

la fonderie et de la macroségrégation

Chapitre 1	Introduction générale de la fonderie et de la macroségrégation.....	1
1.1.	La fonderie et la coulée de lingots	2
1.1.1.	Présentation du procédé de fonderie	2
1.1.2.	Domaines d'utilisation de la fonderie	3
1.1.3.	Coulée de lingots.....	4
1.2.	Les défauts et la macroségrégation sur les lingots industriels	6
1.2.1.	Présentation des différents défauts.....	6
1.2.2.	Exemple d'un cas industriel : lingot O3t3.....	7
1.3.	Simulation de la macroségrégation, état de la recherche	10
1.3.1.	Présentation de la solidification dendritique colonnaire d'un alliage binaire ..	10
1.3.2.	Les modèles macroscopiques	12
1.3.3.	Les paramètres des modèles	17
1.3.4.	Modèles de couplage T-g _s -c ₁	24
1.3.5.	Etat de l'art de la simulation et applications	28
1.4.	Contexte et objectifs de l'étude	30
1.4.1.	Contexte de l'étude et partenaires industriels	30
1.4.2.	Objectifs de l'étude	32

1.1. La fonderie et la coulée de lingots

1.1.1. Présentation du procédé de fonderie

« La fonderie peut apparaître comme une technique de fabrication très simple, universellement connue, utilisée depuis des millénaires et qui consiste à « fondre un alliage et le couler dans un moule reproduisant la forme de la pièce à obtenir ». Le processus industriel se révèle beaucoup plus complexe; il s'agit en effet de fabriquer des pièces répondant à des critères bien définis, avec des cahiers des charges rigoureux, dans une gamme étendue d'alliages différents à qui l'on demande des performances de plus en plus élevées et fiables, dans des gammes de masse allant de quelques grammes à plusieurs dizaines ou centaines de tonnes, avec des précisions dimensionnelles toujours serrées, des états de surface les meilleurs possibles, des formes complexes pour intégrer le maximum de fonctions et avec des cadences de production allant de la pièce unitaire à plusieurs milliers de pièces par jour dans des conditions les plus économiques possibles. »

P. Cuénin, *Technique de fabrication – Généralités*, Technique de l'ingénieur M3-510

Cette rapide présentation de la fonderie montre bien l'étendue des applications et aussi la complexité d'une étude scientifique de ce procédé très général. Ainsi, dans cette introduction, nous essayerons, en décrivant le procédé et les phénomènes physiques entrant en jeu, de mieux cerner la spécificité de la coulée de lingot dans le domaine de la fonderie.

Descriptif d'un procédé de fonderie

Le procédé classique de fonderie est constitué de cinq étapes principales :

- fabrication des parties du moule
- élaboration des alliages dans les appareils de fusion
- coulée du métal dans les moules
- refroidissement de la pièce dans le moule après coulée
- refroidissement final de la pièce

Chacune de ces étapes est un domaine d'étude à part entière avec ses problèmes techniques et ses contraintes économiques (très importantes dans ce domaine hautement concurrentiel).

La Figure 1-1 montre l'ensemble des étapes intervenant dans le procédé, en montrant en particulier les récupérations de matière intervenant tout au long du procédé ainsi que les étapes de finition.

Dans cette étude, seulement une étape du procédé sera traitée. En effet, nous nous limiterons à l'analyse de l'étape de refroidissement de la pièce dans le moule. Ainsi l'étape de remplissage ne sera pas étudiée et l'on considérera que le moule est initialement plein de métal liquide à une température homogène. Toutefois cet état initial peut aussi provenir des résultats d'un logiciel de remplissage de moules.

