de maille est inférieure à 2.5 mm. Quant à la surfusion de germination, on constate que si on augmente la surfusion, la position de la TCE est plus éloignée. Toutefois, on a choisi de ne pas faire varier ce paramètre dans une large gamme car il est choisi de façon à faire apparaître la position de la TCE juste avant le maximum

de la vitesse du front, correspondant à une surfusion estimée de  $4.8^{\circ}\text{C}$ . Enfin, on fait varier l'espacement interdendritique primaire et on constate que les résultats sont peu influencés par ce paramètre.

On peut conclure que le modèle colonnaire équiaxe à ce stade (sans considération du mouvement du liquide ni celui de solide) donne une évolution attendue des différents champs colonnaires et équiaxes avec une estimation de la transition colonnaire équiaxe qui varie toutefois, si on change la densité des germes initiale choisie.

### **3 Transition colonnaire-équiaxe avec convection du liquide et transport des grains équiaxes :**

Enfin, le modèle complet est testé pour un cas expérimental qui est présenté ci-dessous. Dans ce cas, nous allons activer toutes les briques du modèle : avancement du front, résolution de l'énergie, croissance des deux structures colonnaire et équiaxe avec la TCE, convection du liquide et transport des grains équiaxes. Ceci va être tout d'abord réalisé dans une simulation 2D. Puis, des résultats d'une simulation en 3D sont présentés.

La cinétique utilisée pour l'avancement du front colonnaire est basée sur le modèle KGT [42] tel que décrit dans la partie 1.2.1 du chapitre 2.

Pour tester l'effet du blocage solutal, on a choisit dans ce cas de ne pas considérer le blocage mécanique. Ceci veut dire que le front est bloqué quand la vitesse du front s'annule automatiquement lors d'enrichissement important en soluté devant le front colonnaire du à la présence des grains équiaxes.

#### **3.1 Présentation de l'expérience**

Des essais expérimentaux ont été réalisés dans le cadre du travail de doctorat de Marvin Gennesson [50] pour étudier l'effet des inoculants sur la taille des grains et sur la structure du lingot coulé. Une configuration de solidification expérimentale a été développée pour étudier les effets spécifiques des inoculants sur le développement des grains équiaxes. Comme cas de référence, un essai a

été développé avec une nuance d'acier 42CrMo4 sans ajout d'inoculant. Ce cas d'essai a servi de configuration de simulation pour tester l'ensemble des briques de notre modèle.

Le métal à fondre est préparé dans un creuset qui est chauffé par un inducteur jusqu'à atteindre une température de l'ordre de  $1560^{\circ} \pm 10^{\circ}\text{C}$ . Des thermocouples ont été placés dans le socle et dans l'isolant pour récupérer l'évolution temporelle de la température (figure 3.9-b). Le lingot expérimental de référence montre une structure colonnaire en bas du lingot qui s'étend sur une épaisseur voisine de 0.8 cm comme observé sur la figure 3.10-c. Le reste du lingot est constitué de structures équiaxes. La structure équiaxe obtenue est globalement globulaire et de taille fine, de l'ordre de quelques centaines de micromètres.

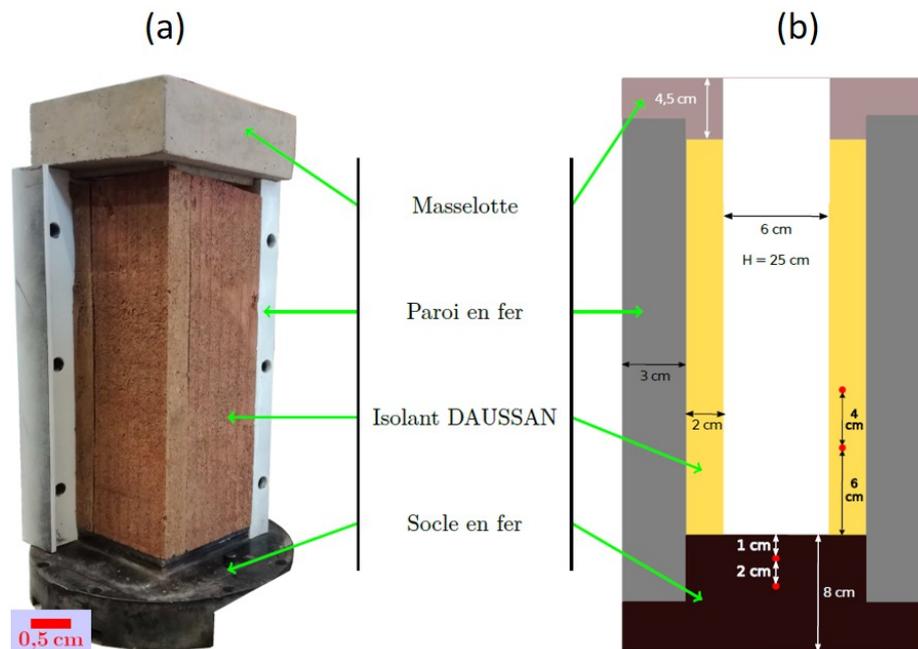


FIGURE 3.9: Les composants du moule (a) réels et (b) schématisés [50].

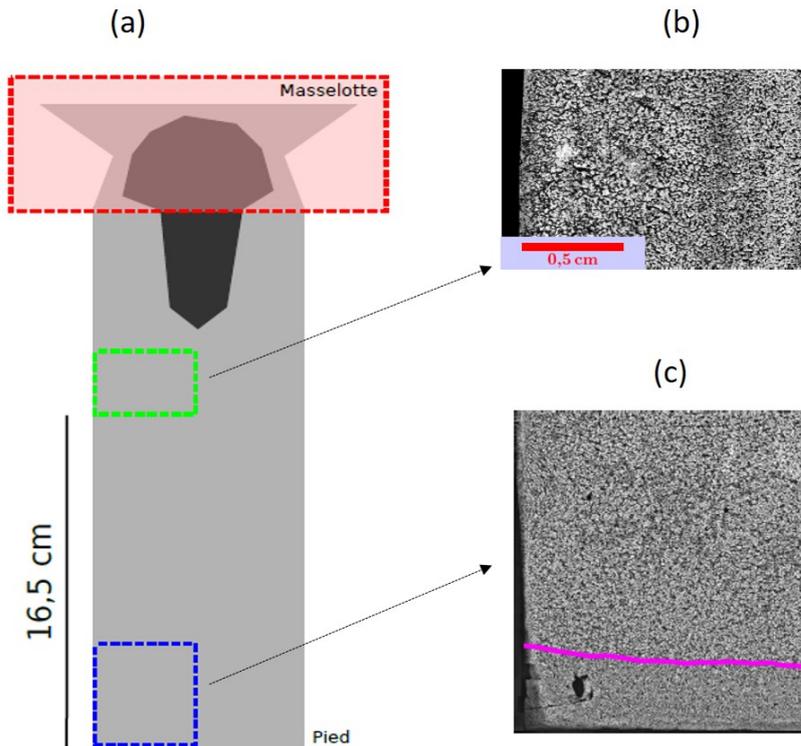


FIGURE 3.10: (a) Schéma du lingot avec la position des deux parties montrant (b) la structure des grains en haut du lingot et (c) la position expérimentale de la TCE en bas du lingot (ligne rose) [50].

## 3.2 Simulation 2D

### 3.2.1 Configuration de la simulation

L'alliage est considéré, dans le cadre approché du modèle proposé, comme binaire de composition Fe-0.4%C. Une modélisation 2D plane a tout d'abord été réalisée, le lingot réel étant de section transversale carrée. La modélisation est réduite à une moitié de section verticale en raison de la symétrie du problème. Une section rectangulaire de dimension  $0.03 \text{ m} \times 0.25 \text{ m}$  est utilisée pour les simulations. Le moule ne pouvant être considéré dans le code CIMLIB (pas de modélisation multi-domaines mise en place), seules les évolutions propres au lingot sont simulées. Des conditions aux limites thermiques sont imposées en surface, par 3 coefficients de transfert de chaleur estimés pour retrouver les données des mesures expérimentales. Des conditions de types Fourier sont ainsi appliquées tel que décrit à la figure 3.11 ci-dessous.

La formation des grains équiaxes est gérée par une loi de germination hé-

térogène dans le bain liquide avec une densité de germes de  $10^9 \text{ m}^{-3}$  et une surfusion de germination de 1 K. La fraction d'enveloppe de blocage des grains équiaxes par empilement est fixée à 0.27. À partir de cette limite les grains équiaxes sont considérés comme immobiles. Le calcul est réalisé sur un maillage isotrope de 2 mm. Le pas de temps macro utilisé est de 0.1 s. Le pas de temps exploité pour le suivi des évolutions des microstructures (germination, croissance) est de 0.01 s. Les paramètres thermodynamiques utilisés pour le matériau sont présentés dans le tableau C.3 de l'annexe C. Ce calcul a été effectué en parallèle sur 24 cœurs et a duré 16 heures pour décrire environ 30 min de solidification.

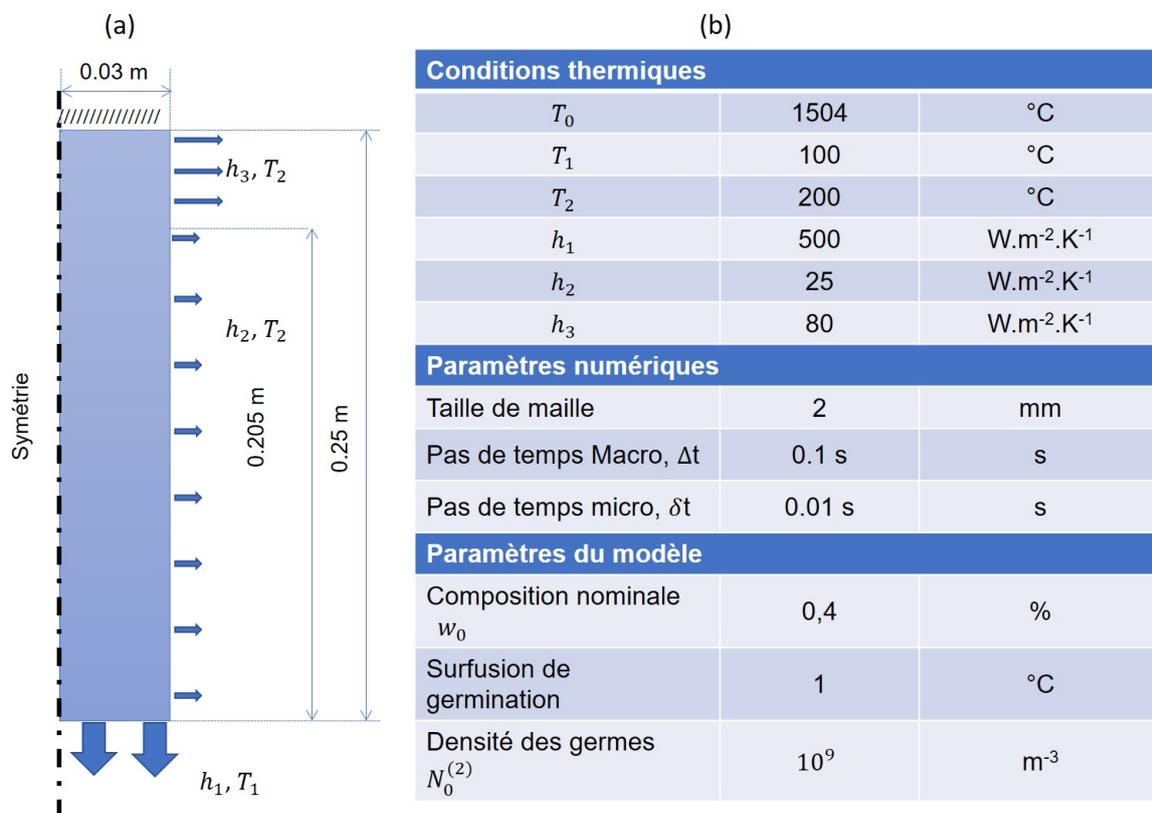


FIGURE 3.11: (a) Géométrie du domaine 2D simulé et conditions aux limites (b) Conditions thermiques, paramètres numériques et paramètres du modèle.

### 3.2.2 Résultats

Les résultats obtenus pendant la solidification sont présentés sur la figure 3.12. La ligne blanche représente la position du front colonnaire.

Un écoulement dirigé vers le bas du lingot est observé près de la paroi refroidie en raison des conditions thermiques. Un front colonnaire avance vers le haut

et à partir de la paroi droite du domaine induit par l'extraction de chaleur. En même temps, des grains équiaxes apparaissent devant le front colonnaire dans le domaine liquide en surfusion. Le liquide est ensuite progressivement enrichi par le soluté libéré lors de la formation des grains équiaxes conduisant au processus de blocage solutal (arrêt de la croissance des grains).

Les champs de vitesse et la distribution de densité de grains équiaxes montrent que les grains équiaxes sédimentent près de la paroi refroidie où ils sont initialement formés en avant du front colonnaire, avant d'être transportés vers le centre par le mouvement du liquide.

Un résultat en fin de solidification est montré sur la Fig. 3.13. Les grains solides, appauvris en soluté, occupent la région inférieure du lingot. Le liquide enrichi en soluté, de densité plus faible, a été transféré vers la région supérieure par convection. La ségrégation négative dans la zone inférieure est compensée par une ségrégation positive dans la partie supérieure. Quant à la morphologie des grains, on peut la déduire au travers du champ de fraction solide interne des grains qui est le rapport entre la fraction solide et la fraction d'enveloppe déterminée au moment du blocage des grains. Plus ce champ est important localement, plus la structure est globulitique. A l'inverse un ratio réduit indique une structure dendritique. On constate que la morphologie des grains est généralement globulitique à part dans la partie basse de la zone équiaxe qui est plutôt dendritique (figure 3.13), la fraction solide interne étant inférieure à 1. Cet aspect dendritique s'explique par le refroidissement important en bas du lingot qui engendre l'augmentation rapide de la taille des enveloppes. Par la suite, la fraction d'enveloppe atteint rapidement la fraction de blocage avant que le solide ait suffisamment de temps pour évoluer à l'intérieur des enveloppes. Le même aspect généralement globulitique a été observé expérimentalement [50]. La taille des grains équiaxes, comme on peut le voir à travers le champ de rayon du grain, est réduite. Elle est de l'ordre de quelques centaines de micromètres. Ceci coïncide aussi avec les résultats expérimentaux [50]. On constate aussi qu'elle est plus importante en bas du lingot. Ceci s'explique par le refroidissement rapide dans cette zone qui induit une augmentation rapide de la taille des grains. De

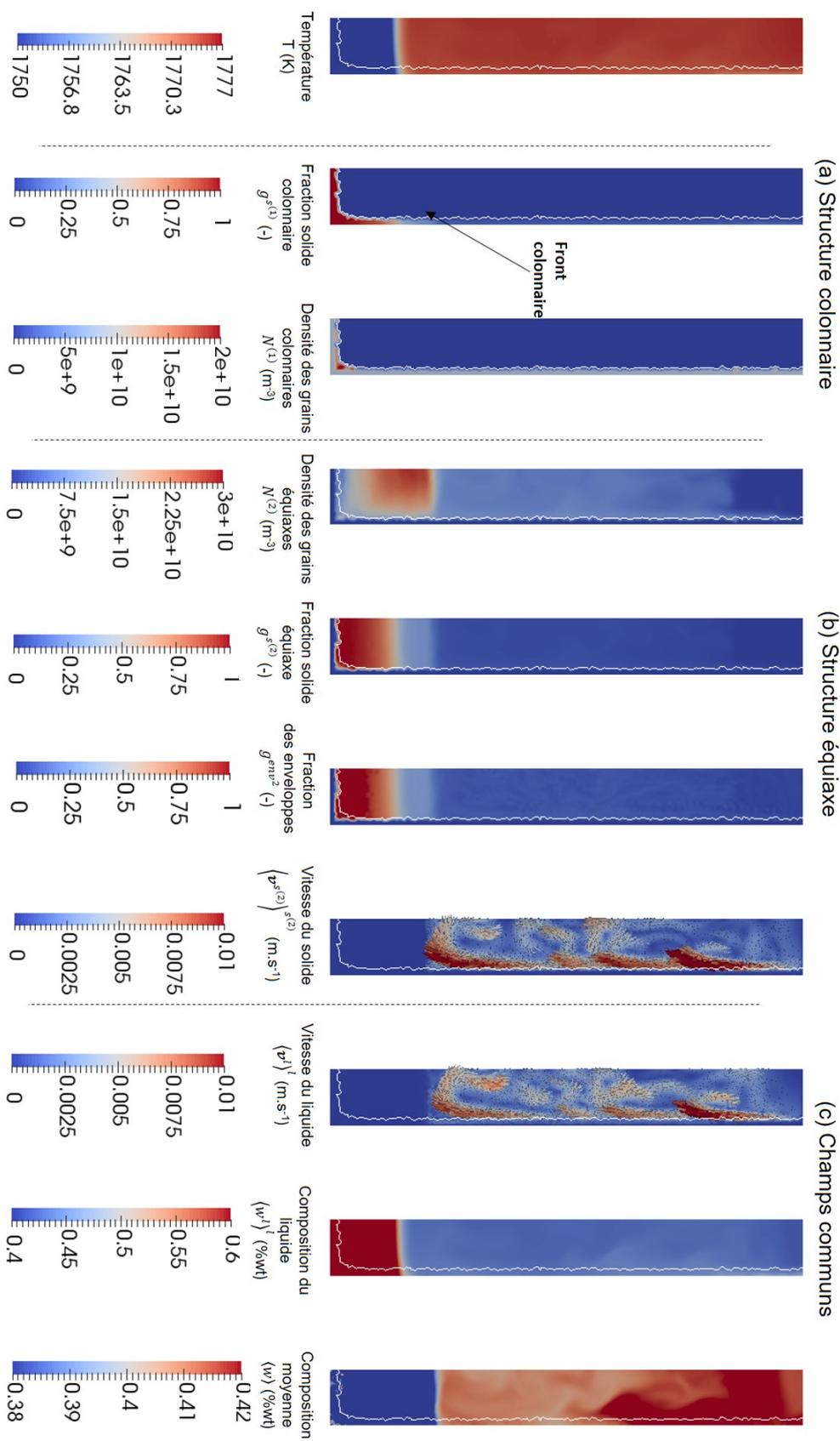


FIGURE 3.12: Présentation de différents champs en cours de solidification (à 120 s) relatifs respectivement à (a) la structure colonnaire et (b) la structure équiaxe. Les champs communs sont représentés en (c).

plus, ceci peut aussi s'expliquer par la densité faible des grains dans cette région comme on peut le voir sur la carte de densité de grains à gauche de la figure 3.13. Le même processus, moins marqué, est visible dans la partie haute du lingot.

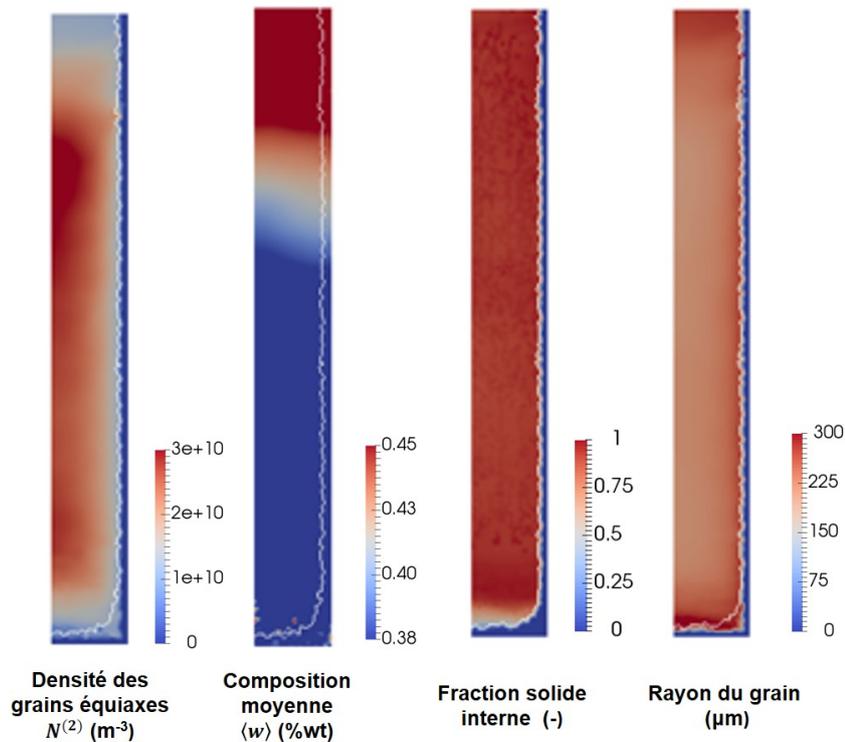


FIGURE 3.13: Résultats de différents champs en fin de solidification.

### 3.3 Simulation 3 D

#### 3.3.1 Configuration de la simulation

Dans un deuxième temps, une simulation 3D du même cas a été réalisée. Ceci permet d'être plus représentatif de la pièce réelle mais entraîne un temps de calcul plus important. De plus, ce travail est une préparation aux simulations du lingot industriel en 3D où nous voulons modéliser la physique la plus proche de la réalité des processus en œuvre. La géométrie réelle du lingot est un parallélépipède à base carré. Nous avons choisi d'utiliser une géométrie cylindrique à volume équivalent. Par la suite, un quart du cylindre est simulé dont la géométrie est décrite à la Fig. 3.14. Pour imposer les conditions thermiques on considère, de même que précédemment, trois coefficients de transfert thermique associés à des surfaces spécifiques de la lingotière, avec deux températures extérieures

telles que décrites à la Fig. 3.14. On applique ainsi une condition de Fourier pour simuler l'extraction de chaleur à travers la base métallique et la paroi latérale. Les paramètres du modèle et les conditions thermiques (Fig. 3.14) restent inchangés. Le calcul est réalisé avec un maillage éléments finis isotrope de taille de maille moyenne de 2.5 mm. Le pas de temps macro utilisé est conservé à 0.1 s. Ce calcul a été effectué en parallèle sur un nœud de 28 cœurs et a duré 34 heures pour décrire environ 30 min de solidification.