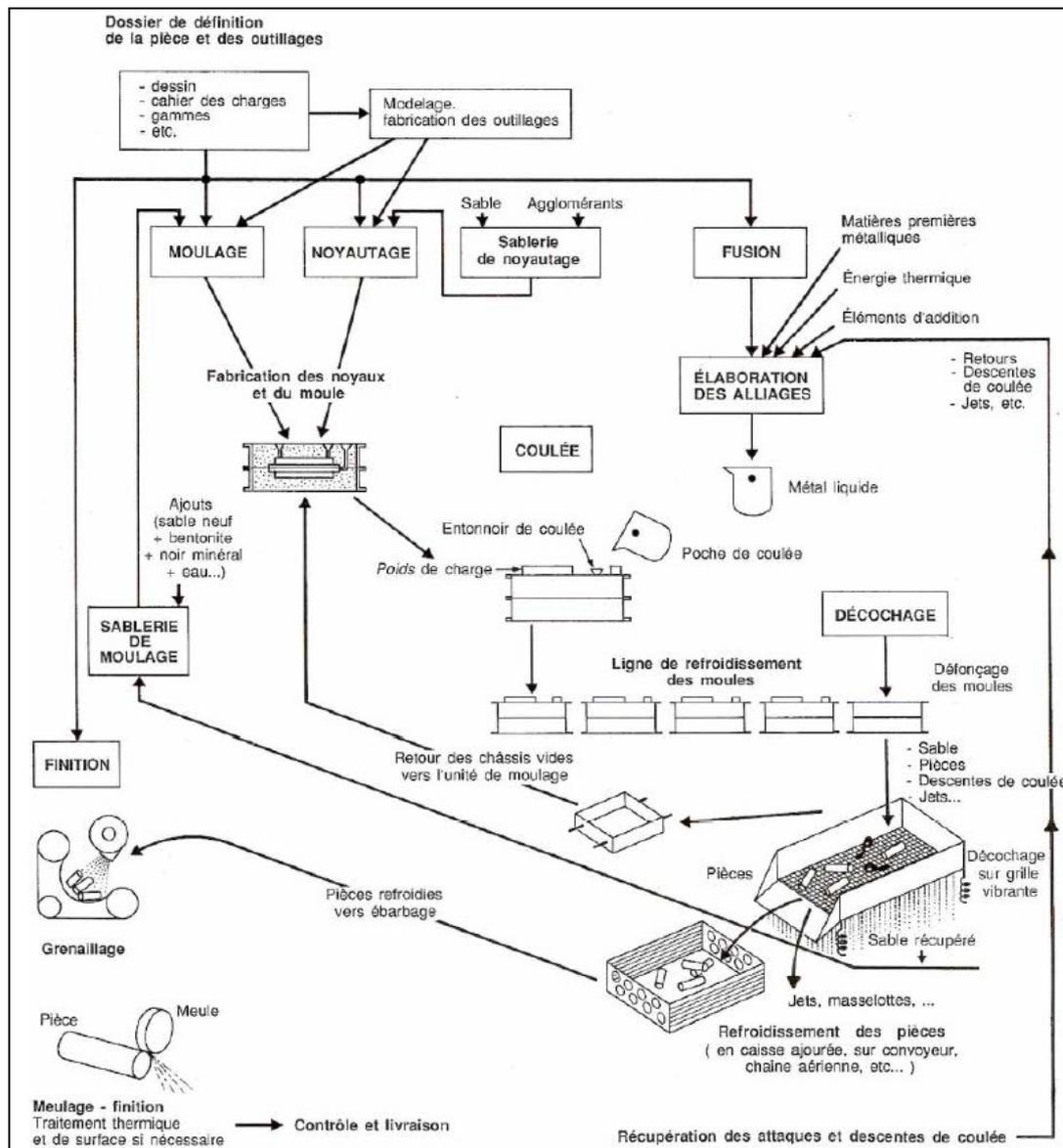
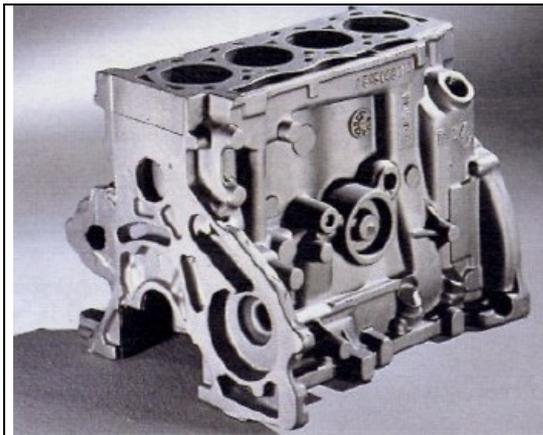


Figure 1-1 : Schéma de principe de la fabrication de pièces de fonderie. P. Cuénin, *Technique de fabrication – Généralités, Technique de l'ingénieur M3-510*

1.1.2. Domaines d'utilisation de la fonderie

La polyvalence du procédé de fonderie a conduit à un grand nombre d'applications que nous diviserons en deux catégories : la fabrication de pièces finies et la production de produits semi-finis. On peut ranger dans la première catégorie l'ensemble des applications conduisant à la production de pièces complexes ne nécessitant plus que des étapes de finition ou d'assemblage. La deuxième catégorie regroupe à l'inverse soit la coulée de pièce requérant une mise en forme très importante soit la coulée de lingots pour obtenir des nuances d'alliages très particulières.