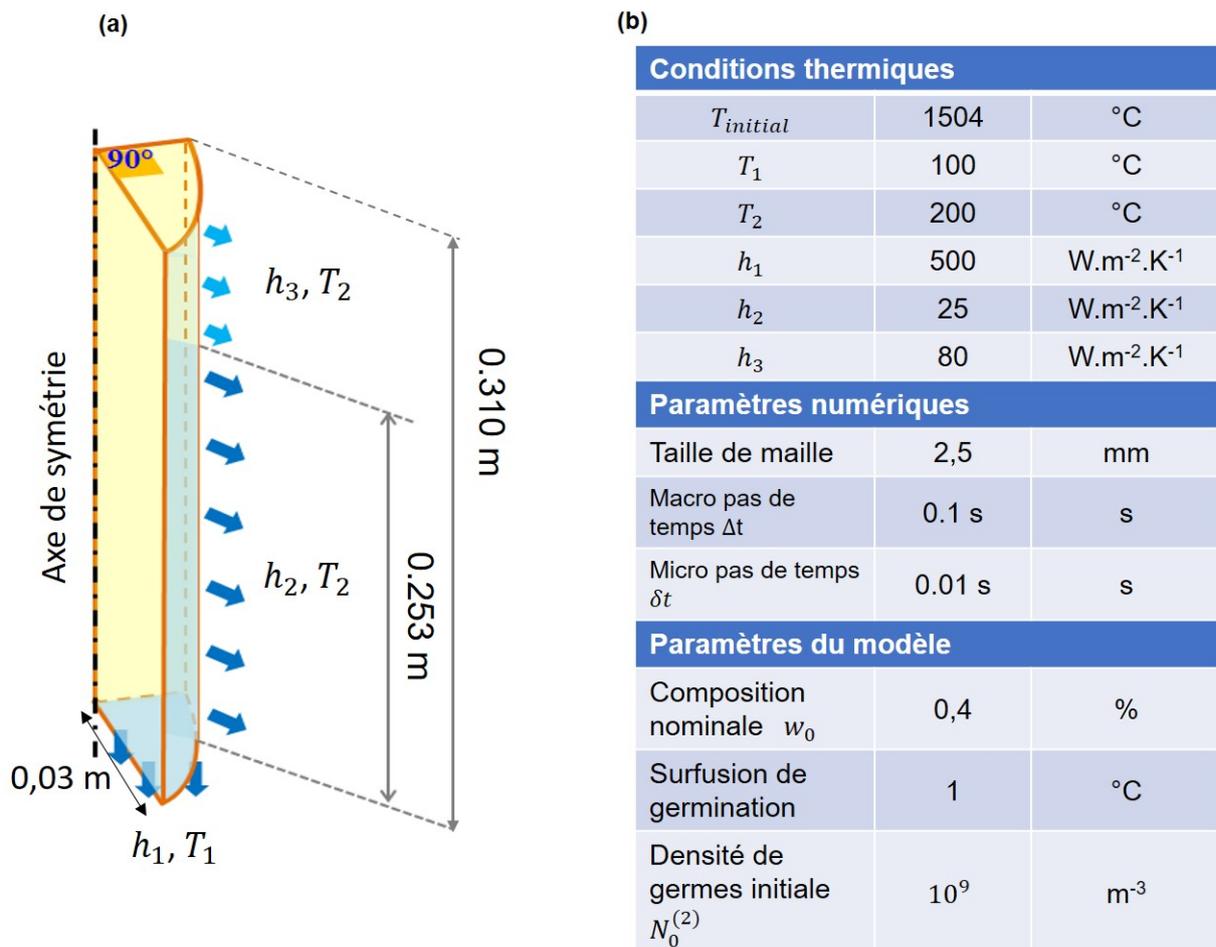


FIGURE 3.14: (a) Géométrie du domaine 3D simulé et conditions aux limites, (b) conditions thermiques, paramètres numériques et paramètres du modèle.

### 3.3.2 Résultats

Une comparaison entre les résultats des calculs 2D et 3D montre une tendance générale similaire entre les 2 approches. Sur la figure 3.15, différents champs sont représentés sur une coupe verticale à 45° et 4 coupes transversales

à ( 0.05, 0.1, 0.15 et 0.2 m). La ligne blanche représente toujours la position du front colonnaire.

De même que pour le cas 2D, le refroidissement se fait principalement par le bas. Le front colonnaire avance du bas vers le haut et de la paroi latérale vers le centre similairement. Mais il est rapidement arrêté par les grains équiaxes qui sédimentent en bas du lingot. On peut voir l'enrichissement du liquide par le soluté en haut du lingot. Ceci s'explique par un flux ascendant de liquide enrichi et moins dense au centre du lingot.

Sur la figure [3.16](#), les résultats en fin de solidification sont présentés. On peut constater que l'avancement du front colonnaire au niveau de la paroi latérale est un peu plus marqué dans la simulation 3D. Ceci peut être expliqué par l'extraction de chaleur surfacique rapportée au volume plus important en 3D comparativement au 2D. Pour la morphologie générale de la structure équiaxe et la taille des grains, on obtient la même tendance que le 2D. C'est-à-dire une morphologie globulaire partout à l'exception de la partie basse de la zone équiaxe.

En comparant les résultats numériques aux résultats expérimentaux [\[50\]](#), on constate une différence au niveau de l'étendu de la zone colonnaire. En effet, les résultats expérimentaux montrent seulement une zone colonnaire de faible étendu en bas du lingot, le reste du lingot étant constitué de grains équiaxes. Toutefois, les simulations montrent une zone colonnaire en bas du lingot ainsi que sur les parois. Cette différence peut s'expliquer par plusieurs raisons. La première raison est liée aux conditions aux limites qui sont estimées aux frontières d'un monodomaine, sans calcul direct des échanges avec le moule et le réfractaire.

De plus, pour des raisons numériques, la position zero de la Level Set au début du calcul est initialisée éloignée du bord d'une épaisseur de l'ordre d'une taille de maille. Sinon, des problèmes numériques liés à la convection de la Level Set peuvent être rencontrés. Toutefois, ceci peut entraîner une mauvaise estimation de la position du front au début du calcul. Pour palier à ce problème, le front colonnaire suit au début du calcul, le liquidus. Ceci explique la position initiale de la Level Set qui se trouve loin des bords au début du calcul. Cette

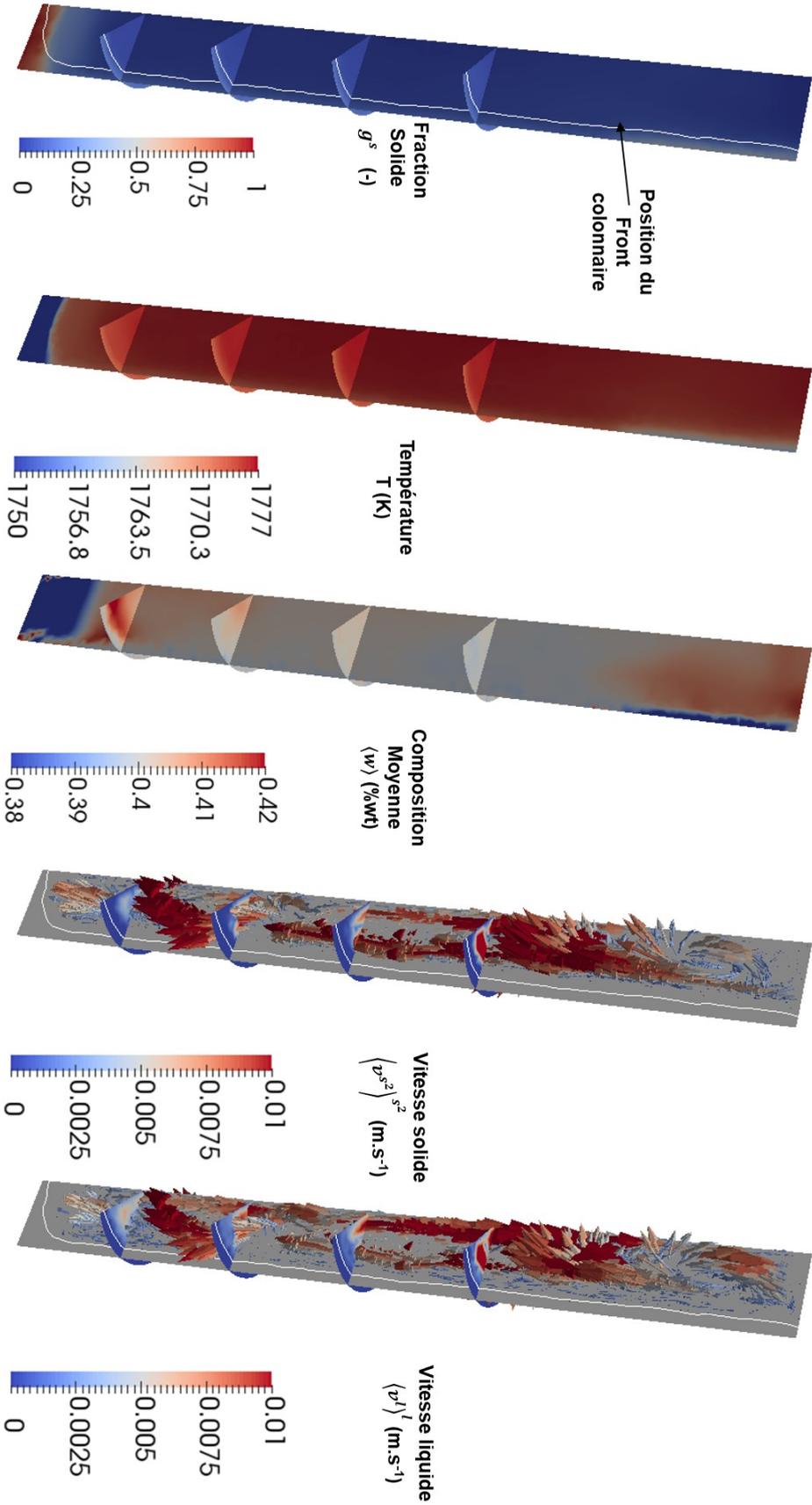


FIGURE 3.15: Résultats de différents champs en cours de solidification (à 50 s).

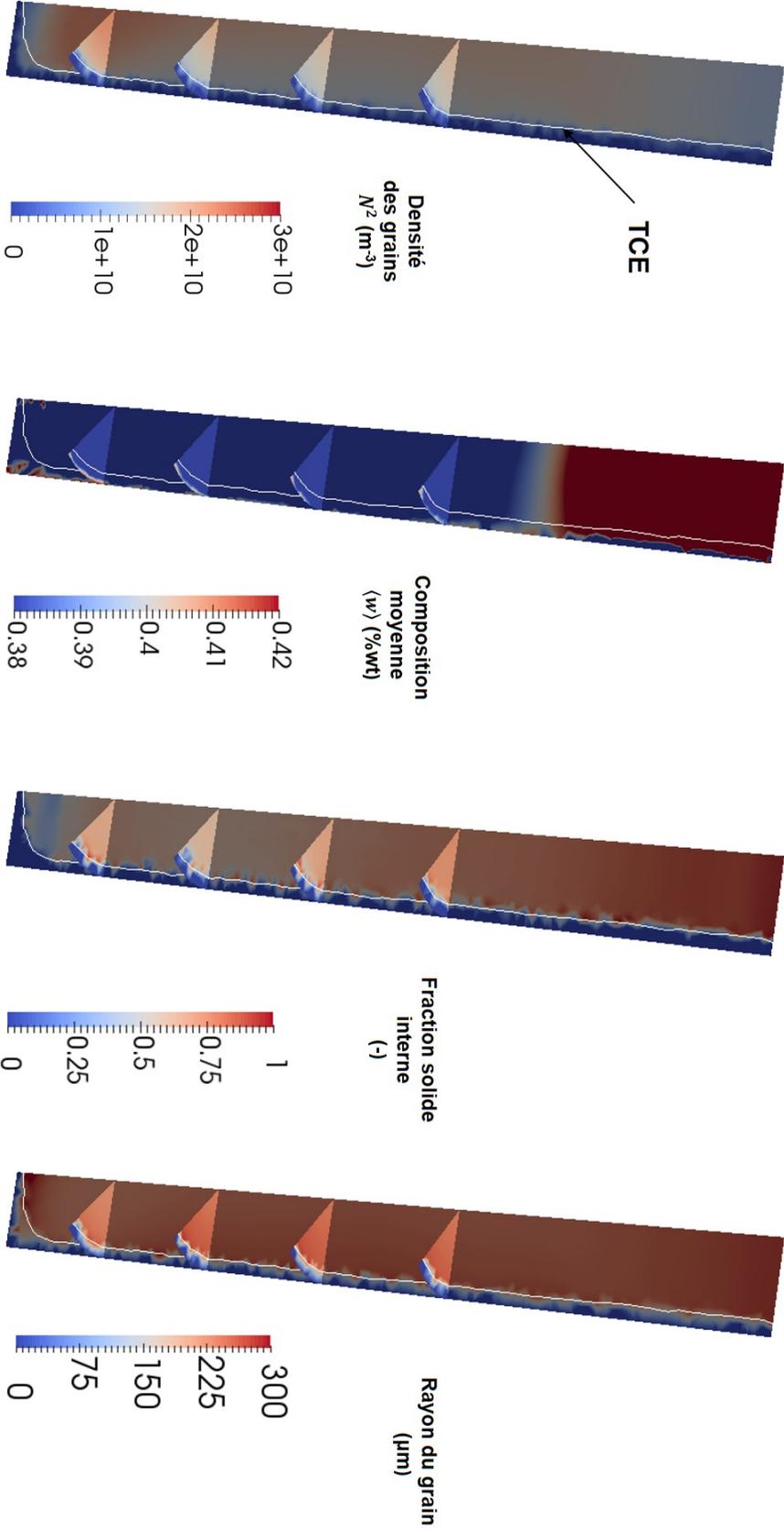


FIGURE 3.16: Résultats de différents champs en fin de solidification.

distance peut être minimisée si on maille plus finement au bord du domaine.

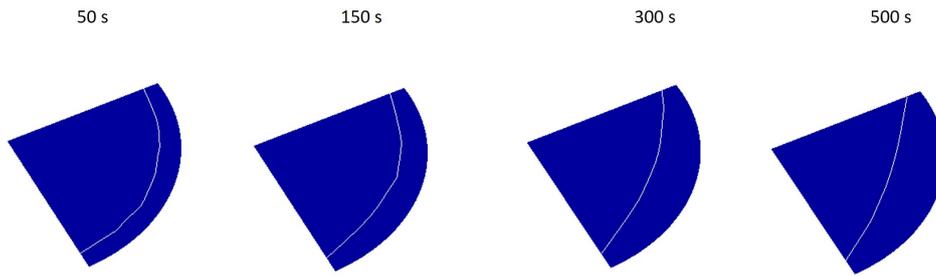


FIGURE 3.17: Évolution de la position du front colonnaire en fonction du temps avant la correction du problème de réinitialisation

Nous avons dans ce cas 3D, au début, constaté un problème relatif à l'avancement du front. En effet, malgré une vitesse faible du front, la Level Set avance d'une manière non monotone comme montré sur une section transversale (figure 3.17). Après analyse, il a été conclu que ce faux avancement est dû au modèle de réinitialisation de la fonction Level Set dans le cas 3D. En effet, dans le cas de l'utilisation d'un maillage non raffiné autour de la Level Set, le modèle de réinitialisation géométrique de la fonction distance a du mal à converger. Par la suite, un avancement incorrect de la Level Set est obtenu. Pour remédier à ce problème, nous avons choisi d'arrêter la réinitialisation au bout de quelques secondes, et de laisser le calcul se poursuivre sans réinitialisation. D'un côté, la réinitialisation est importante pour stabiliser l'avancement du front au début du calcul. Mais, de l'autre côté, le front est arrêté très rapidement, la vitesse de déplacement du front étant très faible. Par la suite, la convection de la Level Set seule suffit pour déterminer la nouvelle position du front, sans étape de réinitialisation. Toutefois, pour palier complètement à ce problème, il faut mailler très finement autour de la Level Set. Ceci est très coûteux en temps de calcul. Il est préférable de mailler finement seulement autour de la Level Set. Comme cette dernière se déplace au cours de la simulation, des techniques de remaillage sont à utiliser pour suivre son avancement. Des tests dans ce sens ont été initiés mais des problèmes numériques ont été rencontrés et restent à résoudre.



# Chapitre 4

## Applications Industrielles

Après avoir testé le modèle sur des cas de petite taille (quelques centimètres), nous allons dans ce chapitre appliquer notre modèle complet sur des cas de taille industrielle (de l'ordre de deux mètres de hauteur). Ceci représente l'objectif final de ce travail. Nous avons choisi pour ceci deux lingots. Le premier est un lingot de 3.3 tonnes coulé par Aubert&Duval. Ce lingot a été simulé dans le cadre des travaux de Nguyen [26] mais pour une croissance purement équiaxe. Le deuxième lingot a été réalisé dans le cadre du projet Soft-Defis. C'est un lingot de 4.2 tonnes coulé par Industeel. Des caractérisations expérimentales ont été réalisées dans le cadre du projet.

### 1 Lingot 3.3 t

#### 1.1 Présentation du lingot et des résultats expérimentaux

Dans un premier temps, le modèle est appliqué au lingot industriel de 3.3 t coulé par Aubert et Duval. Le matériau utilisé est un alliage dont la nuance est nommée 35NCD16 qu'on va supposer binaire sous la forme d'un alliage Fe-à 0.36 % pds C. La composition exacte de l'alliage est Fe-0.36%pds C-0.33%pds Si-0.3 %pds Mo-0.37%pds Mn-1.7 %pds Ni-3.8 %pds Ni-0.06%pds V [9]. La section réelle du lingot est octogonale. Il est coulé en source avec une surchauffe de 30°C. Le temps de remplissage est de 8 minutes. La partie inférieure est en contact avec le moule. La partie supérieure du métal liquide est en contact avec un réfractaire. Enfin, une poudre exothermique est utilisée sur la surface supé-

rieure (figure 4.1-a). L'échange thermique se fait à travers les parois externes du moule par convection naturelle et par rayonnement. Le temps de solidification total est de 90 minutes.

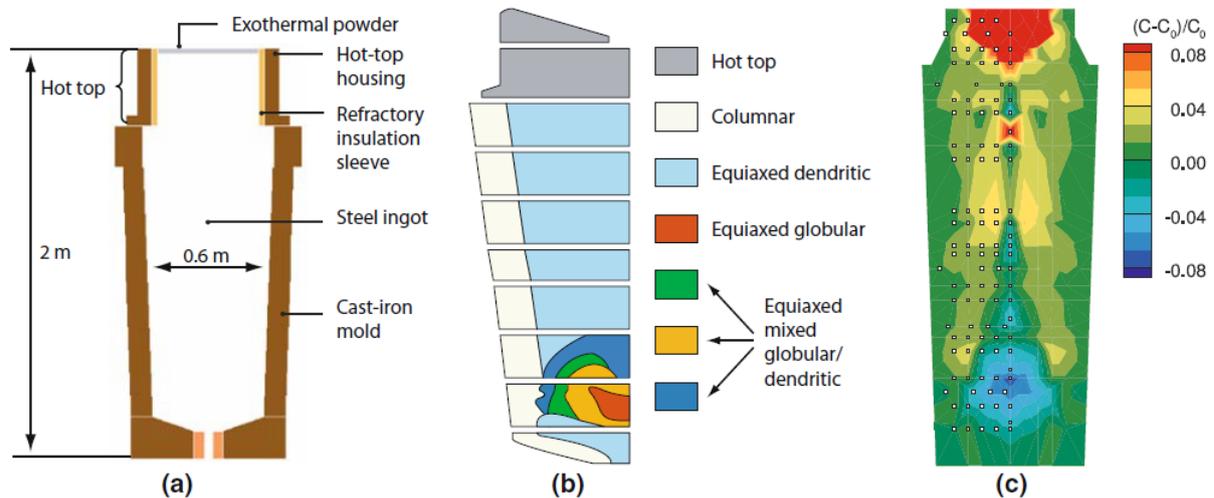


FIGURE 4.1: Caractéristiques du lingot d'acier de 3,3 tonnes : (a) dimensions du lingot et du moule, (b) morphologie des grains dans le lingot observés expérimentalement, et (c) carte de ségrégation et points de mesure [51].

Comme on peut le voir sur la figure 4.1-b, à partir des résultats d'une série de coupes macrographiques réalisées sur le lingot, une carte simplifiée des structures a été donnée par Combeau et al. [51]. D'après cette carte, les auteurs observent une structure colonnaire d'une épaisseur proche de 8 cm partout au bord du lingot excepté dans la zone centrale en bas du lingot (le pied). La structure de la masselotte n'est pas donnée. Le reste du lingot est constitué de structures équiaxes globulitique et dendritique. Une zone purement globulitique est située à une hauteur de 25 cm du bas du lingot autour de laquelle se trouve une zone mixte (globulaire et dendritique). Le reste de la structure est équiaxe dendritique. La figure 4.1-c présente la carte de macroségrégation en carbone sur laquelle on peut voir une ségrégation négative dans la zone où une structure majoritairement équiaxe globulaire est présente. Ensuite, une ségrégation positive est visible dans le reste du lingot voire fortement positive dans la partie haute du lingot.

Le choix de considérer uniquement le carbone comme élément d'addition se

justifie par le fait que le carbone est l'élément qui joue le rôle le plus important dans la force motrice qui engendre les gradients thermiques et solutaux comme justifié par Combeau et al. [5] et Leriche [9]. Les paramètres numériques, les conditions limites et les conditions de germination utilisées pour le matériau sont présentés sur la figure 4.2-b. Les propriétés thermodynamiques du matériau utilisé sont dans le tableau C.4 de l'annexe C. Le section réelle du lingot est octogonale. Toutefois pour simplifier et gagner en temps de calcul, la simulation 3D a été réalisée sur un quart de cylindre (0.3 m de rayon et 1.8 m de hauteur).