La Figure 1-2 illustre deux pièces coulées de forme assez complexe et à des échelles complètement différentes.



Carter de cylindre en fonte (Fonderie du Poitou)



Cage de laminoir en acier (Industeel Creusot)

Figure 1-2 : Illustration de pièces coulées. P. Cuénin, *Industrie de la fonderie, Technique de l'ingénieur M3-500*

Pour la première catégorie la difficulté provient principalement de l'étape de remplissage, étant donné la complexité de la forme de la pièce. D'autre part, les pièces ainsi créées sont généralement de petite taille et peu massives. A contrario, les produits de la deuxième catégorie sont généralement massifs voire très massifs dans le cas des lingots, les processus physiques entrant en jeu au cours de la solidification sont alors d'un autre ordre. La convection dans le bain liquide devient importante et la solidification complète est longue, ce qui conduit à des transports plus importants et à un changement des processus de solidification et donc à la formation de structures cristallines différentes.

Choix de l'étude de la coulée de lingots

Cette différence fondamentale des processus de solidification entre les pièces complexes et les pièces massives comme les lingots, nous conduit donc à choisir la solidification en lingots pour notre étude. En effet le fait de négliger l'étape de remplissage dans le cas des pièces complexes est totalement inacceptable alors que dans le cas des lingots, on peut considérer qu'il s'agit d'une première approximation négligeant la solidification de la première peau intervenant lors du remplissage des lingots. Toutefois dans certains cas lors du remplissage de lingot une portion supérieure à 20% de la masse peut se solidifier en fonction de la vitesse de remplissage. Si la formation de cette couche solidifiée est importante à simuler, ce cas est moins critique que pour le remplissage de formes complexes et notre approximation reste encore utile.

1.1.3. Coulée de lingots

La coulée en lingots est une application assez particulière de la fonderie car si historiquement elle était utilisée pour l'obtention de la majorité des alliages, elle a depuis longtemps été supplantée par la coulée continue qui présente des avantages d'automatisation, de qualité des produits et surtout de productivité très importants. Toutefois la mise en place d'une production par coulée continue nécessite des investissements très importants qui ne sont économiquement viables que dans le cas de production de tonnage très important. Ainsi pour les marchés plus restreints le choix de la coulée en lingots peut être économiquement avantageux.

Les éléments de moules présents lors de la coulée d'un lingot sont schématisés sur la Figure 1-3. La lingotière est la partie principale qui permettra le refroidissement du métal liquide. Elle repose éventuellement sur une base plus ou moins isolante selon les besoins. L'alimentation en liquide peut aussi être réalisée par la base dans le cas de coulée en source. En effet deux types généraux de remplissage sont adoptés dans la coulée de lingots : la coulée en source et la coulée au jet (ou en chute) dont une variante est la coulée au panier. Dans la coulée en source, le remplissage est effectué par le bas à travers des canaux d'alimentation. Dans la coulée en panier, le remplissage est effectué en vidant un baquet de métal liquide guidé éventuellement par une quenouille qui permet de régulariser la pression ferrostatique, donc la vitesse, et aussi d'assurer le centrage du jet. Les avantages et les inconvénients de ces deux techniques sont résumés dans le Tableau 1-1.

Un autre élément essentiel dans le design d'un lingot est le choix du masselottage. En effet la partie supérieure du lingot, appelée masselotte, va servir à conserver une poche de métal liquide qui permettra d'alimenter le reste du lingot lors de la solidification. D'autre part, étant donné que cette zone est bien isolée, elle se solidifiera en dernier et concentrera donc la majorité de la macroségrégation positive, par l'enrichissement progressif du bain liquide comme nous le verrons par la suite. C'est aussi dans cette zone que se concentrent des défauts tels que porosité et retassure.

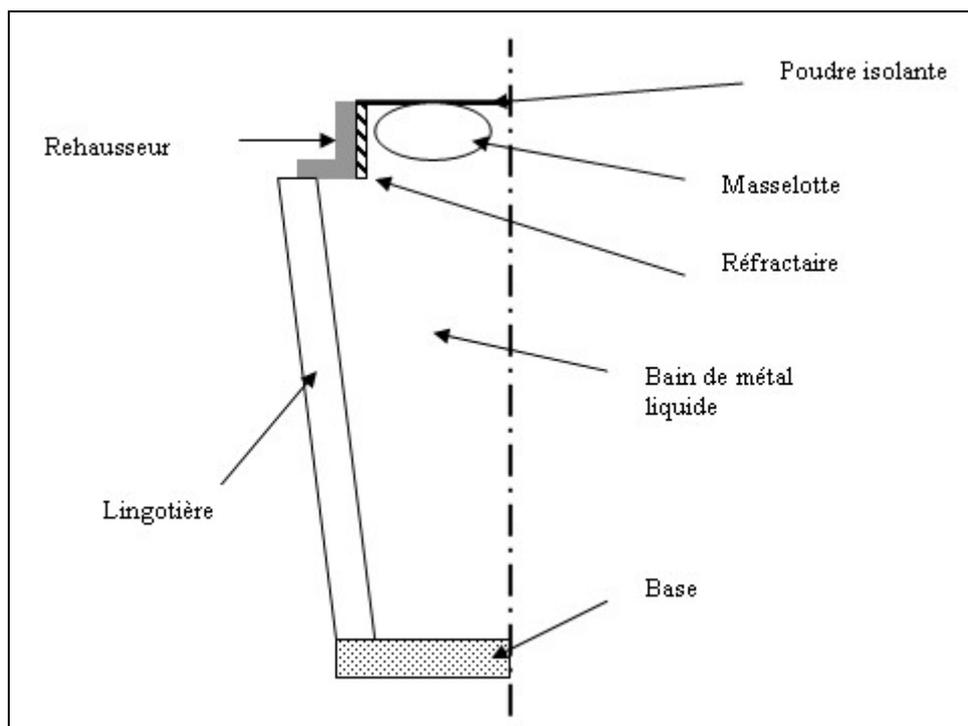


Figure 1-3 : Schéma général d'un lingot et des moules

Tableau 1-1 : Avantages et inconvénients de la coulée au jet et de la coulée en source. J. Duflot, *Technique de fabrication – Lingots. Lingotières, Technique de l'ingénieur M7-800*

Coulée au jet	Coulée en source
Avantages	
<ul style="list-style-type: none"> ● Température moins élevée. ● Moins d'attaques des réfractaires. ● Réactions de désoxydation plus complètes dans les effervescents. ● Moins de complications techniques. ● Moins chère (main d'œuvre, réfractaire, pertes de métal dans la mère et les canaux, température au four). ● Meilleure mise au mille. 	<ul style="list-style-type: none"> ● Diminue la vitesse de montée en lingotière, d'où des soufflures d'effervescence plus éloignées de la peau. ● Moins de risques de criques. ● Meilleur état de surface. ● Moins sévère pour les lingotières. ● Permet la coulée simultanée de nombreux petits lingots ou la diminution du temps total de coulée.
Inconvénients	
<ul style="list-style-type: none"> ● Éclaboussures en pied donnant des surfaces moins belles. ● Brûlures des lingotières étroites par mauvais centrage. ● Attaque et érosion des bases avec recarburation possible par le carbone de la fonte de la base. ● Collage sur les bases, nettoyage des produits plus important (criques et défauts de pied) qui peut varier du simple au double. 	<ul style="list-style-type: none"> ● Températures plus élevées au four (+20C). ● Plus chère (main d'œuvre, réfractaire, métal perdu dans la mère et les canaux). ● Inclusions supplémentaires (attaques des réfractaires et emprisonnement des croûtes noyées, d'où davantage d'inclusions silicatées en pied). ● Soufflures (humidité des canaux, condensation sur les lingotières froides).