Comme la stratégie est de développer des solveurs dans le domaine en cours de solidification pour implémentation dans le logiciel THERCAST, il a été choisi de ne pas considérer le moule dans le code CIMLIB. Seules les évolutions du métal coulé dans le lingot sont simulées. Les conditions thermiques sont imposées en surface, par 2 coefficients de transfert thermique estimés pour retrouver les données des mesures expérimentales. Une condition de Fourier est ainsi appliquée telle que décrit sur la figure 4.2-a ci-dessous. L'étape de remplissage du lingot par le pied est négligée. On suppose que le lingot est déjà rempli avec une température initiale égale à la température du liquidus de 1503°C. Les conditions thermiques ainsi que d'autres paramètres numériques sont résumés sur la figure 4.2-b.

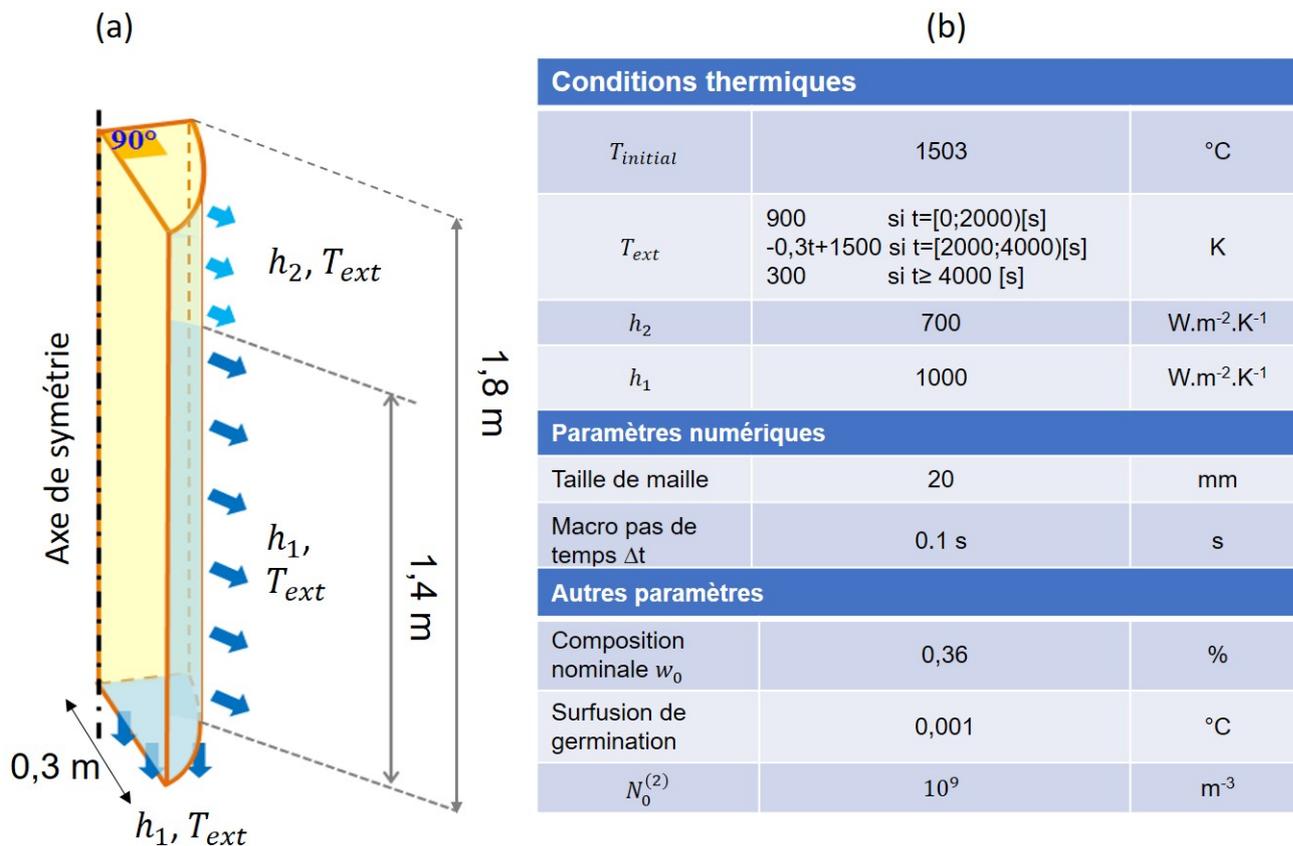


FIGURE 4.2: (a) Géométrie du domaine 3D simulé et conditions aux limites [26] (b) conditions thermiques, paramètres numériques et paramètres du modèle.

## 1.2 Résultats avec germination hétérogène

Dans les calculs de ce paragraphe, seule la germination hétérogène sera considérée comme source des grains équiaxes. Elle est gérée par une loi de germination dans le bain liquide avec une densité de germes de  $10^9 m^{-3}$  et une surfusion de germination de  $0.001^\circ C$ . La fraction d'enveloppe de blocage des grains équiaxes par empilement est fixée à 0.27. Les deux critères de blocage solutal et mécanique sont employés avec une valeur limite de Hunt  $g_{Hunt} = 0.5$  pour le blocage mécanique.

À partir de cette limite les grains équiaxes sont immobiles. Le calcul est réalisé avec un maillage éléments finis isotrope de taille de maille 20 mm ( 115 830 éléments 22 113 noeuds ). Il a été effectué en parallèle sur un noeud de 28 cœurs et a duré 60 heures pour décrire environ 90 min de solidification.

La figure 4.3 présente les résultats de la simulation au temps 150 s. De gauche à droite on retrouve la fraction solide, la température, la composition moyenne, la vitesse intrinsèque du solide et la vitesse intrinsèque du liquide. La ligne blanche indique la position du front colonnaire à cet instant. Une coupe verticale à  $45^\circ$  et 4 coupes transversales à (0.36, 0.72, 1.08 et 1.44 m) sont présentées. On peut voir d'après le champ de la température que le refroidissement se fait progressivement du bas en haut et de la paroi latérale à l'intérieur du lingot. Le front colonnaire commence à avancer en suivant le gradient thermique. En même temps des grains équiaxes apparaissent devant le front dans la zone surfondue. On remarque que l'écoulement du liquide est descendant le long de la paroi refroidie. Ceci s'explique par la sédimentation des grains équiaxes. En effet, dans le cas où seul un front colonnaire (solide fixe) avance, sans le mouvement des grains équiaxes, on observe généralement un liquide descendant par effet thermique au début de la simulation puis il devient ascendant par effet solutal (si un élément plus léger ségrège dans le liquide comme le carbone dans le cas présent). Dans le cas étudié, la sédimentation des grains accentue le flux descendant. Ensuite, les grains en suspension sont entraînés par l'écoulement et remontent au centre du lingot. La similarité des vitesses liquide et solide reflète une dépendance couplée entre les mouvements des deux phases : le mouvement de chacune des phases entraîne l'autre. Une ségrégation négative commence à apparaître en bas du lingot due à l'accumulation des grains équiaxes pauvres en soluté.

La figure 4.4 présente les résultats en fin de solidification ( 5400 s). Contrairement au précédent cas expérimental ( présenté dans le paragraphe 3 du chapitre 3) où la morphologie dominante des grains équiaxes est globulaire, ce cas industriel présente globalement une structure dendritique. Ceci peut être vu à travers le champ de la fraction solide interne au blocage et expliqué par le fait que le temps de solidification est beaucoup plus important au regard de la taille du domaine simulé. Par la suite, les grains atteignent la fraction d'empilement avant d'être complètement solidifiés.

Quant à la zone colonnaire, on remarque un arrêt rapide du front colonnaire à

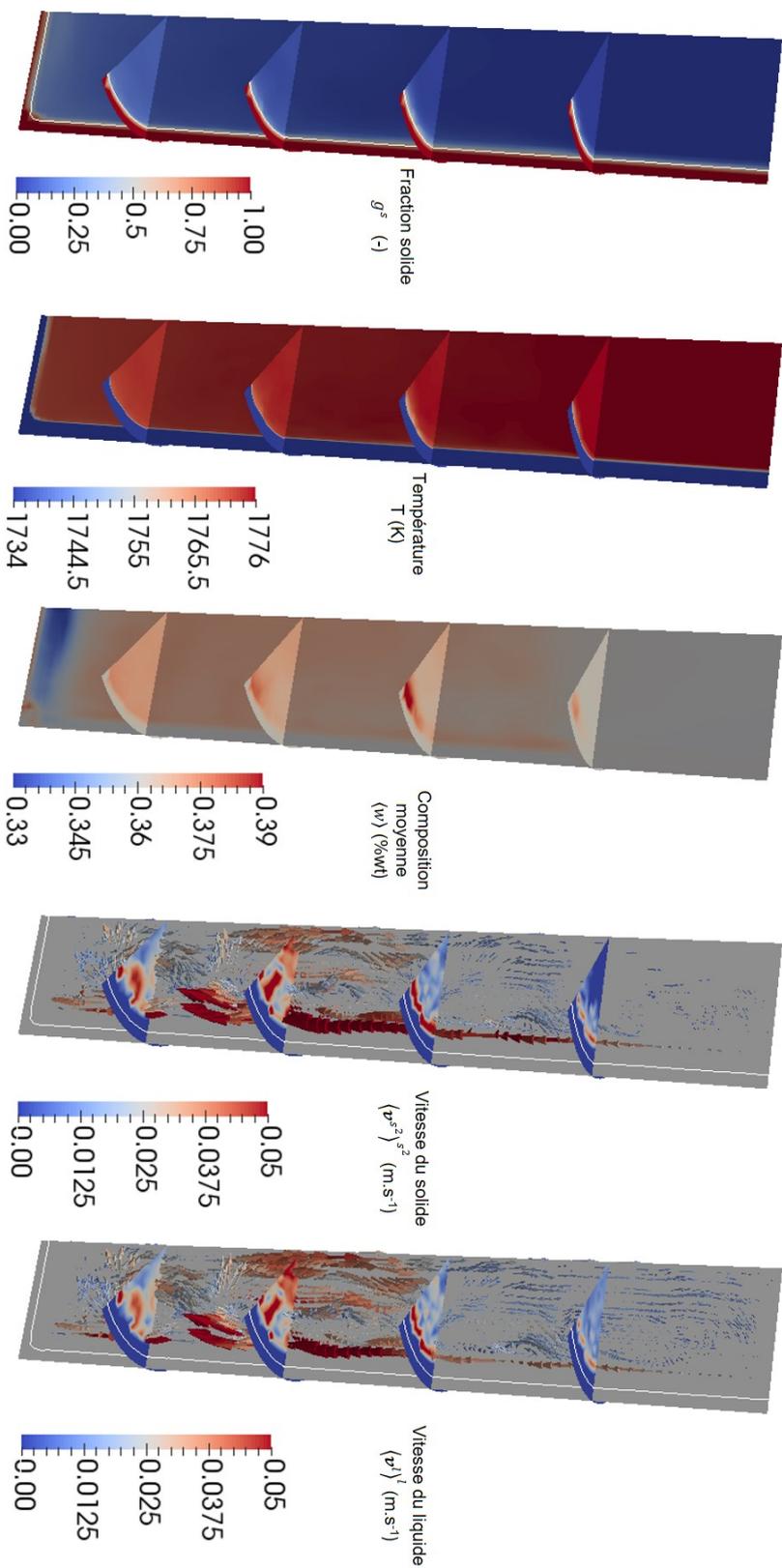


FIGURE 4.3: Distribution des champs à 150 s, de gauche à droite : fraction de solide, température, composition moyenne en carbone, vitesse du solide et vitesse du liquide. L'iso-ligne blanche représente la position du front colonnaire.

une distance de l'ordre de 4 cm . Dans le cas général, l'épaisseur prédite de zone colonnaire est fine en bas du lingot et devient progressivement plus importante jusqu'à la masselotte.

La figure 4.5 présente les profils de ségrégation sur l'axe du lingot obtenus à partir des mesures expérimentales (points rouges), du modèle où les grains sont tous équiaxes de morphologie globulaire [26] (en tirets bleu) et de notre modèle colonnaire-équiaxe dendritique avec TCE (trait continu orange). On peut voir que le modèle globulitique 2D prédit la tendance générale qualitative de la ségrégation mais son intensité est beaucoup plus importante que les mesures expérimentales en bas du lingot. Le modèle plus complet proposé ici permet de mieux prédire le profil de ségrégation. Toutefois, on peut constater que l'inversion de ségrégation ( passage d'une ségrégation négative à positive) a lieu à une position un peu plus basse que dans le cas expérimental et la ségrégation positive prédite par le modèle est moins importante que celle de l'expérience en haut du lingot. La conservation de soluté a été vérifiée est elle est bien assurée.

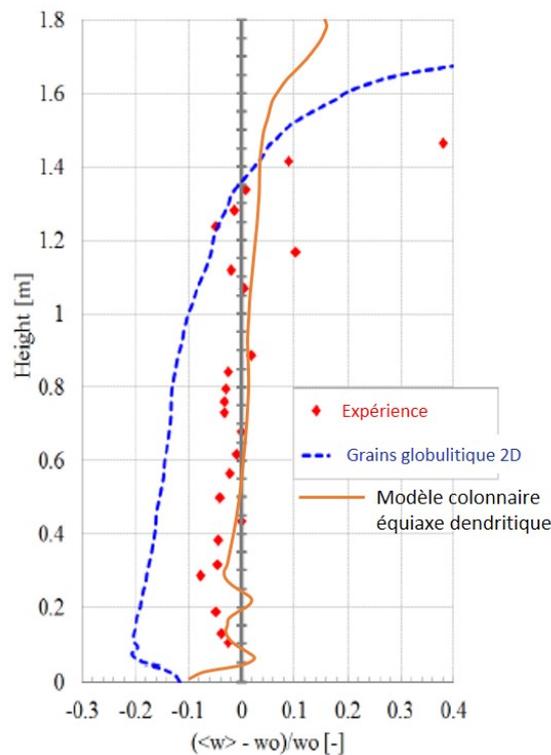


FIGURE 4.5: Courbe de ségrégation au centre du lingot.

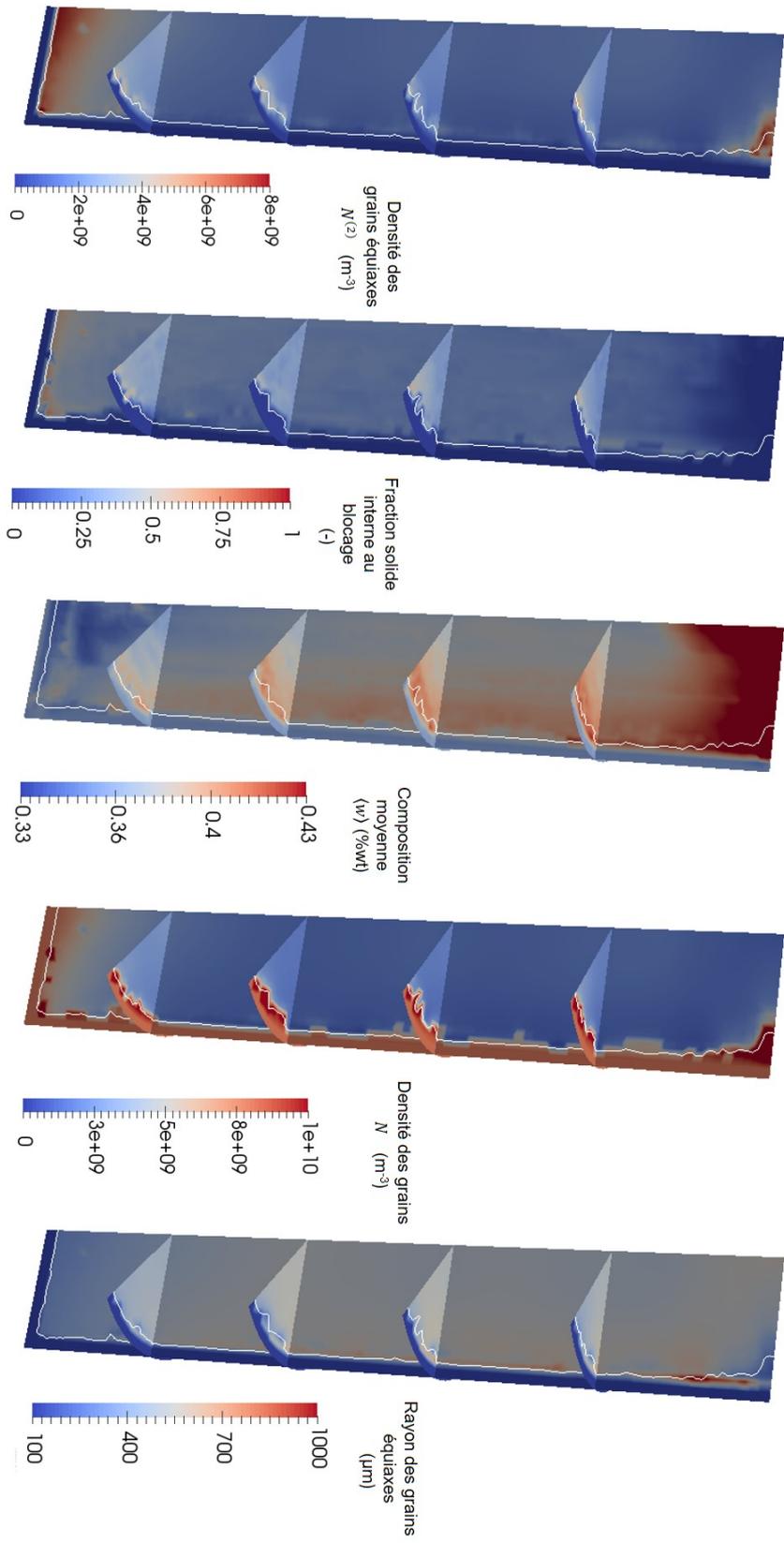


FIGURE 4.4: Cartes finales de gauche à droite de : densité des grains équiaxes, fraction solide interne au blocage, composition moyenne, densité des grains et rayon final des grains.

### 1.3 Résultats avec fragmentation

Dans un deuxième temps et pour voir l'effet de la fragmentation comme source de grains équiaxes, notre modèle d'injection surfacique a été mis en œuvre. Dans les calculs suivants, on va négliger la germination hétérogène et seule l'injection surfacique sera considérée.

La figure 4.6 présente un temps intermédiaire (400 s) du calcul. De gauche à droite, les champs présentés sont la densité des grains équiaxes avec la vitesse du liquide, la densité des sous-structures colonnaires avec la vitesse du solide, la composition moyenne et la densité des fragments. Un flux  $\phi = 10^4$  fragments.m<sup>-2</sup>.s<sup>-1</sup> avec un gradient critique  $\|\nabla T\|_{critique} = 1000$  K.m<sup>-1</sup> ont été adoptés pour ce calcul. Comme on peut voir sur la carte de densité des fragments, vu que le critère du gradient est atteint partout devant le front à cet instant, la fragmentation est activée dans tous les éléments devant le front. Ces fragments formés vont ensuite croître et avoir un mouvement descendant le long du front colonnaire.

La figure 4.7 présente les résultats en fin de solidification. On remarque que l'avancement du front dans ce cas est plus important que dans le cas avec la germination hétérogène (Fig. 4.4). L'épaisseur est presque constante le long des parois externes du lingot, contrairement au cas précédent où le front avance plus en haut du lingot qu'en bas. Ceci s'approche plus qualitativement du cas expérimental où une épaisseur uniforme de zone colonnaire de 8 cm a été observée (Fig. 4.1).

La deuxième carte à gauche représente la carte de la fraction solide interne au moment du blocage des grains équiaxes. On constate qu'elle a une valeur plus élevée en bas du lingot. Ceci montre que la structure équiaxe est plutôt globulitique en bas du lingot. Une zone équiaxe mixte : globulitique/dendritique se trouve au dessus et le reste du lingot est principalement dendritique.

Ceci s'approche des résultats expérimentaux (Fig. 4.1) excepté la zone équiaxe dendritique tout en bas du lingot. Les différences tout en bas du lingot peuvent s'expliquer par l'absence de modélisation de l'amenée de métal liquide. Le rayon des grains équiaxes estimé est plus faible en bas du lingot là où la den-

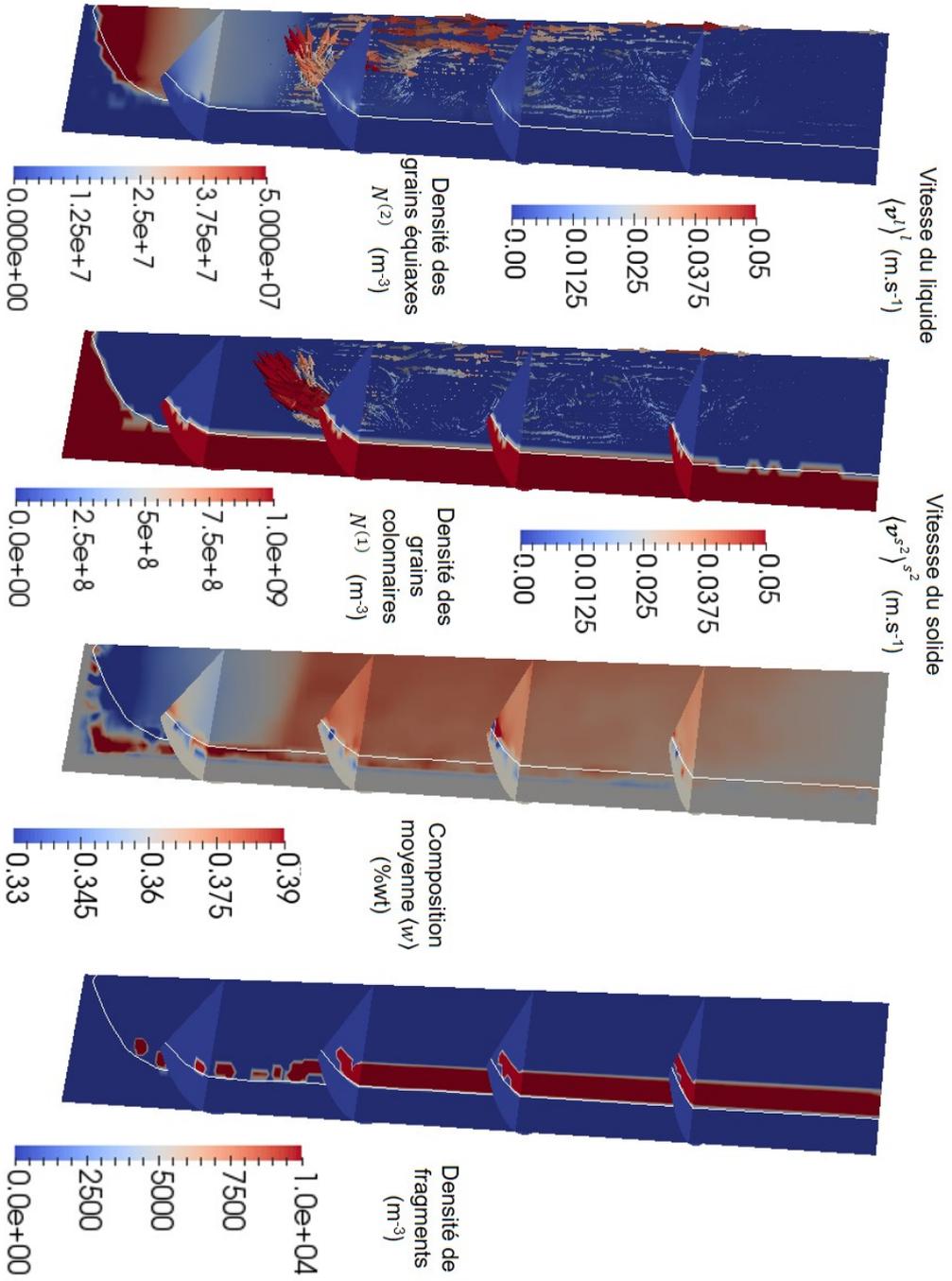


FIGURE 4.6: Distribution des variables à 400 s, de gauche à droite : densité des grains équiaxes avec la vitesse du liquide, la densité des sous-structures colonnaires avec la vitesse du solide, la composition moyenne en carbone et la densité des fragments. L'iso-ligne blanche affiche la position du front colonnaire.

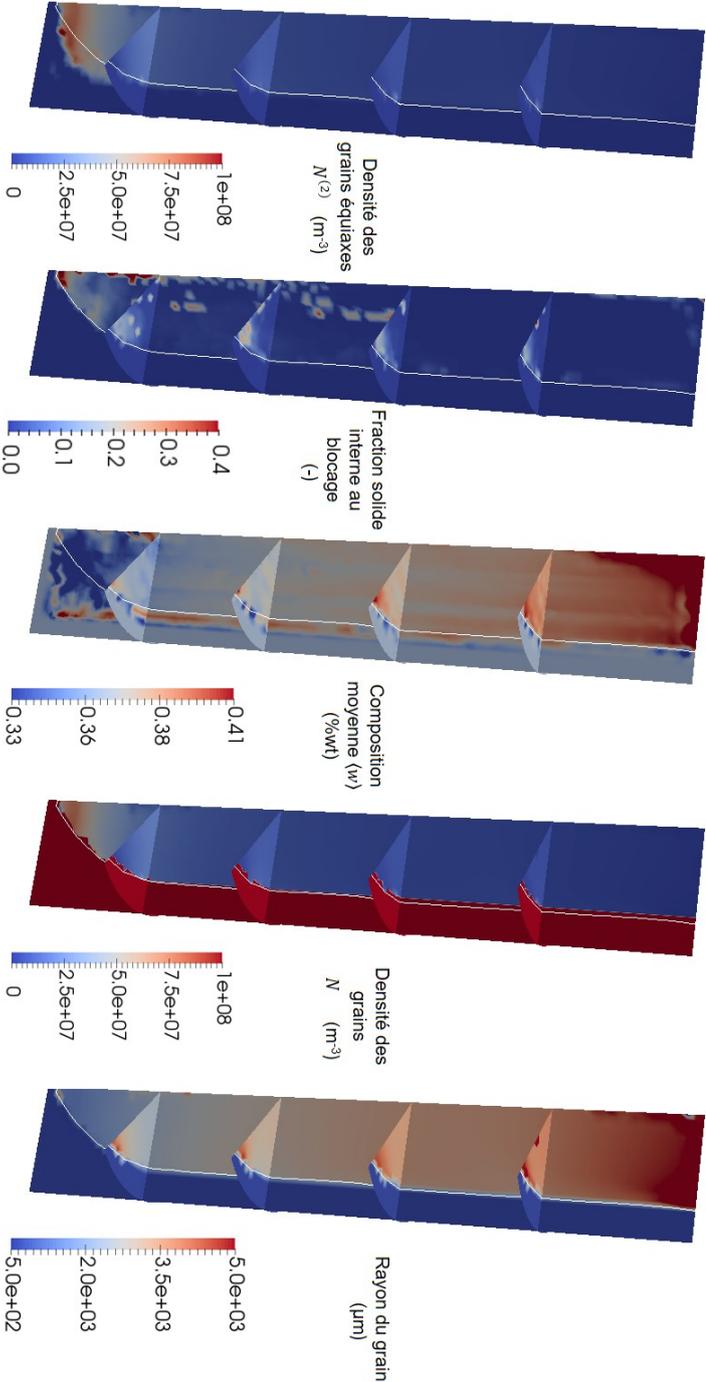


FIGURE 4.7: Cartes finales de gauche à droite de : densité des grains équiaxes, fraction solide interne au blocage, composition moyenne, densité des grains et rayon final du grain.

sité des grains équiaxes est plus importante (dans le cône de sédimentation : 0.5 mm). La taille des grains est de plus en plus importante en allant du bas vers le haut du lingot pour atteindre des tailles de l'ordre de 5 mm tout en haut du lingot.

Quand à la carte de macroségrégation, on constate la même tendance avec une ségrégation négative dans le cône de sédimentation et une ségrégation positive en haut du lingot.

Comme cela a été établi pour le cas de la simulation avec germination hétérogène, le profil de ségrégation sur l'axe du lingot obtenu à partir de notre modèle colonnaire-équiaxe dendritique avec fragmentation (trait bleu continu) a été comparé (Fig. 4.8) à celui obtenu à partir des mesures expérimentales (points rouges) et du modèle équiaxe pur globulaire [26](en tirets bleu).

On constate que comme dans le cas précédent avec germination hétérogène, notre modèle colonnaire équiaxe dendritique permet une meilleur prédiction du profil de ségrégation que le modèle équiaxe globulitique. De plus, dans ce cas avec fragmentation, on constate une meilleure prédiction de la ségrégation positive en haut du lingot. La conservation de soluté a été, aussi dans ce cas, vérifiée est elle est bien assurée.

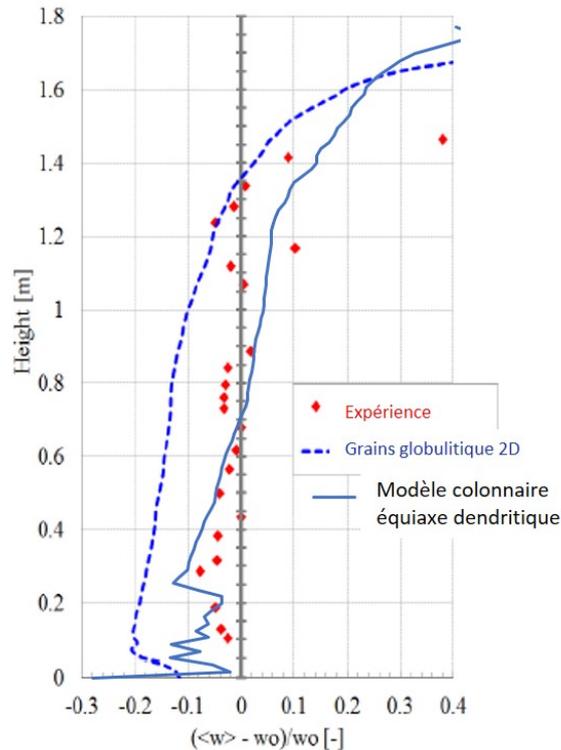


FIGURE 4.8: Courbe de ségrégation au centre du lingot.

## 2 Lingot 4.2 t

### 2.1 Présentation du cas de simulation

Dans un deuxième temps, le modèle est appliqué sur un cas industriel de 4.2t coulé par Industeel dans le cadre du projet Soft-Defis. En effet, des essais qui visent à abaisser la surchauffe du métal ou à augmenter le nombre de germes ou encore à agir sur les courants de convection ont été réalisés. Plusieurs techniques d'inoculation ainsi que des techniques de mise en mouvement du liquide ont été testées.

Pour pouvoir réaliser les caractérisations de ces lingots dans un délai court et pour éviter une solidification dissymétrique, les lingots de type Q550 ont été choisis. Ce sont des lingots de masse totale de 4.2 t avec une hauteur de liquide estimée à 1970 mm[52]. Au final 16 lingots ont été coulés ensemble avec 4 lingots par plaque de source incluant un lingot référence à chaque fois (figure 4.9 a). Nous avons choisi de modéliser la solidification de l'un des lingots référence.

L'alliage est considéré, dans le cadre approché du modèle proposé, comme binaire de composition Fe-0.1984%C (composition venant de mesure expérimentale). Les paramètres thermodynamiques utilisés pour le matériau sont présentés dans le tableau C.5 de l'annexe C. La section réelle du lingot est carrée. Il est coulé en source par le pied avec une surchauffe de 77°C pendant 9 minutes. Cette étape sera négligée dans nos simulations comme pour le cas précédent. La partie inférieure est en contact avec le moule. La partie supérieure est en contact avec un réfractaire (masselottage). Enfin, une poudre exothermique est utilisée sur la surface haute. L'échange thermique se fait à travers les parois externes du moule par convection naturelle et par rayonnement. Le temps de solidification total est estimé à 150 minutes.

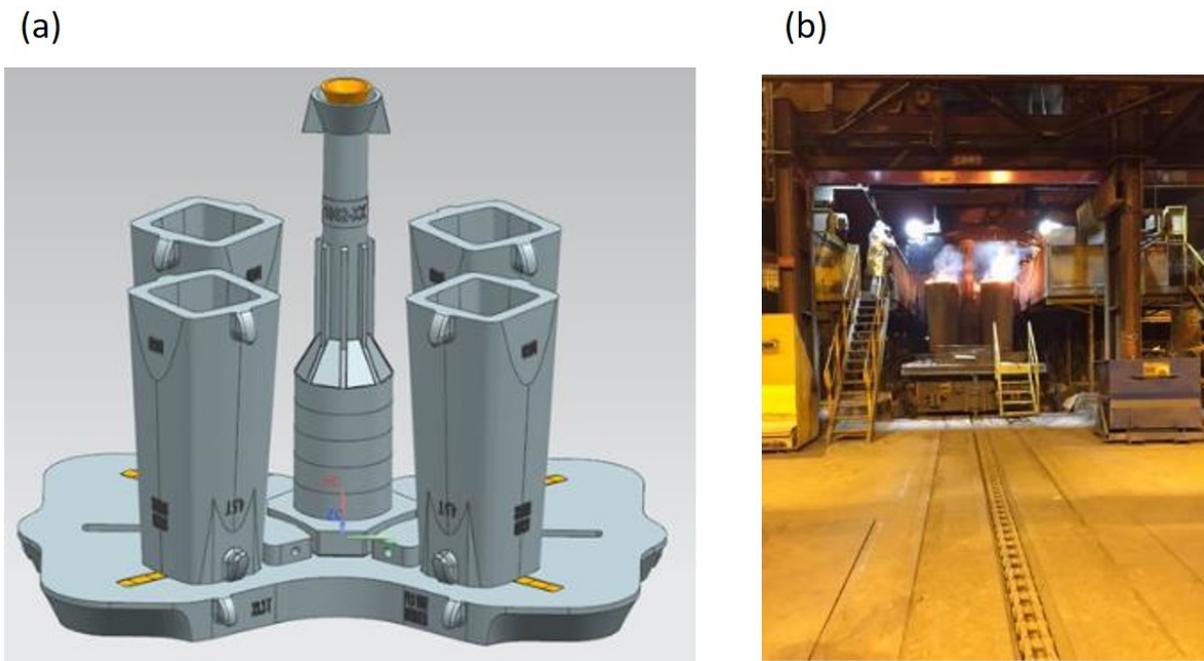


FIGURE 4.9: (a) Configuration de coulée choisie (b) photographie de la coulée [52].

À partir des résultats d'une série de mesures sur des coupes macrographiques réalisées sur le lingot (montrées sur la figure 4.10 à gauche), la carte de composition en carbone a été établie (figure 4.10 à droite). On peut voir une ségrégation fortement négative dans la partie basse du lingot. Ensuite, une ségrégation de faible intensité est visible dans le reste du lingot qui devient fortement positive dans la partie haute du lingot.

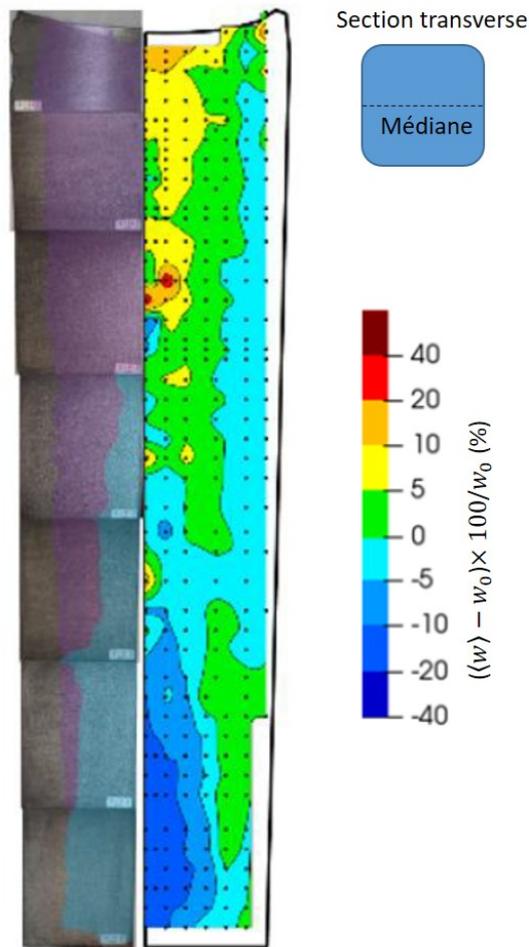


FIGURE 4.10: À gauche, une série de coupes macrographiques réalisées dans la partie médiane du lingot avec les nuances de couleurs indiquant un changement de type de structures. À droite, une carte expérimentale de macroségrégation relative en carbone.

Le section réelle du lingot est carrée avec une section élargie en haut. Toutefois pour simplifier et gagner en temps de calcul, une simulation 2D a été réalisée pour un domaine rectangulaire (0.26 m de rayon et 1.97 m de hauteur sans considérer le retrait de solidification par rapport à la hauteur du lingot). Les conditions thermiques sont imposées sur la surface du domaine, avec 2 coefficients de transfert thermique estimés pour retrouver le temps de solidification total. Ce temps est préalablement estimé par une simulation multidomaine sur Theracast qui prend en considération la présence des différentes parties du moule ([53],[52]). Une condition de Fourier est ainsi appliquée telle que décrite sur

la figure 4.11-a ci-dessous. L'étape de remplissage du lingot par le pied (9 minutes) avec une surchauffe de  $77^{\circ}\text{C}$  est négligée comme indiqué précédemment. On suppose que le lingot est déjà rempli et il est à la température du liquidus de  $1508.3^{\circ}\text{C}$ .

Le calcul est réalisé avec un maillage éléments finis fixe et isotrope avec une taille de maille moyenne de 10 mm (13452 éléments 6950 nœuds). Ce calcul a été effectué en parallèle sur un nœud de 28 cœurs et a duré 48 heures pour décrire environ 150 min de solidification.

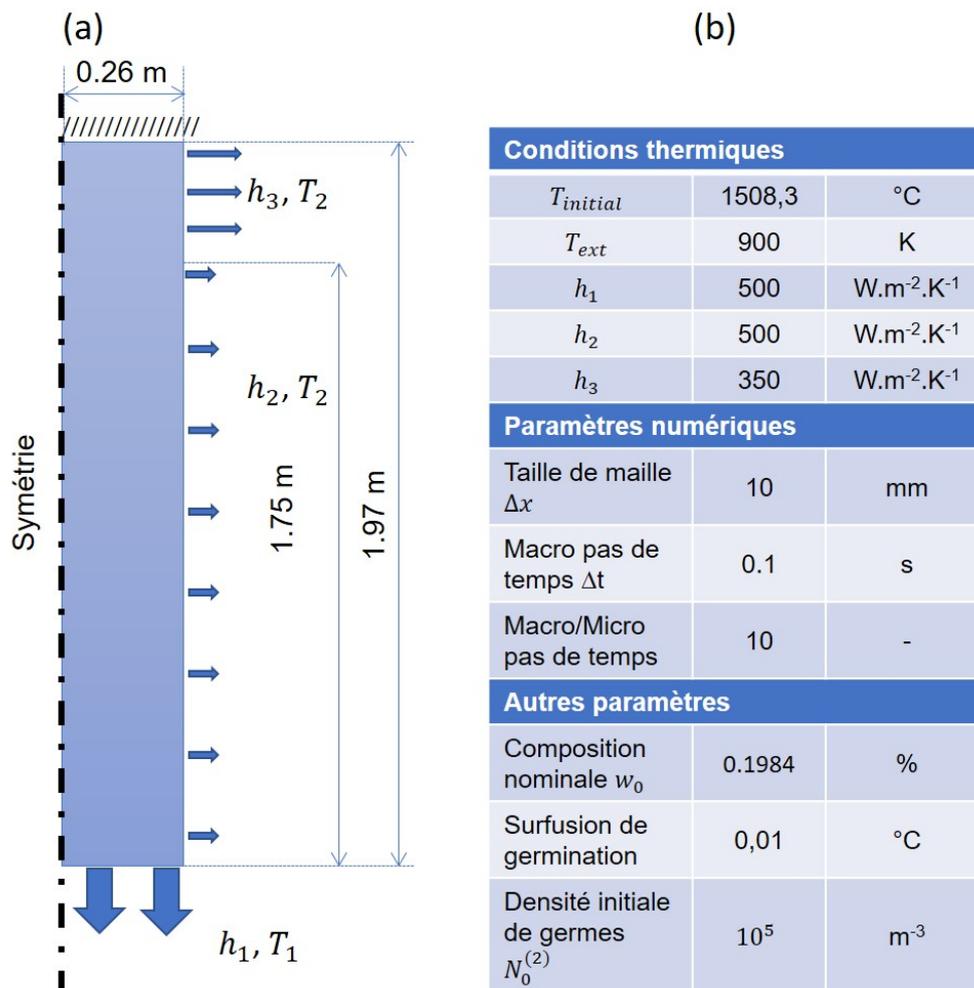


FIGURE 4.11: (a) Géométrie du domaine 2D simulé et conditions aux limites, (b) conditions thermiques, paramètres numériques et paramètres du modèle.

## 2.2 Résultats avec germination hétérogène

Dans les calculs de ce paragraphe, seule la germination hétérogène sera considérée comme source des grains équiaxes. Elle est gérée par une loi de germination dans le bain liquide avec une densité de germes de  $10^5$  germes.m<sup>-3</sup> et une surfusion de germination de 0.01 K. La fraction d'enveloppe de blocage des grains équiaxes par empilement est fixée à 0.27 (valeur reprise des travaux de Nguyen [26]).

Comme on peut le voir sur la figure 4.12 qui représente le résultat de la simulation à un temps intermédiaire (1200 s), le front commence à avancer avec une vitesse moins importante au niveau de la masselotte comme attendu en raison du refroidissement plus faible au niveau de cette zone. Les grains équiaxes apparaissent devant le front avec une densité de  $10^5$  grains.m<sup>-3</sup> et sédimentent en bas du lingot sous l'effet de la vitesse du solide pour atteindre rapidement une valeur de  $10^6$  grains.m<sup>-3</sup>. Par conséquent, comme on peut le voir à travers le champ de la composition moyenne, une ségrégation négative commence à apparaître en bas du lingot et le liquide enrichi en soluté remonte sous l'effet solutal en haut du lingot. La zone purement colonnaire reste à la composition nominale. Par contre, la zone où des grains équiaxes sont déjà apparus (zone mixte : colonnaire + équiaxe) est plutôt ségrégée négativement. On remarque aussi, en regardant le champ de densité des grains équiaxes, que malgré une densité importante en bas du lingot la fraction solide reste faible. Ceci peut s'expliquer par le fait que la densité est influencée par la sédimentation des grains qui peut être rapide et entraîner des densités importantes de grains alors que la fraction solide est plutôt conditionnée par la température.

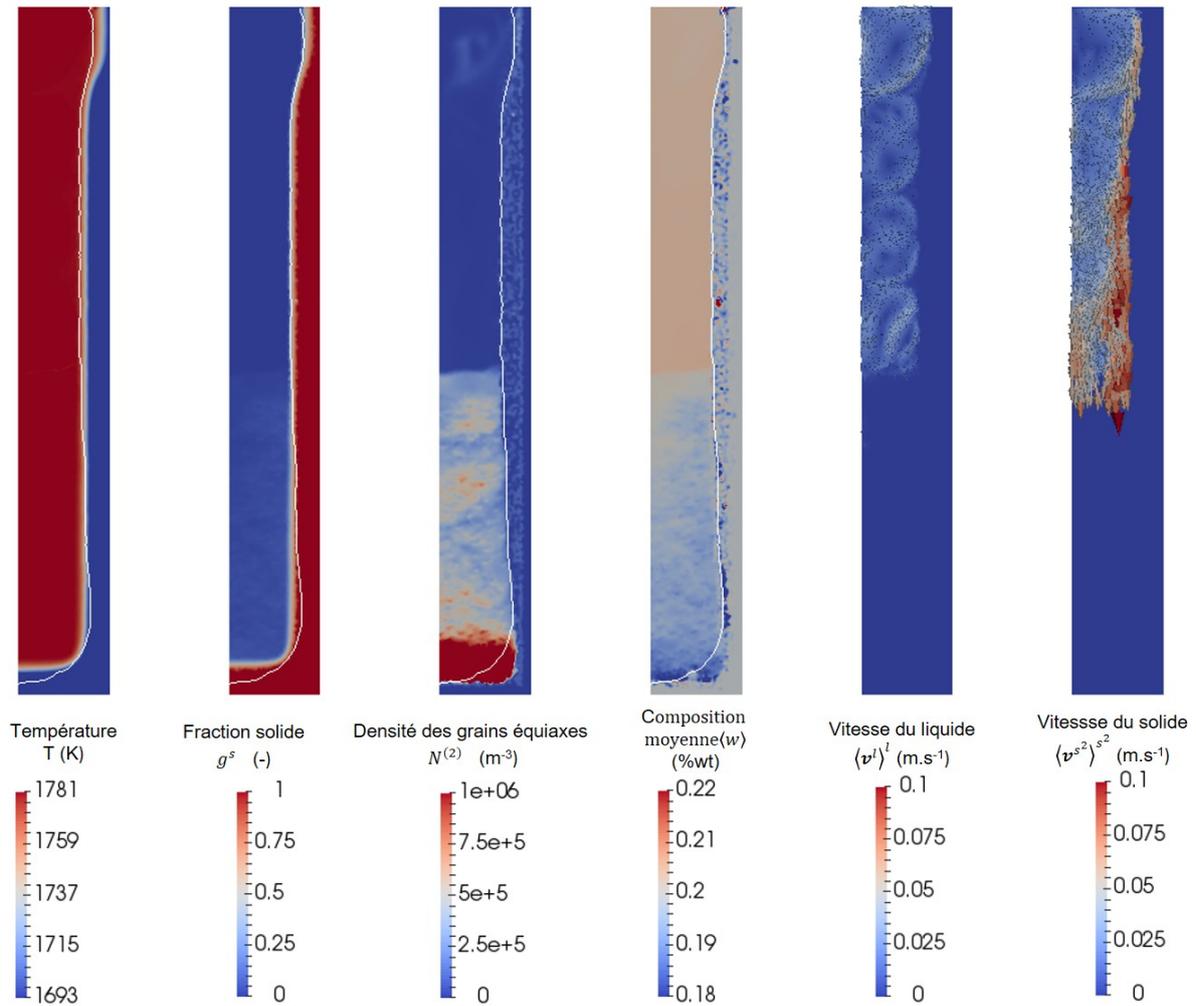


FIGURE 4.12: Distribution des variables à 1200 s, de gauche à droite : température, fraction de solide totale, densité des grains équiaxes, composition moyenne en carbone, vitesse intrinsèque du liquide et vitesse intrinsèque du solide. L'iso-ligne blanche indique la position du front colonnaire.

En fin de solidification, on constate un avancement du front colonnaire faible en haut du lingot (masselotte) ainsi que tout en bas du lingot. Une épaisseur moyenne de 8 cm est observée au niveau de la paroi latérale. Comme observé pour le cas industriel précédent, on peut voir clairement l'accumulation des grains équiaxes en bas du lingot à travers le champ de densité de ces grains sur la figure 4.13. Les grains de morphologie plus globulaire, comme on peut le voir à travers le champ de fraction solide interne au blocage, sont appauvris en soluté. Par la suite, une ségrégation négative en bas du lingot est observée.

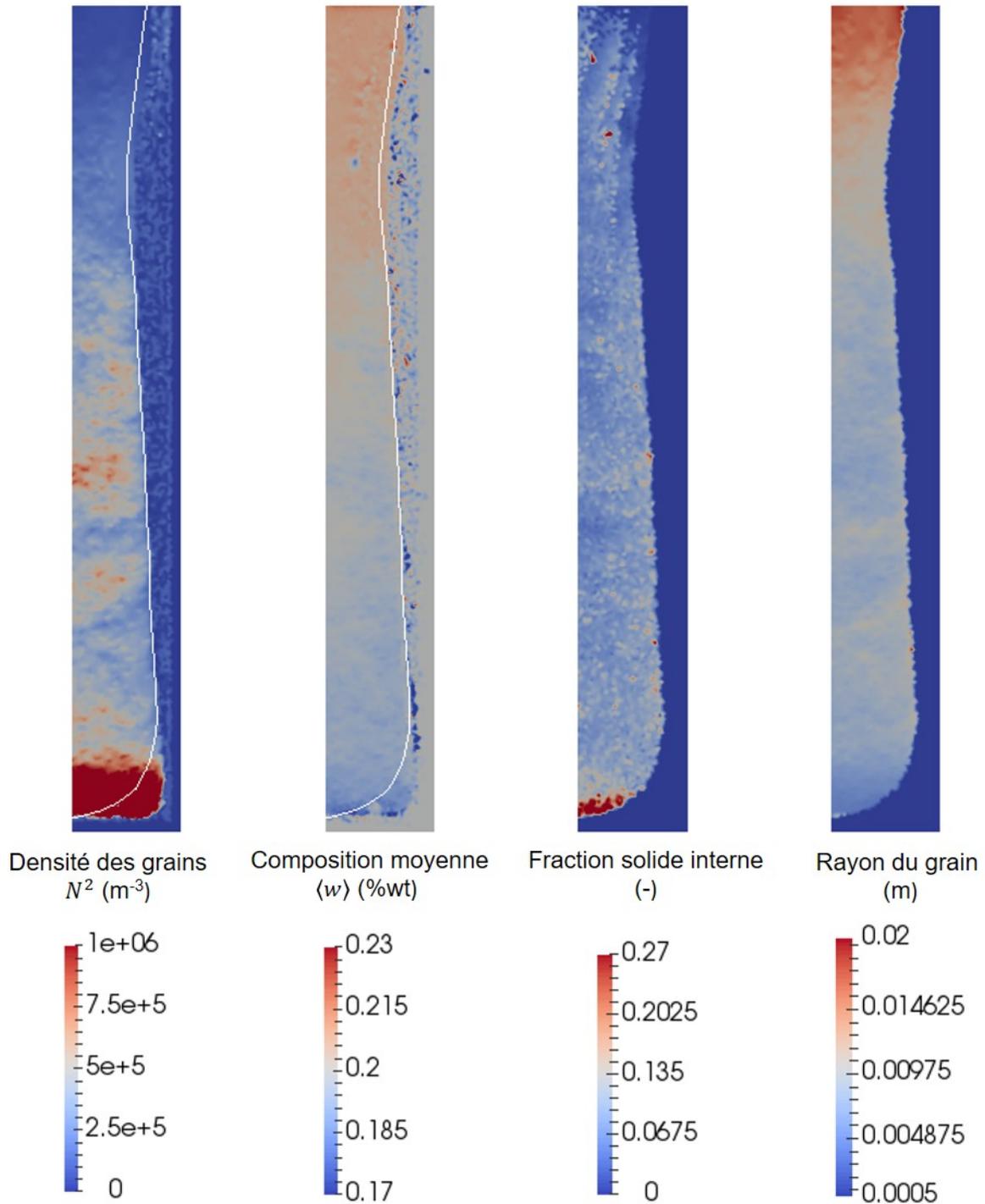


FIGURE 4.13: Cartes finales de densité de grains équiaxes, composition moyenne, fraction solide interne au blocage et rayon final des grains.

### 2.3 Résultats avec fragmentation

Dans un deuxième temps, pour étudier l'effet de la fragmentation comme source de grains équiaxes, notre modèle d'injection surfacique a été mis en

œuvre. Nous avons étudié l'influence de la variation des deux paramètres : flux de fragments et gradient thermique seuil pour l'activation de la fragmentation, sur la position finale du front colonnaire. L'influence du flux de fragments est présenté sur la figure 4.14. On fait varier le flux tout en gardant un gradient critique constant. On constate un arrêt rapide du front colonnaire en bas du lingot dans tous les cas sauf pour le cas avec un flux de  $10 \text{ fragments.m}^{-3}$ . L'épaisseur de la zone colonnaire au niveau de la paroi verticale est fine en bas et devient progressivement de plus en plus importante jusqu'à la masselotte. La zone la plus épaisse est de plus en plus réduite quand on augmente le flux de fragments. Ceci s'explique par une densité finale de grains équiaxes plus importante après sédimentation des fragments comme on peut le voir sur la figure 4.14.

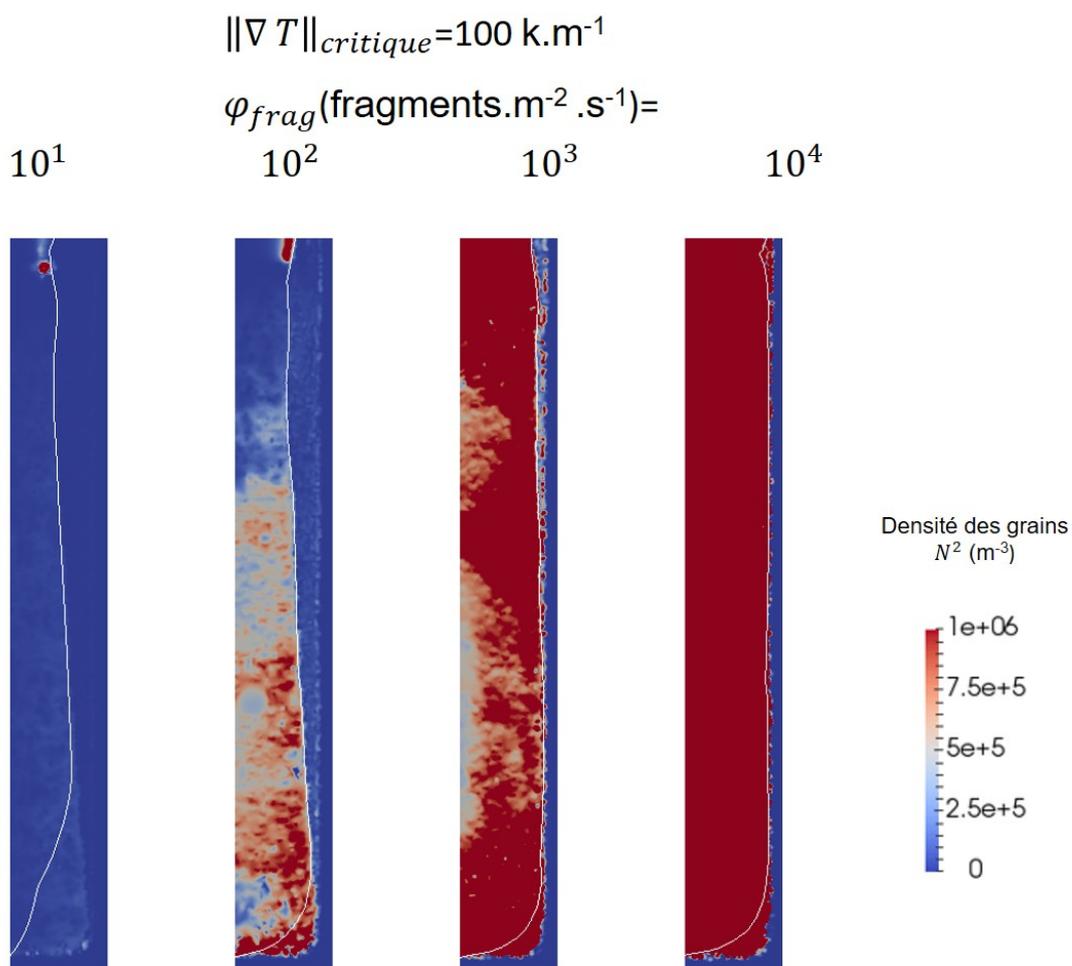


FIGURE 4.14: Carte finale de densités des grains équiaxes avec la position de la TCE (ligne blanche) pour différents flux de fragments et à gradient critique constant.

La figure 4.15 montre l'influence du gradient thermique critique sur la position de la TCE et la densité finale des grains équiaxes. Le flux est constant et on fait varier le gradient thermique. Comme on peut le voir, la position de la TCE est de plus en plus avancée quand on diminue le gradient critique de 50 à 10  $\text{K.m}^{-1}$ . Toutefois, on constate que l'effet du choix de gradient devient presque sans influence à partir d'une certaine valeur (50  $\text{K.m}^{-1}$ ). La densité finale des grains équiaxes est de plus en plus importante quand le gradient critique choisi est plus important. Ceci est tout à fait attendu car l'activation de la fragmentation est de plus en plus précoce. Par la suite, du fait de la sédimentation des grains, on obtient une densité plus importante de grains équiaxes qui bloquent le front plus rapidement.

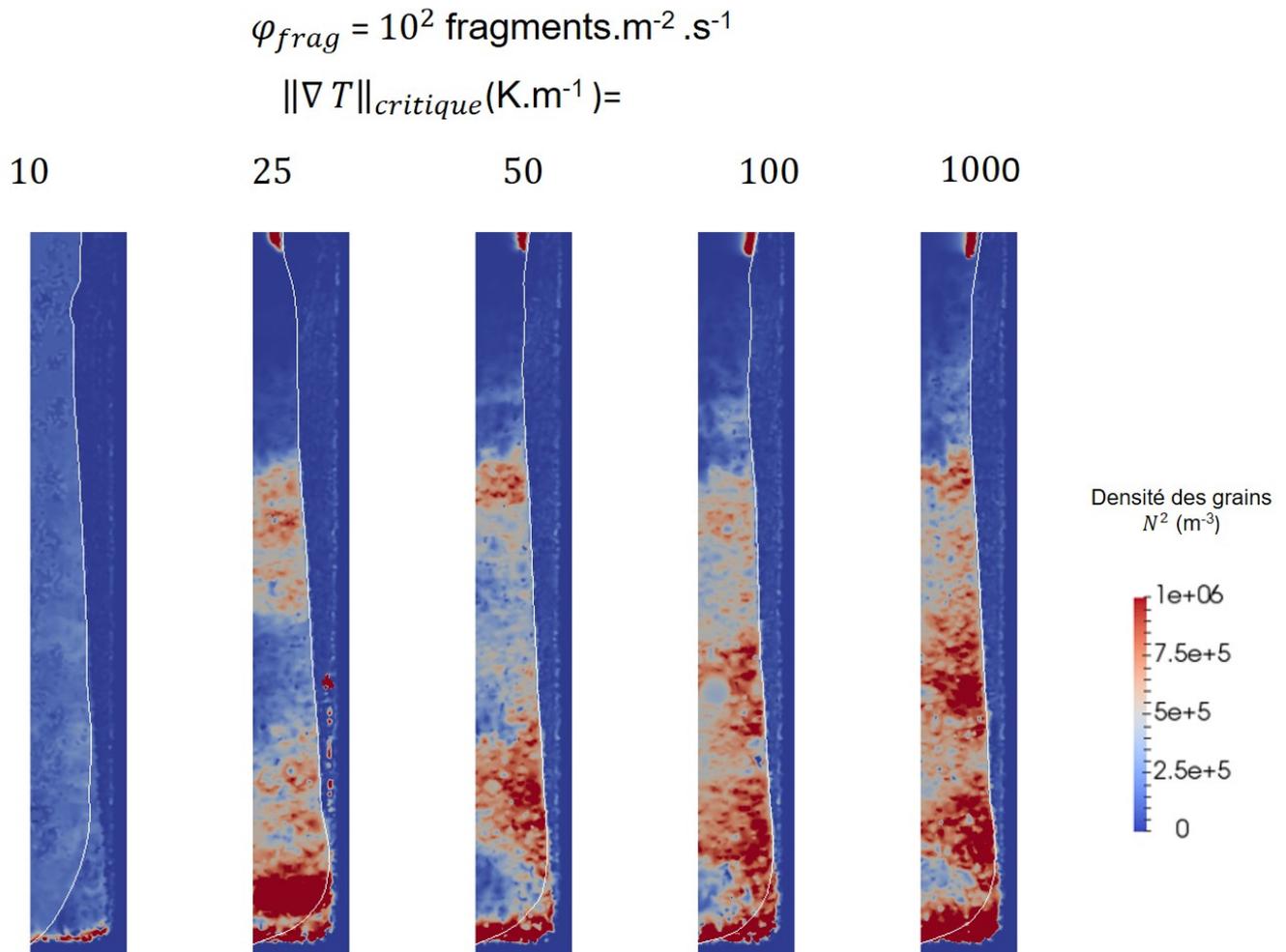


FIGURE 4.15: Carte finale de densités des grains équiaxes avec la position de la TCE (la ligne blanche) pour différents gradients critiques et à flux constant.

On prend le calcul avec un gradient critique  $\|\nabla T\| = 50 \text{ K.m}^{-1}$  et un flux  $\phi = 100 \text{ fragments.m}^{-3}$ . Sur la figure 4.16, nous présentons en (a) les résultats expérimentaux pour la carte de ségrégation et les structures et en (b) la carte de ségrégation ainsi que la densité de grains équiaxes et la limite de la zone colonnaire (ligne blanche) obtenues par simulation. Nous remarquons que la tendance générale des résultats est retrouvée. Toutefois, l'intensité de la ségrégation négative en bas du lingot ainsi que son étendue sont différents.

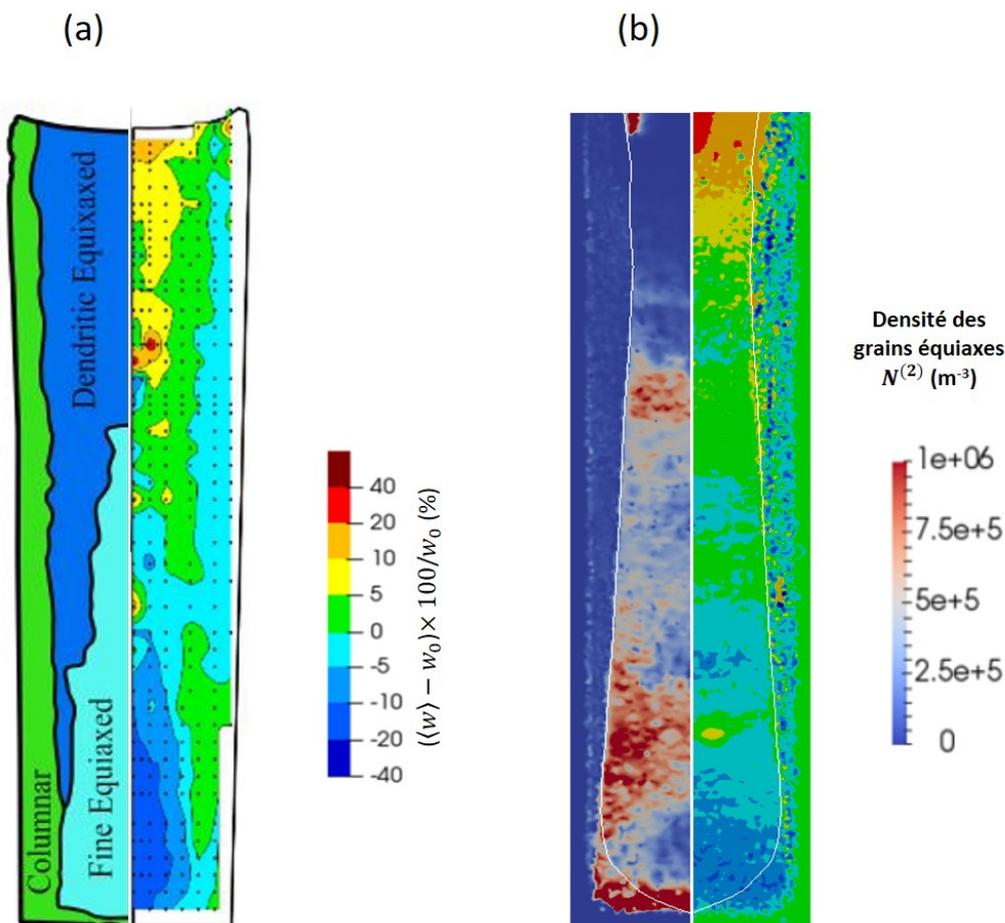


FIGURE 4.16: (a) Cartes de ségrégation relative (droite) et de structure de grains (gauche) expérimentales (b) Cartes de ségrégation (droite) et densité des grains équiaxes (gauche) obtenues par simulation avec la ligne blanche indiquant la position de la TCE.

Des mesures du taux de ségrégation au niveau de l'axe du lingot ont été réalisées. On fait des mesures similaires au même niveau dans la simulation. Les résultats sont reportés sur la figure 4.17 suivante. On constate que la ségrégation négative est prédite en bas du lingot mais elle reste moins négative que celle

mesurée. Une bonne prédiction de la ségrégation positive en haut du lingot est constatée avec le modèle proposé, cependant.

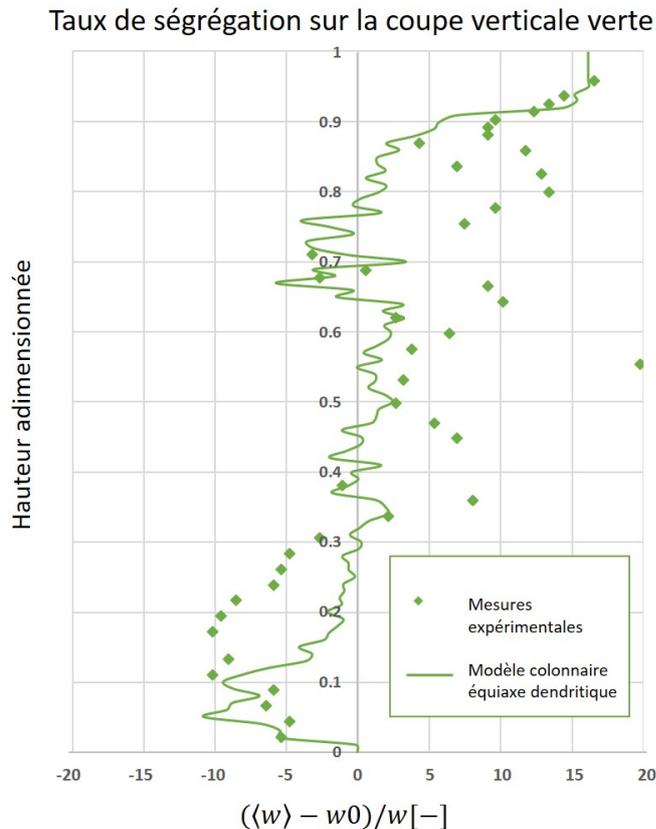


FIGURE 4.17: Courbes de ségrégation réalisées au niveau de l'axe central du lingot (expérimentale et obtenue par simulation)

Des simulations 3D pour ce cas 4t2 ont été tentées. Il n'a pas été possible jusqu'à présent de les conduire jusqu'à la solidification complète du lingot. Plusieurs difficultés ont été rencontrées. Tout d'abord, à cette échelle de lingot ( $0.26 \text{ m} \times 1.97 \text{ m}$ ) et avec un maillage grossier (2 cm), il est impossible de convecter la fonction Level Set sur une distance importante sans qu'elle diverge. Des essais sur un cas réduit ( $0.26 \text{ m} \times 0.26 \text{ m}$ ) avec un maillage fin (2 mm) ont été réalisés. Ceci a permis d'avoir une meilleure convection de la fonction Level Set. Toutefois, faire une simulation en maillant finement d'une manière homogène tout le volume du lingot est extrêmement chronophage (des mois de calcul). Par la suite, la solution est de mailler finement seulement autour de la position zero de la fonction Level Set, avec un remaillage régulier. Comme la fonction Level Set est transportée, une technique de remaillage doit être adoptée pour

la suivre. Toutefois, en utilisant cette dernière technique, plusieurs problèmes d'ordre numérique ont été rencontrés. Principalement, un problème de diffusion de champs de la zone colonnaire vers la zone équiaxe est rencontré. Cette diffusion est à investiguer et corriger. Une diffusion numérique artificielle de soluté devant le front le colonnaire peut, en effet, enrichir le liquide dans le domaine et entraîner l'arrêt de ce front rapidement. Ce problème est à investiguer et résoudre pour pouvoir entamer une simulation 3D pour ce type de lingots. Malheureusement, en raison de contraintes de temps, nous n'avons pas pu terminer cette étude qui reste à prévoir dans les perspectives de ce travail.



# Conclusion et perspectives

## 1 Conclusion

La compétition de croissance des structures colonnaire et équiaxe et l'étude de la transition colonnaire-équiaxe ont été peu modélisés à échelle industrielle. De plus, jusqu'à présent, seules des approches utilisant la méthode des volumes finis avaient été implémentées et généralement en 2D. Toutefois, des géométries complexes, tridimensionnelles, sont à traiter pour rendre compte de la complexité des procédés industriels et ceci nécessite l'utilisation de maillages irréguliers pour les modéliser. La méthode des éléments finis fournit un outil utile pour traiter ces géométries. D'où l'importance de créer un outil, basé sur cette approche, capable de modéliser ces phénomènes.

Le travail que nous avons mené s'est appuyé sur un précédent travail réalisé au CEMEF où seule la structure équiaxe avait été modélisée incluant le transport des grains [26]. Ce travail est aussi inspiré de celui réalisé en utilisant une approche volumes finis en 2D développé par Leriche [9] et antérieurement par Combeau et Založnik [31].

L'implémentation du modèle actuel a été faite en plusieurs étapes.

- Tout d'abord, une méthode de suivi de front basée sur la méthode Level Set pour déterminer la position du front colonnaire a été développée. Il s'agit d'une fonction distance dont la position zero indique la position du front colonnaire. Elle divise le domaine de simulation en deux zones : une zone où la Level Set est positive et où la structure colonnaire peut se développer et une zone où elle est négative et qui correspond à une zone liquide (où les grains équiaxes peuvent ultérieurement se développer). Cette fonction distance est convectée via une vitesse de pointes de dendrites calculée selon le

modèle KGT [42]. Ces développements ont été validé via une simulation 1D où seul le front colonnaire est suivi et les résultats ont été comparés aux résultats d'un modèle de référence. Une bonne coïncidence entre les résultats des deux modèles a été obtenue.

- En deuxième lieu et sur la base du travail réalisé par Nguyen [26] pour décrire la croissance des grains équiaxes, un modèle de de microségrégation à 3+3 phases (3 phases = solide + liquide intragranulaire + liquide extragranulaire pour chaque structure) simulant la germination et la croissance des deux structures colonnaire et équiaxe a été développé. On a fait l'hypothèse qu'un bras colonnaire est constitué de plusieurs sous-structures semblables à celles équiaxes. Ainsi, on utilise les mêmes grandeurs caractéristiques pour les deux structures. Les zones mixtes où les deux structures peuvent être présentes à la fois ne sont pas traitées. Toutefois, on prend en considération les grains équiaxes qui ont été formés avant le passage du front colonnaire sans l'arrêter pour modifier les conditions de développement des grains colonnaires. On fait l'hypothèse que ces grains équiaxes sont intégrés à la zone colonnaire. Deux mécanismes de formation de grains équiaxes sont considérés. Le premier est la germination hétérogène qui a été utilisé dans le cadre du travail de Nguyen [26]. A ceci, nous avons ajouté, dans le cadre de ce travail la modélisation de la fragmentation comme source supplémentaire de grains équiaxes.

Pour l'arrêt du front colonnaire, un critère solutal est utilisé. Ceci correspond à calculer la vitesse du front colonnaire en utilisant les conditions thermiques et solutales qui sont devant le front via un modèle de cinétique de pointes de dendrites. Par la suite, l'enrichissement du liquide par le soluté dû à la présence de grains équiaxes devant le front est pris en charge. Cet enrichissement entraîne la diminution progressive de la vitesse du front jusqu'à annulation. Par la suite, le front est bloqué.

- Enfin, plusieurs adaptations liées au calcul de vitesse de transport des grains et de convection de la vitesse ont été introduites afin de prendre en compte la présence du front colonnaire. En effet, un coefficient est in-

troduit prenant en considération la valeur de la Level Set et assurant un changement de régime entre la zone colonnaire ou empilée (packed bed zone) et la zone équiaxe où les grains peuvent bouger librement aussi bien pour le calcul de la vitesse de la phase liquide que solide. De plus, une adaptation du calcul du coefficient de diffusion artificielle introduit dans le cadre des travaux de Nguyen [26] pour éviter les problèmes de résolution des équations de transport purement convectives a été faite afin de ne pas avoir un transport artificiel de grains de la zone colonnaire vers la zone équiaxe (un problème qui n'existait pas quand un seul type de structure est présent).

## 2 Perspectives

### Modélisation

- Dans le modèle actuel, on fait l'hypothèse d'un alliage binaire à la différence des alliages industriels. Considérer les différents éléments d'un alliage multi composés nécessitent de résoudre plus d'équations à intégrer dans le modèle, mais donnerait des comparaisons plus intéressantes et pertinentes par rapport aux observations.
- Les conditions thermiques sont approchées en imposant des coefficients d'extraction de chaleurs constants estimés à partir de calculs faits sur Thercast. Ceci est dû au fait que la modélisation multidomaine n'a pas été mise en œuvre dans CIMLIB. Pour plus de précision, il convient de modéliser le moule et sa thermique. Une approche est possible en utilisant la méthode développée par Aalilija [54] qui se base sur le mélange des propriétés avec une fonction Heaviside. Un début de travail dans ce sens a été réalisé qui est à poursuivre. Toutefois, comme le travail actuel a pour vocation à être intégré dans le logiciel THERCAST, qui peut réaliser des simulations multidomaines, ce problème pourrait être résolu pour les applications industrielles, dans le cadre de la future stabilisation des développements dans cet outil de simulation.
- Dans le modèle actuel, on fait l'hypothèse que les grains équiaxes qui ont été formés avant le passage du front colonnaire sans l'arrêter sont intégrés à la structure colonnaire. L'historique de ces grains est conservé et leur existence est prise en compte pour les conditions de l'apparition des sous-structures colonnaires. Toutefois, on suit seulement la croissance de ces dernières. Il serait plus précis de développer un modèle qui décrit la croissance simultanée des deux structures dans les zones mixtes. Il serait aussi intéressant de développer un modèle multiphase en intégrant les transformations péritectiques et les transformations solide/solide.

### Procédé

- D'autres phénomènes sont aussi à considérer comme l'étape de remplissage ou encore le phénomène de retrait. Les travaux de thèse de Zhang [55] peuvent être pris en compte pour améliorer le modèle actuel. De plus, on remarque que l'étape de remplissage est négligée dans notre modèle. La prendre en considération influence le résultat final de manière certaine.
- La géométrie des lingots a été simplifiée. Tenir compte de la vraie géométrie des lingots demande un maillage plus fin dans certaines zones pour éviter les problèmes numériques. Un début de travail a été fait mais plusieurs problèmes numériques ont été rencontrés. Un travail d'optimisation de maillage est à faire pour les éviter.

### Numérique

- La résolution actuelle demande un temps de calcul important notamment pour les calculs de cas à échelle industrielle. Le temps de calcul pourrait être optimisé en utilisant des techniques de remaillage anisotrope ou encore d'adaptation de pas de temps de calcul.
- Les calculs des cas industriels en 3D sont à optimiser pour bien convecter la fonction Level Set et déterminer correctement la position du front sans avoir à mailler très finement le domaine (très chronophage). Une solution est de mailler finement seulement autour de la position zéro de la fonction Level Set, avec un remaillage régulier. Des techniques de remaillage ont été proposés mais plusieurs problèmes numériques ont été rencontrés. Ces problèmes sont à investiguer plus et résoudre.



# **ANNEXES**

# Annexe A

## De l'équation locale à la forme moyennée

**A/** L'équation de conservation de la masse totale s'écrit à l'échelle locale :

$$\frac{\partial \rho^\alpha}{\partial t} + \text{div}(\rho^\alpha \mathbf{v}^\alpha) = \phi^\alpha \quad (0.1)$$

avec  $\rho^\alpha$  la masse volumique de la phase  $\alpha$ ,  $\mathbf{v}^\alpha$  la vitesse de la phase  $\alpha$  et  $\phi^\alpha$  un terme de création de masse.

**B/** L'équation de conservation de la masse du soluté s'écrit à l'échelle locale :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho^\alpha w^\alpha) + \text{div}(\rho^\alpha w^\alpha \mathbf{v}^\alpha) + \text{div}(\mathbf{j}^\alpha) = 0 \quad (0.2)$$

avec  $w^\alpha$  la composition en soluté de la phase  $\alpha$  et  $\mathbf{j}^\alpha$  un flux diffusif de soluté.

**C/** Pour une interface  $\alpha/\beta$  la conservation de la masse totale à l'échelle locale est :

$$\rho^\alpha (\mathbf{v}^{\alpha/\beta} - \mathbf{v}^{\alpha(\alpha/\beta)}) \cdot \mathbf{n}^{\alpha/\beta} + \rho^\beta (\mathbf{v}^{\alpha/\beta} - \mathbf{v}^{\beta(\alpha/\beta)}) \cdot \mathbf{n}^{\beta/\alpha} = 0 \quad (0.3)$$

**D/** La conservation de la masse de soluté à l'interface  $\alpha/\beta$  est :

$$\rho^\alpha w^\alpha (\mathbf{v}^{\alpha/\beta} - \mathbf{v}^{\alpha(\alpha/\beta)}) \cdot \mathbf{n}^{\alpha/\beta} + \rho^\beta w^\beta (\mathbf{v}^{\alpha/\beta} - \mathbf{v}^{\beta(\alpha/\beta)}) \cdot \mathbf{n}^{\beta/\alpha} - \mathbf{j}^\alpha \cdot \mathbf{n}^{\alpha/\beta} - \mathbf{j}^\beta \cdot \mathbf{n}^{\beta/\alpha} = 0 \quad (0.4)$$

avec  $\mathbf{v}^{\alpha(\alpha/\beta)}$  la vitesse de la matière dans la phase  $\alpha$  à l'interface  $\alpha/\beta$ ,  $\mathbf{v}^{\alpha/\beta}$  la vitesse de l'interface  $\alpha/\beta$ ,  $\mathbf{n}^{\alpha/\beta}$  la normale dirigée de la phase  $\alpha$  vers  $\beta$  et  $\mathbf{n}^{\beta/\alpha}$  le vecteur opposé,  $\mathbf{j}^\alpha$  le flux d'espèce dans la phase  $\alpha$  et  $\mathbf{j}^\beta$  dans la phase  $\beta$ .

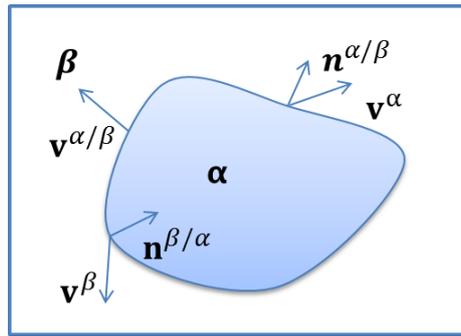


FIGURE A.1: Notations utilisées pour les champs de vecteur.

## 1 Définitions et relations associées

Pour une quantité microscopique volumique associée à la phase  $\alpha$  et notée  $X^\alpha$ , la moyenne volumique est définie par l'équation suivante :

$$\langle X^\alpha \rangle = \frac{1}{V_e} \int_{V_e} \xi^\alpha X^\alpha dV \quad (1.1)$$

où  $V_e$  est le volume du VER et la fonction de phase est définie par :

$$\xi^\alpha(x, t) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in \alpha \text{ au temps } t \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (1.2)$$

En prenant  $g^\alpha$  comme la fraction volumique de la phase  $\alpha$  dans le VER, la moyenne volumique intrinsèque, i.e. la moyenne sur le volume de la phase  $\alpha$ ,  $V_e^\alpha$ , est définie par l'équation ci dessous :

$$\langle X^\alpha \rangle^\alpha = \frac{1}{V_e^\alpha} \int_{V_e} \xi^\alpha X^\alpha dV = \frac{\langle X^\alpha \rangle}{g^\alpha} \quad (1.3)$$

La fluctuation locale correspondante se définit de la manière suivante :

$$\hat{X}^\alpha = (X^\alpha - \langle X^\alpha \rangle^\alpha) \xi^\alpha \quad (1.4)$$

La moyenne des dérivations temporelles et spatiales peut être déduite comme

suit [56] [57] :

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial t}(X^\alpha) \right\rangle = \frac{\partial}{\partial t} \langle X^\alpha \rangle - \sum_{\alpha/\beta} \left( \frac{1}{V_e} \int_{A^{\alpha/\beta}} X^\alpha \mathbf{v}^{\alpha/\beta} \cdot \mathbf{n}^{\alpha/\beta} dA \right) \quad (1.5)$$

$$\langle \mathbf{grad}(X^\alpha) \rangle = \mathbf{grad}(\langle X^\alpha \rangle) + \sum_{\alpha/\beta} \left( \frac{1}{V_e} \int_{A^{\alpha/\beta}} X^\alpha \mathbf{n}^{\alpha/\beta} dA \right) \quad (1.6)$$

$$\langle \mathbf{div}(\mathbf{X}^\alpha) \rangle = \mathbf{div}(\langle \mathbf{X}^\alpha \rangle) + \sum_{\alpha/\beta} \left( \frac{1}{V_e} \int_{A^{\alpha/\beta}} \mathbf{X}^\alpha \cdot \mathbf{n}^{\alpha/\beta} dA \right) \quad (1.7)$$

où  $\sum_{\alpha/\beta}$  est une sommation sur l'ensemble des interfaces entre la phase  $\alpha$  et les phases  $\beta$  avec lesquelles elle est en contact. On néglige les fluctuations locales.

Par la suite :

$$\langle X^\alpha Y^\alpha \rangle^\alpha = \langle X^\alpha \rangle^\alpha \langle Y^\alpha \rangle^\alpha \quad (1.8)$$

d'où

$$\langle \rho^\alpha X^\alpha \rangle = g^\alpha \langle \rho^\alpha \rangle^\alpha \langle X^\alpha \rangle^\alpha \quad (1.9)$$

## 2 Forme moyennée des équations de conservation

A/ Pour la conservation de la masse totale , on obtient

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial t}(\rho^\alpha) \right\rangle + \langle \mathbf{div}(\rho^\alpha \mathbf{v}^\alpha) \rangle = \langle \phi^\alpha \rangle \quad (2.1)$$

avec

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial t}(\rho^\alpha) \right\rangle = \frac{\partial}{\partial t} \langle \rho^\alpha \rangle - \sum_{\alpha/\beta} \left( \frac{1}{V_e} \int_{A^{\alpha/\beta}} \rho^\alpha \mathbf{v}^{\alpha/\beta} \cdot \mathbf{n}^{\alpha/\beta} dA \right) \quad (2.2)$$

$$\langle \mathbf{div}(\rho^\alpha \mathbf{v}^\alpha) \rangle = \mathbf{div}(\langle \rho^\alpha \mathbf{v}^\alpha \rangle) + \sum_{\alpha/\beta} \left( \frac{1}{V_e} \int_{A^{\alpha/\beta}} \rho^\alpha \mathbf{v}^\alpha \cdot \mathbf{n}^{\alpha/\beta} dA \right) \quad (2.3)$$

Avec  $v_n^{\alpha(\alpha/\beta)} = \mathbf{v}^\alpha \cdot \mathbf{n}^{\alpha/\beta}$  et  $\Phi^\alpha = \langle \phi^\alpha \rangle$ , l'équation de conservation de la masse moyennée à l'échelle du VER est alors obtenue :

$$\frac{\partial}{\partial t}(g^\alpha \langle \rho^\alpha \rangle^\alpha) + \text{div}(g^\alpha \langle \rho^\alpha \rangle^\alpha \langle \mathbf{v}^\alpha \rangle^\alpha) = \sum_{\alpha/\beta} \left( \frac{1}{V_e} \int_{A^{\alpha/\beta}} \rho^\alpha (v_n^{\alpha/\beta} - v_n^{\alpha(\alpha/\beta)}) dA \right) + \Phi^\alpha \quad (2.4)$$

**B/** De même on applique les égalités (1.5) et (1.7) pour obtenir la forme moyennée de l'équation de conservation de la masse du soluté et on obtient :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(g^\alpha \langle \rho^\alpha \rangle^\alpha \langle w^\alpha \rangle^\alpha) + \text{div}(g^\alpha \langle \rho^\alpha \rangle^\alpha \langle w^\alpha \rangle^\alpha \langle \mathbf{v}^\alpha \rangle^\alpha) + \text{div}(\langle \mathbf{j}^\alpha \rangle) \\ &= \sum_{\alpha/\beta} \left( \frac{1}{V_e} \int_{A^{\alpha/\beta}} \rho^\alpha w^\alpha (v_n^{\alpha/\beta} - v_n^{\alpha(\alpha/\beta)}) dA - \frac{1}{V_e} \int_{A^{\alpha/\beta}} j_n^{\alpha(\alpha/\beta)} dA \right) \end{aligned} \quad (2.5)$$

**C/** Pour une interface  $\alpha/\beta$ , le bilan de masse totale sur cette interface s'écrit :

$$\frac{1}{V_e} \int_{A^{\alpha/\beta}} \rho^\alpha (v_n^{\alpha/\beta} - v_n^{\alpha(\alpha/\beta)}) dA - \frac{1}{V_e} \int_{A^{\alpha/\beta}} \rho^\beta (v_n^{\alpha/\beta} - v_n^{\beta(\alpha/\beta)}) dA = 0 \quad (2.6)$$

**D/** le bilan de masse de soluté sur l'interface  $\alpha/\beta$  a pour expression :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{V_e} \int_{A^{\alpha/\beta}} \rho^\alpha w^\alpha (v_n^{\alpha/\beta} - v_n^{\alpha(\alpha/\beta)}) dA - \frac{1}{V_e} \int_{A^{\alpha/\beta}} j_n^{\alpha(\alpha/\beta)} dA \\ & - \frac{1}{V_e} \int_{A^{\alpha/\beta}} \rho^\beta w^\beta (v_n^{\alpha/\beta} - v_n^{\beta(\alpha/\beta)}) dA + \frac{1}{V_e} \int_{A^{\alpha/\beta}} j_n^{\beta(\alpha/\beta)} dA = 0 \end{aligned} \quad (2.7)$$

### 3 Hypothèses et définitions

On définit par la suite un ensemble de paramètres et on fait certaines hypothèses détaillées ci-après :

1/ On utilise la loi de Fick pour exprimer le flux de diffusion :

$$\mathbf{j}^\alpha = -D^\alpha \mathbf{grad}(\rho^\alpha w^\alpha) \quad (3.1)$$

2/ On considère un coefficient de diffusion  $D^\alpha$  homogène par phase.

3/ On utilise une approximation pour exprimer le flux de diffusion :

$$\begin{aligned} J_n^{\alpha(\alpha/\beta)} &= \frac{1}{V_e} \int_{A^{\alpha/\beta}} j_n^{\alpha(\alpha/\beta)} dA \\ &= -D^\alpha S_v^{\alpha/\beta} \frac{\overline{\rho^{\alpha(\alpha/\beta)} w^{\alpha(\alpha/\beta)}} - \langle \rho^\alpha \rangle^\alpha \langle w^\alpha \rangle^\alpha}{\delta^{\alpha(\alpha/\beta)}} \end{aligned} \quad (3.2)$$

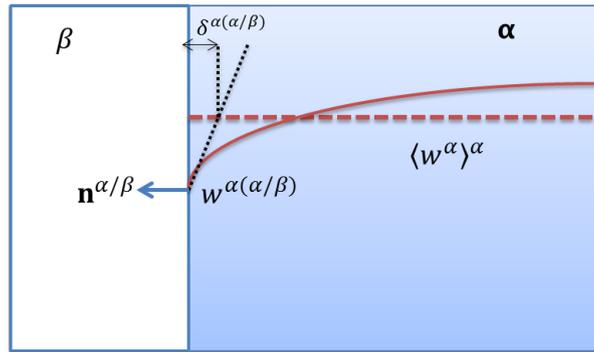


FIGURE A.2: Représentation de la longueur de diffusion pour un profil de composition donné.

4/ Les flux macroscopiques sont négligés par rapport à leurs équivalents microscopiques, ainsi le terme  $div(\langle \mathbf{j}^\alpha \rangle)$  dans l'équation (2.5) est négligé.

\* On définit une valeur moyenne d'une grandeur à l'interface comme ci-dessous :

$$\overline{X^{\alpha/\beta}} = \frac{1}{A^{\alpha/\beta}} \int_{A^{\alpha/\beta}} X dA \quad (3.3)$$

On fait l'hypothèse que

$$\overline{XY} = \overline{X} \overline{Y} \quad (3.4)$$

Des simplifications de notations sont proposés. On remplace  $\overline{v_n^{\alpha(\alpha/\beta)}}$  par  $v_n^{\alpha(\alpha/\beta)}$ ,  $\overline{v_n^{\alpha/\beta}}$  par  $v_n^{\alpha/\beta}$  et  $\overline{w^{\alpha(\alpha/\beta)}}$  par  $w^{\alpha(\alpha/\beta)}$ .

\* On définit la densité de l'interface par

$$S_v^{\alpha/\beta} = A^{\alpha/\beta} / V_e \quad (3.5)$$

5/ On fait l'hypothèse d'une masse volumique uniforme par phase

$$\langle \rho^\alpha \rangle^\alpha = \rho^\alpha \quad (3.6)$$

6/Un certain nombre de grandeurs sont définies :

- $\Gamma^{\alpha/\beta}$  est le taux de production de la phase  $\alpha$  par croissance dans la phase  $\beta$ .

$$\Gamma^{\alpha/\beta} = S_v^{\alpha/\beta} (\overline{\rho^{\alpha(\alpha/\beta)} v_n^{\alpha/\beta}} - \overline{\rho^{\alpha(\alpha/\beta)} v_n^{\alpha(\alpha/\beta)}}) \quad (3.7)$$

avec  $v_n^{\alpha/\beta}$  est la vitesse de l'interface  $\alpha/\beta$  projeté suivant la normale à cette interface dirigée de  $\alpha$  vers  $\beta$ .

- $\Phi^\alpha$  le taux de production volumique de la phase  $\alpha$  par germination

## 4 Bilan général final

A/ En considérant ces hypothèses, on obtient pour le bilan de masse en reprenant l'équation (2.4) et utilisant les définitions (3.3) et (3.5).

$$\frac{\partial}{\partial t} (g^\alpha \rho^\alpha) + \text{div} (g^\alpha \rho^\alpha \langle \mathbf{v}^\alpha \rangle^\alpha) = \sum_{\alpha/\beta} \left( S_v^{\alpha/\beta} (\overline{\rho^{\alpha(\alpha/\beta)} v_n^{\alpha/\beta}} - \overline{\rho^{\alpha(\alpha/\beta)} v_n^{\alpha(\alpha/\beta)}}) \right) + \Phi^\alpha \quad (4.1)$$

En utilisant les définitions précédentes, l'équation s'écrit alors :

$$\frac{\partial}{\partial t} (g^\alpha \rho^\alpha) + \text{div} (g^\alpha \rho^\alpha \langle \mathbf{v}^\alpha \rangle^\alpha) = \sum_{\alpha/\beta} \Gamma^{\alpha/\beta} + \Phi^\alpha \quad (4.2)$$

avec  $\Gamma^{\alpha/\beta}$  est le taux de production de la phase  $\alpha$  par croissance dans la phase  $\beta$  et  $\Phi^\alpha$  le taux de production de la phase  $\alpha$  par germination.

B/ Pour le bilan de soluté, en reprenant l'équation (2.5) et en utilisant en plus (3.2), on obtient :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} g^\alpha \rho^\alpha \langle w^\alpha \rangle^\alpha + \text{div} (g^\alpha \rho^\alpha \langle w^\alpha \rangle^\alpha \langle \mathbf{v}^\alpha \rangle^\alpha) \\ &= \sum_{\alpha/\beta} \left( S_v^{\alpha/\beta} (\overline{\rho^{\alpha(\alpha/\beta)} w^{\alpha(\alpha/\beta)} v_n^{\alpha/\beta}} - \overline{\rho^{\alpha(\alpha/\beta)} w^{\alpha(\alpha/\beta)} v_n^{\alpha(\alpha/\beta)}}) - J_n^{\alpha(\alpha/\beta)} \right) \end{aligned} \quad (4.3)$$

Le terme  $S_v^{\alpha/\beta} (\overline{\rho^{\alpha(\alpha/\beta)} w^{\alpha(\alpha/\beta)} v_n^{\alpha/\beta}} - \overline{\rho^{\alpha(\alpha/\beta)} w^{\alpha(\alpha/\beta)} v_n^{\alpha(\alpha/\beta)}})$  représente l'évolution de la composition de la phase  $\alpha$  due à l'évolution de l'interface  $\alpha/\beta$ .

Cette évolution peut être due à la croissance ou à la germination. On appellera  $\Gamma^{\alpha/\beta}$  le taux de l'évolution de la phase  $\alpha$  par croissance et  $\Phi^\alpha$  la contribution de la germination. On prendra, de plus l'hypothèse que la phase  $\alpha$  germe avec une composition égale à  $k \langle w^\beta \rangle^\beta$ ,  $k$  étant le coefficient de partition. Par la suite, on obtient l'équation suivante :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(g^\alpha \rho^\alpha \langle w^\alpha \rangle^\alpha) + \text{div}(g^\alpha \rho^\alpha \langle w^\alpha \rangle^\alpha \langle \mathbf{v}^\alpha \rangle^\alpha) \\ &= \sum_{\alpha/\beta} \left( w^{\alpha(\alpha/\beta)} \Gamma^{\alpha/\beta} - J_n^{\alpha(\alpha/\beta)} \right) + \Phi^\alpha k \langle w^\beta \rangle^\beta \end{aligned} \quad (4.4)$$

Pour les équilibres à l'interface, on reprend les équations (2.6) et (2.7) et on trouve :

**C/** Pour l'équilibre de masse :

$$S_v^{\alpha/\beta} \left( \overline{\rho^{\alpha(\alpha/\beta)} v_n^{\alpha/\beta}} - \overline{\rho^{\alpha(\alpha/\beta)} v_n^{\alpha(\alpha/\beta)}} \right) + S_v^{\alpha/\beta} \left( \overline{\rho^{\beta(\alpha/\beta)} v_n^{\alpha/\beta}} - \overline{\rho^{\beta(\alpha/\beta)} v_n^{\beta(\alpha/\beta)}} \right) = 0 \quad (4.5)$$

ou encore avec les notations définies :

$$\Gamma^{\alpha/\beta} + \Gamma^{\beta/\alpha} = 0 \quad (4.6)$$

**D/** Pour l'équilibre de flux de soluté :

$$\begin{aligned} & S_v^{\alpha/\beta} \left( \overline{(\rho^{\alpha(\alpha/\beta)} w^{\alpha(\alpha/\beta)} v_n^{\alpha/\beta} - \rho^{\alpha(\alpha/\beta)} w^{\alpha(\alpha/\beta)} v_n^{\alpha(\alpha/\beta)})} \right. \\ & \left. + \overline{(\rho^{\beta(\alpha/\beta)} w^{\beta(\alpha/\beta)} v_n^{\alpha/\beta} - \rho^{\beta(\alpha/\beta)} w^{\beta(\alpha/\beta)} v_n^{\beta(\alpha/\beta)})} \right) - J_n^{\alpha(\alpha/\beta)} - J_n^{\beta(\alpha/\beta)} = 0 \end{aligned} \quad (4.7)$$

ou encore avec les notations précédemment définies :

$$w^{\alpha(\alpha/\beta)} \Gamma^{\alpha/\beta} + w^{\beta(\alpha/\beta)} \Gamma^{\beta/\alpha} - J_n^{\alpha(\alpha/\beta)} - J_n^{\beta(\alpha/\beta)} = 0 \quad (4.8)$$

# Annexe B

## Les équations splittées

Afin de bien prendre en considération tous les phénomènes qui se produisent, les équations ci dessus doivent être résolues en utilisant de très petits pas de temps. Toutefois, résoudre ces équations ainsi, pour des lingots d'acier de taille industrielle, nécessitera un temps important de calcul. D'où l'approche de la séparation des échelles proposée par Combeau [31] et Thevoz [30], réutilisée par Leriche [9] et Nguyen [26] dans leurs travaux. Selon cette méthode, les fractions de phases ainsi que la composition sont supposées évoluer suivant deux étapes : une étape macroscopique de transport et une étape microscopique de croissance. En utilisant cette hypothèse, les équations décrivant chaque étape peuvent être résolues sur des échelles spatiales et temporelles différentes et ainsi correspondre à une approche multi-échelles. Plus spécifiquement : les équations ci-dessus sont partagés en 3 parties : partie correspondant à l'étape de transport (tr) résolue en utilisant un macro pas de temps, une étape de germination (N) et une étape de croissance résolue en utilisant un micro pas de temps.

### 1 Echelle macroscopique : équations de transport

#### 1.1 Bilans de masse totale

En appliquant l'équation 4.2 successivement sur les phases  $s^{(k)}$  et  $l^{(k)}$  en ne prenant que les termes relatifs au transport (en éliminant les termes relatifs à la germination et à la croissance), on obtient les deux équations suivantes dont la résolution nous donne l'évolution des phases  $s^{(k)}$  et  $l^{(k)}$  après l'étape de

transport :

$$\frac{\partial}{\partial t}(g_{tr}^{s^{(k)}} \rho^s) + \text{div}(g_{tr}^{s^{(k)}} \rho^s \langle \mathbf{v}^{s^{(k)}} \rangle^{s^{(k)}}) = 0 \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(g_{tr}^{l^{(k)}} \rho^l) + \text{div}(g_{tr}^{l^{(k)}} \rho^l \langle \mathbf{v}^{l^{(k)}} \rangle^{l^{(k)}}) = 0 \quad (1.2)$$

## 1.2 Bilans de masse de soluté

En appliquant l'équation [4.4](#) pour les phases  $s^{(k)}$  et  $\alpha$  et en ne prenant que les termes relatifs au transport, on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial t}(g_{tr}^{s^{(k)}} \rho^s \langle w^{s^{(k)}} \rangle_{tr}^{s^{(k)}}) + \text{div}(g_{tr}^{s^{(k)}} \rho^s \langle w^{s^{(k)}} \rangle_{tr}^{s^{(k)}} \langle \mathbf{v}^{s^{(k)}} \rangle^{s^{(k)}}) = 0 \quad (1.3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(g_{tr}^{\alpha} \rho^l \langle w^{\alpha} \rangle_{tr}^{\alpha}) + \text{div}(g_{tr}^{\alpha} \rho^l \langle w^{\alpha} \rangle_{tr}^{\alpha} \langle \mathbf{v}^{\alpha} \rangle^{\alpha}) = 0 \quad (1.4)$$

avec  $\alpha$  qui peut être : le liquide intragranulaire  $l_1^{(k)}$ , le liquide extragranulaire  $l_2^{(k)}$  ou le liquide total  $l^{(k)}$ .

## 2 Echelle microscopique : croissance et germination

### 2.1 Bilans de masse totale

**Germination :** En appliquant l'équation [4.2](#) sur les phases  $s^{(k)}$  et  $l^{(k)}$  et en prenant les termes relatifs à la germination, on obtient l'équation décrivant l'évolution des fractions solide et liquide après l'étape de germination.

$$\frac{\partial}{\partial t}(g_N^{s^{(k)}} \rho^s) = \Phi^{s^{(k)}/l_1^{(k)}} \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(g_N^{l^{(k)}} \rho^l) = -\Phi^{s^{(k)}/l_1^{(k)}} \quad (2.2)$$

**Croissance :** En appliquant les mêmes équations précédentes et en prenant les termes relatifs à la croissance :

$$\frac{\partial}{\partial t}(g^{s^{(k)}} \rho^s) = \Gamma^{s^{(k)}/l_1^{(k)}} \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(g^{l^{(k)}} \rho^l) = -\Gamma^{s^{(k)}/l_1^{(k)}} \quad (2.4)$$

## 2.2 Bilans de masse de soluté

### Germination

$$\frac{\partial}{\partial t}(g_N^{s^{(k)}} \rho^s \langle w^{s^{(k)}} \rangle_N^{s^{(k)}}) = \Phi^{s^{(k)}/l_1^{(k)}} k \langle w^{l^{(k)}} \rangle^{l^{(k)}} \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(g_N^{l^{(k)}} \rho^l \langle w^{l^{(k)}} \rangle_N^{l^{(k)}}) = -\Phi^{s^{(k)}/l_1^{(k)}} k \langle w^{l^{(k)}} \rangle^{l^{(k)}} \quad (2.6)$$

### Croissance

$$\frac{\partial}{\partial t}(g^{s^{(k)}} \rho^s \langle w^{s^{(k)}} \rangle^{s^{(k)}}) = w^{s^{(k)}(s^{(k)}/l_1^{(k)})} \Gamma^{s^{(k)}/l_1^{(k)}} - J_n^{s^{(k)}(s^{(k)}/l_1^{(k)})} \quad (2.7)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(g^{l_1^{(k)}} \rho^l \langle w^{l_1^{(k)}} \rangle^{l_1^{(k)}}) &= w^{l_1^{(k)}(l_1^{(k)}/l_2^{(k)})} \Gamma^{l_1^{(k)}/l_2^{(k)}} - w^{l_1^{(k)}(s^{(k)}/l_1^{(k)})} \Gamma^{s^{(k)}/l_1^{(k)}} \\ &\quad - J_n^{l_1^{(k)}(s^{(k)}/l_1^{(k)})} - J_n^{l_1^{(k)}(l_1^{(k)}/l_2^{(k)})} \end{aligned} \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(g^{l_2^{(k)}} \rho^l \langle w^{l_2^{(k)}} \rangle^{l_2^{(k)}}) = -w^{l_2^{(k)}(l_1^{(k)}/l_2^{(k)})} \Gamma^{l_1^{(k)}/l_2^{(k)}} - J_n^{l_2^{(k)}(l_1^{(k)}/l_2^{(k)})} \quad (2.9)$$

**Liquide total** ( $l^{(k)} = l_1^{(k)} + l_2^{(k)}$ ) On exprime la partie à gauche du bilan de masse de soluté sur le liquide intragranulaire (I.23) de la manière suivante :

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial t}(g^{l_1^{(k)}} \rho^l \langle w^{l_1^{(k)}} \rangle^{l_1^{(k)}}) \\ &= \frac{\partial}{\partial t}(g^{l_1^{(k)}} \rho^l) \langle w^{l_1^{(k)}} \rangle^{l_1^{(k)}} + g^{l_1^{(k)}} \rho^l \frac{\partial}{\partial t}(\langle w^{l_1^{(k)}} \rangle^{l_1^{(k)}}) \end{aligned} \quad (2.10)$$

En utilisant le bilan de masse sur le liquide intragranulaire (1.20), l'équation précédente s'écrit :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (g^{l_1^{(k)}} \rho^l \langle w^{l_1^{(k)}} \rangle^{l_1^{(k)}}) \\ &= (\Gamma^{l_1^{(k)}/l_2^{(k)}} - \Gamma^{s^{(k)}/l_1^{(k)}} - \Phi^{s^{(k)}}) \langle w^{l_1^{(k)}} \rangle^{l_1^{(k)}} + g^{l_1^{(k)}} \rho^l \frac{\partial}{\partial t} (\langle w^{l_1^{(k)}} \rangle^{l_1^{(k)}}) \end{aligned} \quad (2.11)$$

Ensuite, on considère une concentration uniforme pour le liquide intragranulaire. En plus, on néglige la variation temporelle de cette concentration comme ceci n'implique pas des erreurs importantes comme ça était montré par Tveito [58]. On obtient par la suite l'équation de conservation suivante pour la masse de soluté le liquide intragranulaire :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (g^{l_1^{(k)}} \rho^l w^{l_1^{(k)}(s^{(k)}/l_1^{(k)})}) \\ &= (\Gamma^{l_1^{(k)}/l_2^{(k)}} - \Gamma^{s^{(k)}/l_1^{(k)}} - \Phi^{s^{(k)}}) w^{l_1^{(k)}(s^{(k)}/l_1^{(k)})} \end{aligned} \quad (2.12)$$

On réécrit l'équation de bilan de soluté présent dans le liquide extragranulaire

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (g^{l_2^{(k)}} \rho^l \langle w^{l_2^{(k)}} \rangle^{l_2^{(k)}}) \\ &= -w^{l_2^{(k)}(l_1^{(k)}/l_2^{(k)})} \Gamma^{l_1^{(k)}/l_2^{(k)}} - J_n^{l_2^{(k)}(l_1^{(k)}/l_2^{(k)})} \end{aligned} \quad (2.13)$$

La sommation des deux équations précédentes nous donne le bilan de soluté présent dans le liquide intra et extragranulaire :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (g^{l_1^{(k)}} \rho^l \langle w^{l_1^{(k)}} \rangle^{l_1^{(k)}}) = -\Gamma^{s^{(k)}/l_1^{(k)}} w^{l_1^{(k)}(l_1^{(k)}/s^{(k)})} \\ & - \Phi^{s^{(k)}} w^{l_1^{(k)}(l_1^{(k)}/s^{(k)})} - J_n^{l_2^{(k)}(l_1^{(k)}/l_2^{(k)})} \end{aligned} \quad (2.14)$$

avec

$$J_n^{l_2^{(k)}(l_1^{(k)}/l_2^{(k)})} = -\rho^l D^l S_v^{l_2^{(k)}/l_1^{(k)}} \frac{w^{l_2^{(k)}(l_2^{(k)}/l_1^{(k)})} - \langle w^{l_2^{(k)}} \rangle^{l_2^{(k)}}}{\delta^{l_2^{(k)}(l_1^{(k)}/l_2^{(k)})}} \quad (2.15)$$

Or on a

$$\left\langle w^{l_2^{(k)}} \right\rangle^{l_2^{(k)}} = \frac{g^{l_1^{(k)}} \left\langle w^{l_1^{(k)}} \right\rangle^{l_1^{(k)}} - g^{l_1^{(k)}} w^{l_1^{(k)}}(s^{(k)}/l_1^{(k)})}{g^{l_2^{(k)}}} \quad (2.16)$$

Par la suite

$$\begin{aligned} & \rho^l D^l S_v^{l_2^{(k)}/l_1^{(k)}} \frac{w^{l_2^{(k)}}(l_2^{(k)}/l_1^{(k)}) - \left\langle w^{l_2^{(k)}} \right\rangle^{l_2^{(k)}}}{\delta^{l_2^{(k)}}(l_1^{(k)}/l_2^{(k)})} = \\ & \rho^l D^l S_v^{l_2^{(k)}/l_1^{(k)}} \frac{w^{l_2^{(k)}}(l_2^{(k)}/l_1^{(k)}) - \frac{g^{l_1^{(k)}} \left\langle w^{l_1^{(k)}} \right\rangle^{l_1^{(k)}} - g^{l_1^{(k)}} w^{l_1^{(k)}}(s^{(k)}/l_1^{(k)})}{g^{l_2^{(k)}}}}{\delta^{l_2^{(k)}}(l_1^{(k)}/l_2^{(k)})} \\ & = \rho^l D^l S_v^{l_2^{(k)}/l_1^{(k)}} \frac{w^{l_2^{(k)}}(l_2^{(k)}/l_1^{(k)}) - \frac{g^{l_1^{(k)}} \left\langle w^{l_1^{(k)}} \right\rangle^{l_1^{(k)}} - (g^{l_1^{(k)}} - g^{l_2^{(k)}}) w^{l_1^{(k)}}(s^{(k)}/l_1^{(k)})}{g^{l_2^{(k)}}}}{\delta^{l_2^{(k)}}(l_1^{(k)}/l_2^{(k)})} \end{aligned} \quad (2.17)$$

En réarrangeant les termes et en considérant  $w^{l_2^{(k)}}(l_2^{(k)}/l_1^{(k)}) = w^{l_1^{(k)}}(s^{(k)}/l_1^{(k)})$

$$J_n^{l_2^{(k)}(l_1^{(k)}/l_2^{(k)})} = -\rho^l D^l S_v^{l_2^{(k)}/l_1^{(k)}} \frac{g^{l_1^{(k)}} w^{l_1^{(k)}}(s^{(k)}/l_1^{(k)}) - \left\langle w^{l_1^{(k)}} \right\rangle^{l_1^{(k)}}}{g^{l_2^{(k)}} \delta^{l_2^{(k)}}(l_1^{(k)}/l_2^{(k)})} \quad (2.18)$$

En séparant les termes relatifs à la germination et ceux dus à la croissance, on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial t} (g_N^{l_1^{(k)}} \rho^l \left\langle w^{l_1^{(k)}} \right\rangle_N^{l_1^{(k)}}) = -\Phi^{s^{(k)}} w^{l_1^{(k)}}(l_1^{(k)}/s^{(k)}) \quad (2.19)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (g^{l_1^{(k)}} \rho^l \left\langle w^{l_1^{(k)}} \right\rangle^{l_1^{(k)}}) = -\Gamma^{s^{(k)}/l_1^{(k)}} w^{l_1^{(k)}}(l_1^{(k)}/s^{(k)}) + J_n^{l_2^{(k)}(l_1^{(k)}/l_2^{(k)})} \quad (2.20)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (g^{l^{(k)}} \rho^l \langle w^{l^{(k)}} \rangle^{l^{(k)}}) = -\Gamma^{s^{(k)}/l_1^{(k)}} w^{l_1^{(k)}(s^{(k)}/l_1^{(k)})} - \rho^l D^l S_v^{l_1^{(k)}/l_2^{(k)}} \frac{g^{l^{(k)}} w^{l_1^{(k)}(s^{(k)}/l_1^{(k)})} - \langle w^{l^{(k)}} \rangle^{l^{(k)}}}{g^{l_2^{(k)}} \delta^{l_2^{(k)}(l_1^{(k)}/l_2^{(k)})}} \quad (2.21)$$

Les différentes équations précédentes sont établies en s'inspirant des travaux de Tourret [36], Bedel [59] et Nguyen [26].

Les expressions de longueur de diffusion  $\delta_l$  ainsi que des surfaces spécifique  $S_v$  sont prises tel que utilisées par Nguyen [26] dans ses travaux. Leurs expressions sont pris des travaux de Tveito [60] et Bedel [59].

L'hypothèse faite que le bras colonnaire est considéré comme un assemblage de sous-structures semblables à celle de l'équiaxe fait qu'on utilise les mêmes expressions de longueur de diffusion et de surface spécifique pour les deux structures colonnaire et équiaxe.

# Annexe C

## Données thermodynamiques

Al-7%pds Si			
Composition	$w_0$	7	%pds
Densité (à la température de liquidus)	$\rho$	2452	kg .m <sup>-3</sup>
Chaleur spécifique	$c_p$	1060	J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>
Conductivité thermique dans le liquide	$\lambda_l$	70	W.m <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>
Conductivité thermique dans le solide	$\lambda_s$	70	W.m <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>
Coefficient de diffusion dans le liquide	$D_l$	6,45.10 <sup>-9</sup>	m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup>
Coefficient de diffusion dans le solide	$D_s$	10 <sup>-12</sup>	m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup>
Chaleur latente	$\Delta h_f$	3,874.10 <sup>5</sup>	J.kg <sup>-1</sup>
Température de fusion du corps pur	$T_f(\text{Al})$	663.5	°C
Température de l'eutectique	$T_{eut}$	577	°C
Pente du liquidus	$m_l$	-6.5	°C (pds.%) <sup>-1</sup>
Coefficient de partage	k	0,13	-

TABLE C.1: Propriétés de l'alliage Al-7%pds Si (Chapitre-3 / Section-1) [9].

Al-7%pds Si			
Composition	$w_0$	7	%pds
Densité (à la température de liquidus)	$\rho$	2452	kg .m <sup>-3</sup>
Chaleur spécifique	$c_p$	1060	J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>
Conductivité thermique dans le liquide	$\lambda_l$	T (°C) $\lambda_l$ 450 56.38485 618. 61. 800 66.	W.m <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>
Conductivité thermique dans le solide	$\lambda_s$	T (°C) $\lambda_s$ 300. 170. 400. 165. 500. 155. 550. 145. 577 139.6 700 115.	W.m <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>
Coefficient de diffusion dans le liquide	$D_l$	6,45.10 <sup>-9</sup>	m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup>
Coefficient de diffusion dans le solide	$D_s$	10 <sup>-12</sup>	m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup>
Chaleur latente	$\Delta h_f$	3,874.10 <sup>5</sup>	J.kg <sup>-1</sup>
Température de fusion du corps pur	$T_f(Al)$	663.5	°C
Température de l'eutectique	$T_{eut}$	577	°C
Pente du liquidus	$m_l$	-6.5	°C(pds.%) <sup>-1</sup>
Coefficient de partage	k	0,13	-

TABLE C.2: Propriétés de l'alliage Al-7%pds Si (Chapitre-3 / Section-2) [19].

## ANNEXE C. DONNÉES THERMODYNAMIQUES

Fe-0.4 %pds C			
Composition	$w_0$	0.4	%pds
Densité (à la température de liquidus)	$\rho$	7060	kg .m <sup>-3</sup>
Chaleur spécifique	$c_p$	500	J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>
Conductivité thermique dans le liquide	$\lambda_l$	30	W.m <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>
Conductivité thermique dans le solide	$\lambda_s$	40	W.m <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>
Coefficient de diffusion dans le liquide	$D_l$	$2 \times 10^{-8}$	m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup>
Coefficient de diffusion dans le solide	$D_s$	$5.187 \times 10^{-11}$	m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup>
Chaleur latente	$\Delta h_f$	$3.09 \times 10^5$	J.kg <sup>-1</sup>
Température de fusion du corps pur	$T_f(\text{Fe})$	1538	°C
Température de l'eutectique	$T_{eut}$	1154	°C
Pente du liquidus	$m_l$	-85	°C(pds.%) <sup>-1</sup>
Coefficient de partage	k	0,18	-
Coefficient de Gibbs Thomson	$\Gamma$	$3.3 \times 10^{-7}$	m.K
Coefficient du retrait	$C_{ret}$	0.04	-
Viscosité dynamique	$\eta$	$4 \times 10^{-3}$	Pa.s
Coefficient de dilatation thermique	$\beta_T$	$1.07 \times 10^{-4}$	K <sup>-1</sup>
Coefficient de dilatation solutale	$\beta_w$	$1.4 \times 10^{-2}$	% mass <sup>-1</sup>
Espacement primaire	$\lambda_1$	500	μm
Espacement secondaire	$\lambda_2$	100	μm

TABLE C.3: Propriétés de l'alliage Fe-0.4%pds C (Chapitre-3 / Section-3).

Fe-0.36%pds C			
Composition	$w_0$	0.36	%pds
Densité (à la température de liquidus)	$\rho$	6990	kg .m <sup>-3</sup>
Chaleur spécifique	$c_p$	500	J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>
Conductivité thermique dans le liquide	$\lambda_l$	39,3	W.m <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>
Conductivité thermique dans le solide	$\lambda_s$	25	W.m <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>
Coefficient de diffusion dans le liquide	$D_l$	$2 \times 10^{-8}$	m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup>
Coefficient de diffusion dans le solide	$D_s$	$5.187 \times 10^{-11}$	m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup>
Chaleur latente	$\Delta h_f$	$2.71 \times 10^5$	J.kg <sup>-1</sup>
Température de fusion du corps pur	$T_f(\text{Fe})$	1805.15	K
Température de l'eutectique	$T_{eut}$	1734,52	K
Pente du liquidus	$m_l$	-80.45	°C(pds.%) <sup>-1</sup>
Coefficient de partage	k	0,314	-
Coefficient de Gibbs Thomson	$\Gamma$	$1.5 \times 10^{-7}$	m.K
Coefficient du retrait	$C_{ret}$	0.0393	-
Viscosité dynamique	$\eta$	$4.2 \times 10^{-3}$	Pa.s
Coefficient de dilatation thermique	$\beta_T$	$1.07 \times 10^{-4}$	K <sup>-1</sup>
Coefficient de dilatation solutale	$\beta_w$	$1.4164 \times 10^{-2}$	% mass <sup>-1</sup>
Espacement primaire	$\lambda_1$	500	μm
Espacement secondaire	$\lambda_2$	500	μm

TABLE C.4: Propriétés de l'alliage Fe-0.36%pds C (Chapitre-4 / Section-1)[26].

## ANNEXE C. DONNÉES THERMODYNAMIQUES

Fe-0.1984 %pds C			
Composition	$w_0$	0.1984	%pds
Densité (à la température de liquidus)	$\rho$	7029.25	kg .m <sup>-3</sup>
Chaleur spécifique	$c_p$	500	J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>
Conductivité thermique dans le liquide	$\lambda_l$	40	W.m <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>
Conductivité thermique dans le solide	$\lambda_s$	30	W.m <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>
Coefficient de diffusion dans le liquide	$D_l$	$2 \times 10^{-8}$	m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup>
Coefficient de diffusion dans le solide	$D_s$	$5.187 \times 10^{-11}$	m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup>
Chaleur latente	$\Delta h_f$	$3.09 \times 10^5$	J.kg <sup>-1</sup>
Température de fusion du corps pur	$T_f(\text{Fe})$	1797.66	K
Température de l'eutectique	$T_{eut}$	1739.4444	K
Pente du liquidus	$m_l$	-81.73	°C(pds.%) <sup>-1</sup>
Coefficient de partage	k	0.155	-
Coefficient de Gibbs Thomson	$\Gamma$	$3.3 \times 10^{-7}$	m.K
Coefficient du retrait	$C_{ret}$	0.0357	-
Viscosité dynamique	$\eta$	$4.2 \times 10^{-3}$	Pa.s
Coefficient de dilatation thermique	$\beta_T$	$9.01 \times 10^{-5}$	K <sup>-1</sup>
Coefficient de dilatation solutale	$\beta_w$	$1.4 \times 10^{-2}$	% mass <sup>-1</sup>
Espacement primaire	$\lambda_1$	500	μm
Espacement secondaire	$\lambda_2$	70	μm

TABLE C.5: Propriétés de l'alliage Fe-0.1984%pds C (Chapitre-4 / Section-2).



# Bibliographie

- [1] Projet Fond Unique Interministériel(FUI). Dossier de présentation du projet soft-defis, 21ème appel à projet. 2016.
- [2] Lesoult G. Macrosegregation in steel strands and ingots : Characterisation and formation and consequences. *Materials Science and Engineering A*, 413 :19–29, 2005.
- [3] Flemings M.C. Strengthening of wrought aluminum-alloys by fractional melting. *Journal of Metals*, 31(12) :92–92, 1979.
- [4] Nguyen T.T.M. Thesis defense : Multiscale finite element modeling of solidification structures and interaction with fluid mechanics. 2015.
- [5] Combeau H., Kumar A., and Založnik M. Modeling of equiaxed grain evolution and macrosegregations development in steel ingots. *Transactions of the Indian Institute of Metals*, 62 :285–290, 2009.
- [6] Hellawell A., Sarazin J.R, and Steube B. Channel convection in partly solidified systems. *Philosophical Transactions : Physical Sciences and Engineering*, 345 :507–544, 1993.
- [7] Lesoult G. Solidification. cristallisation et microstructures. *Techniques de l'ingénieur. Matériaux métalliques*, (M58) :M58–1, 1986.
- [8] Kurz W. and Fisher D.J. *Fundamentals of solidification*. Trans Tech Publications, 1992.
- [9] Leriche N. *Etude de la Transition Colonnaire-Equiaxe dans les lingots et en coulée continue d'acier et influence du mouvement des grains*. PhD thesis, Institut Jean Lamour, 2015.
- [10] Winegard W.C. and Chalmers B. Supercooling and dendritic freezing in alloys. *Transactions of the ASM*, 46 :1214–1223, 1954.

- [11] Chalmers B. The structure of ingots. *Journal of the Australian Institute of Metals*, 8 :255–263, 1963.
- [12] Jackson K.A., Hunt J.D., Uhlmann D.R., and Seward T.P. On origin of equiaxed zone in castings. *Transactions of the Metallurgical Society of AIME*, 236 :149–158, 1966.
- [13] Ivantsov G.P. The temperature field around a spherical, cylindrical, or pointed crystal growing in a cooling solution. *Doklady Akademii Nauk SSSR*, 58 :567–569, 1947.
- [14] Burden M.H. and Hunt J.D. Cellular and dendritic growth. ii. *Journal of Crystal Growth*, 22 :109–116, 1974.
- [15] Hunt J.D. Steady state columnar and equiaxed growth of dendrites and eutectic. *Materials Science and Engineering*, 65(1) :75–83, 1984.
- [16] Lipton J., Glicksman M.E., and Kurz W. Dendritic growth into undercooled alloy metals. *Materials Science and Engineering*, 65 :57–63, 1984.
- [17] Gandin Ch.-A, Guillemot G., Appolaire B., and Niane N.T. Boundary layer correlation for dendrite tip growth with fluid flow. *Materials Science and Engineering : A*, 342(1-2) :44–50, 2003.
- [18] Martorano M.A., Beckermann C., and Gandin Ch.-A. A solutal interaction mechanism for the columnar-to-equiaxed transition in alloy solidification. *Metallurgical and Materials Transactions*, A34 :1657–1674, 2003.
- [19] Gandin Ch.-A. Experimental study of the transition from constrained to unconstrained growth during directional solidification. *ISIJ International*, 40 :971–979, 2000.
- [20] Rappaz M. and Gandin Ch.-A. Probabilistic modelling of microstructure formation in solidification processes. *Acta Metallurgica and Materialia* 41, 2 :345–360, 1993.
- [21] Guillemot G., Gandin Ch.-A., and Combeau H. Modeling of macrosegregation and solidification grain structures with a coupled cellular automaton—finite element model. *ISIJ International*, 46 :880–895., 2006.

- [22] Guillemot G., Gandin Ch.-A., and Bellet M. Interaction between single grain solidification and macrosegregation : Application of a cellular automaton—finite element model. *Journal of Crystal Growth*, 303 :58–68, 2007.
- [23] Carozzani T., Digonnet H., and Gandin Ch.-A. 3d cafe modeling of grain structures : application to primary dendritic and secondary eutectic solidification. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 20(1) :015010, 2011.
- [24] Lakehal D., Meier M., Fulgosi M., Juric D., Al-Rawahi N., Tauber W., Han J., Nas S., and Jan Y.-J. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 23, 2002.
- [25] Badillo A. and Beckermann C. Phase-field simulation of the columnar-to-equiaxed transition in alloy solidification. *Acta Materialia*, 54 :2015–2026, 2006.
- [26] Nguyen T.T.M. *Modélisation multi-échelle d'éléments fins de la macroségrégation et du transport des grains*. PhD thesis, Mines ParisTech, 2015.
- [27] Beckermann C. and Viskanta R. Mathematical modeling of transport phenomena during alloy solidification. *Applied Mechanics Reviews*, 1 :1–27, 1993.
- [28] Ludwig A. and Wu M. Modeling of globular equiaxed solidification with a two-phase approach. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 33A :3673–3683, 2002.
- [29] Wang C.Y. and Beckermann C. Prediction of columnar to equiaxed transition during diffusion-controlled dendritic alloy solidification. *Metallurgical and Materials Transactions*, A25 :1081–1093, 1994.
- [30] Thévoz Ph., Desbiolles J.L., and Rappaz M. Modeling of equiaxed microstructure formation in casting. *Metallurgical Transactions*, A20 :311–322, 1989.
- [31] Založnik M. and Combeau H. An operator splitting scheme for coupling macroscopic transport and grain growth in a two-phase multiscale solidi-

- fication model : Part 1—model and solution scheme. *Computational Materials Science*, 48(1) :1–10, 2010.
- [32] Ciobanas A.I. and Fautrelle Y. Ensemble averaged multiphase eulerian model for columnar/equiaxed solidification of a binary alloy : I. the mathematical model. *Journal of Physics D : Applied Physics*, 40 :3733–3762, 2007.
- [33] Ludwig A. and Wu M. Modeling the columnar-to-equiaxed transition with a three-phase eulerian approach. *Materials Science and Engineering*, 413 :109–114, 2005.
- [34] Jacot A., Maijer D., and Cockcroft S. A two-dimensional model for the description of the columnar-to-equiaxed transition in competing gray and white iron eutectics and its application to calender rolls. *Metallurgical and Materials Transactions*, A8 :77–82, 1977.
- [35] Mazet T. *Etude des structures de solidification et des ségrégations dans les lingots d'acier*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Lorraine, 1995.
- [36] Tourret D. *Modélisation des cinétiques de réactions multiples dans les alliages métalliques : étude de la microségrégation lors de la solidification dendritique, péritectique et eutectique d'alliages aluminium-nickel*. PhD thesis, Paris, ENSMP, 2009.
- [37] Wang C.Y. and Beckermann C. *Metallurgical and Materials Transactions*, A27 :2754–2764, 1996.
- [38] Browne D.J. and Hunt J.D. A fixed grid front-tracking model of the growth of a columnar front and an equiaxed grain during solidification of an alloy. *Numerical Heat Transfer, Part B : Fundamentals*, 45(5) :395–419, 2004.
- [39] Osher S. and Sethian J.A. Fronts propagating with curvature-dependent speed : algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *Journal of computational physics*, 79(1) :12–49, 1988.
- [40] Shakoor M., Scholtes B., Bouchard P.O., and Bernacki M. An efficient and parallel level set reinitialization method—application to micromechanics

- and microstructural evolutions. *Applied Mathematical Modelling*, 39(23-24) :7291–7302, 2015.
- [41] Zaragoci J.F. *Simulation numérique directe multiphasique de la déformation d'un alliage Al-Cu à l'état pâteux-Comparaison avec des observations par tomographie aux rayons X in situ en temps réel*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2012.
- [42] Giovanola B., Kurz W., and Trivedi R. Theory of microstructural development during rapid solidification. *Acta metallurgica*, 34(5) :823–830, 1986.
- [43] Kurz W. and Fisher D.J. *Fundamentals of solidification*. Trans Tech Publications, 1998.
- [44] Press W.H., Teukolsky S.A., Vetterling W.T., and Flannery B.P. *Numerical recipes 3rd edition : The art of scientific computing*. Cambridge university press, 2007.
- [45] Ville L., Silva L., and Coupez T. Convected level set method for the numerical simulation of fluid buckling. *International Journal for numerical methods in fluids*, 66(3) :324–344, 2011.
- [46] Agarwal P. and O'Neill B. K. Transport phenomena in multi-particle systems—i. pressure drop and friction factors : unifying the hydraulic-radius and submerged-object approaches. *Chemical Engineering Science*, 43(9) :2487–2499, 1988.
- [47] Nguyen T.T.M., Gandin Ch.-A., Combeau H., Založnik M., and Bellet M. Finite element multi-scale modeling of chemical segregation in steel solidification taking into account the transport of equiaxed grains. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 49(5) :1725–1748, 2018.
- [48] Winegard W.C. and Chalmers B. Supercooling and dendritic freezing in alloys. *Transactions of the American Society for Metals*, 46 :1214–1224, 1954.
- [49] Gandin Ch.-A. From constrained to unconstrained growth during directional solidification. *Acta Materialia*, 48(10) :2483–2501, 2000.

- [50] Gennesson M. *Étude expérimentale de la mise en place des structures de solidification dans les lingots d'acier*. PhD thesis, Université de Lorraine, 2018.
- [51] Combeau H., Založnik M., Hans S., and Richey P.E. Prediction of macrosegregation in steel ingots : Influence of the motion and the morphology of equiaxed grains. *Metallurgical and materials transactions B*, 40(3) :289–304, 2009.
- [52] Poitroult I. and Demurger J. Rapport sur les coulees industrielles, 1 - site industeel le creusot, 2 - site ascometal fos sur mer, livrable 3.7. 2019.
- [53] Habib M. A. Modélisation des structures de solidification après coulée de lingots de grandes dimensions. Master's thesis, Grenoble INP - Phelma, 2019.
- [54] Aalilija A., Gandin Ch.-A., and Hachem. E. A simple and efficient numerical model for thermal contact resistance based on diffuse interface immersed boundary method. *International Journal of Thermal Sciences*, 2020 (accepted).
- [55] Zhang S. *Numerical simulation of mechanical interactions between liquid and solid phase in solidification processes*. PhD thesis, Paris Sciences et Lettres, 2020.
- [56] Ni J. and Beckermann C. A volume-averaged two-phase model for transport phenomena during solidification. *Metallurgical Transactions B*, 22(3) :349–361, 1991.
- [57] Rappaz M., Bellet M., and Deville M. Numerical modelling in materials science and engineering. Technical report, 2003.
- [58] Tveito K., Pakanati A., M'hamdi M., Combeau H., and Založnik M. A simplified three-phase model of equiaxed solidification for the prediction of microstructure and macrosegregation in castings. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 49(7) :2778–2794, 2018.

- [59] Bedel M. *Etude de la formation des structures de solidification et des macroségrégations en coulée semi-continue d'aluminium*. PhD thesis, Université de Lorraine, 2014.
- [60] Tveito K., Bedel M., Založnik M., Combeau H., and M'Hamdi M. The effect of finite microscopic liquid solute diffusion on macrosegregation formation. In *IOP Conference Series : Materials Science and Engineering*, volume 27, page 012040. IOP Publishing, 2012.



## RÉSUMÉ

---

Intégré au projet national FUI SOFT-DEFIS, une activité de recherche a été réalisée visant à contribuer au développement d'un outil numérique prédisant la formation des structures de solidification équiaxe et colonnaire, ainsi que la zone de transition et les ségrégations chimiques associées dans la coulée des gros lingots en acier. Jusqu'à présent, les modèles utilisent généralement la méthode des volumes finis. Un premier modèle basé sur la méthode des éléments finis a été proposé mais limité à la solidification équiaxe. Ce dernier est étendu, dans ce projet de recherche, pour modéliser à la fois les structures colonnaires et équiaxes. Une méthode Level Set est appliquée afin de suivre la croissance du front colonnaire. Sa vitesse est calculée à l'aide d'un modèle de cinétique de croissance développé pour les microstructures dendritiques. Les grains équiaxes se développent dans le liquide en surfusion devant le front colonnaire et peuvent être transportés. Deux sources des grains équiaxes sont modélisés : la germination hétérogène ainsi que la fragmentation. Le modèle considère la morphologie dendritique pour les deux microstructures. Un critère de blocage solutal est utilisé pour prédire la position de la transition colonnaire-équiaxe. Les équations de conservation sont résolues en utilisant une méthode de splitting séparant les deux étapes de transport et croissance. Des simulations 2D et 3D ont permis de tester les différentes briques du modèle pour des petits lingots. Le modèle est appliqué, enfin, à l'échelle des lingots industriels pour prédire l'évolution des structures développées et des zones ségréguées, en comparaison avec les analyses expérimentales des partenaires du projet.

## MOTS CLÉS

---

Solidification, Modélisation, Transition colonnaire-équiaxe, Éléments finis, Macroségrégation, Multi-échelle, Fragmentation, Lingots.

## ABSTRACT

---

As part of the french SOFT-DEFIS project, this work aims to contribute to the development of a numerical tool predicting the formation of equiaxed and columnar solidification structures, as well as the transition zone and associated chemical segregations during large steel ingots casting. Until now, models generally use the finite volume method. A first model based on the finite element method has been proposed but limited to equiaxed solidification. The latter is extended to model both columnar and equiaxed structures. A Level-Set method is applied in order to follow the growth of the columnar front. Its velocity is calculated using a growth kinetics model developed for dendritic microstructures. Equiaxed grains develop in the undercooled liquid ahead of the columnar front and can be transported. Two sources of equiaxed grains are modeled : heterogeneous nucleation as well as fragmentation. The model considers the dendritic morphology for the two microstructures. A solutal blocking criterion is used to predict the position of the columnar-to-equiaxed transition. The conservation equations are solved using a splitting method separating the two stages of transport and growth. 2D and 3D simulations of small ingots serve as test for the different parts of the model. Finally, the model is applied at the scale of industrial ingots to predict the evolution of developed structures and segregated zones, in comparison with the experimental analyses of the project partners.

## KEYWORDS

---

Solidification, Modeling, Columnar-to-Equiaxed Transition, Finite Elements, Macrosegregation, Multiscale, Fragmentation, Ingots.