1.2. Les défauts et la macroségrégation sur les lingots industriels

La qualité en fonderie est un élément essentiel dans la coulée de lingots. Toute erreur sur ces pièces pouvant peser plusieurs dizaines de tonnes conduit à des pertes très importantes. En effet les dépenses de non-qualité, qui regroupent toutes les non-conformités de fabrication (moules cassés ou déformés, pièces non conformes, rebuts de pièces, masselottage ...), peuvent atteindre des pourcentages significatifs du chiffre d'affaire (jusqu'à 5 à 6%). La qualité est aussi une garantie de la satisfaction du client qui est essentielle dans ce secteur très concurrentiel. Il est donc très important de déterminer l'origine des défauts et de contrôler au maximum leur apparition et leur gravité.

1.2.1. Présentation des différents défauts

En dehors de leurs propriétés physiques (densité, résistance, dureté, ...) les alliages moulés présentent des propriétés de fonderie qu'il est important de connaître pour améliorer la qualité des produits fabriqués. Ces propriétés sont :

- la coulabilité : propriété à remplir complètement l'empreinte du moule

- la formation de la structure
- le retrait : différence de dimensions entre l’empreinte du moule et la pièce solidifiée
- les retassures : creux à la surface de la pièce ou cavités à l’intérieur de la pièce
- les ségrégations : hétérogénéité chimique entre différents points de la pièce
- les criques : ruptures ou déchirures du métal
- les soufflures : cavités ou trous résultant de la présence de bulles dans l’alliage pendant la solidification

Les cinq derniers points représentent des sources de défaut pour la pièce finale. Parmi eux, la ségrégation tient une place particulière du fait qu’elle se produit pour des raisons diverses qui conduisent à des types de ségrégations variés aussi bien en amplitude qu’en échelle. Ce type de défaut pouvant apparaître à trois ordres de grandeurs différents : aux échelles microscopiques, mésoscopiques et macroscopiques.

D’autre part, la ségrégation induit aussi des modifications très importantes des propriétés mécaniques et chimiques de l’alliage. Il est donc essentiel de contrôler ce phénomène. Il est cependant particulièrement complexe et il est difficile de prédire les effets de modifications des paramètres du process comme la hauteur de la masselotte, la forme du moule, etc. La simulation numérique permet alors d’étudier plus aisément et à moindre coût de tel changement de manière à optimiser le process. Toutefois les modèles actuels ne permettent pas de simuler l’ensemble des phénomènes se produisant au cours de la solidification et donc des choix doivent être faits pour se concentrer sur la simulation de certains aspects de la solidification. Nous verrons par la suite que dans cette étude nous nous limiterons à l’analyse de la solidification dendritique colonnaire.

1.2.2. Exemple d’un cas industriel : lingot O3t3

Pour illustrer le type de pièces étudiées, prenons l’exemple d’un lingot instrumenté de la société Aubert et Duval, et analysé par Hans *et al.* [HANS, 2002]. Une partie des capteurs installés sur la pièce est présentée sur la Figure 1-4.



Figure 1-4 : Détail de l’instrumentation du lingot O3t3 de Aubert et Duval [HANS, 2002]

Cette courte étude permet de montrer les limites du modèle que nous allons utiliser par la suite ainsi par exemple notre modélisation ne prendra pas en compte la microstructure et utilisera une valeur constante pour l'espaceur interdendritique alors que l'on observe des variations importantes de celui-ci comme le montre la Figure 1-5.

D'autre part, l'utilisation d'un modèle de macroségrégation, très similaire à celui présenté ici, dans le code de calcul volumes finis 2D SOLID, montre des similitudes mais aussi des écarts dans les courbes de ségrégation (Figure 1-6). En particulier l'effet de la zone équiaxe qui n'est pas simulée est très important dans la zone de ségrégation négative située au centre du lingot dans sa partie inférieure.

A travers cet exemple, nous pouvons identifier certains points importants. En premier lieu, la macroségrégation positive est largement concentrée dans la masselotte en haut de la pièce. Globalement la variation maximale de la concentration relative est de l'ordre de 35%. Avec une telle variation de concentration les propriétés du matériau sont fortement modifiées et la masselotte a donc pour but de concentrer ces fortes variations en dehors de la zone utile de la pièce. Cette portion sera en effet coupée et refondue pour être réutilisée par la suite. L'autre caractéristique importante est la variation de la concentration le long de l'axe de la pièce. Cette zone subit un enrichissement ou un appauvrissement selon que l'on considère la simulation ou l'expérience.

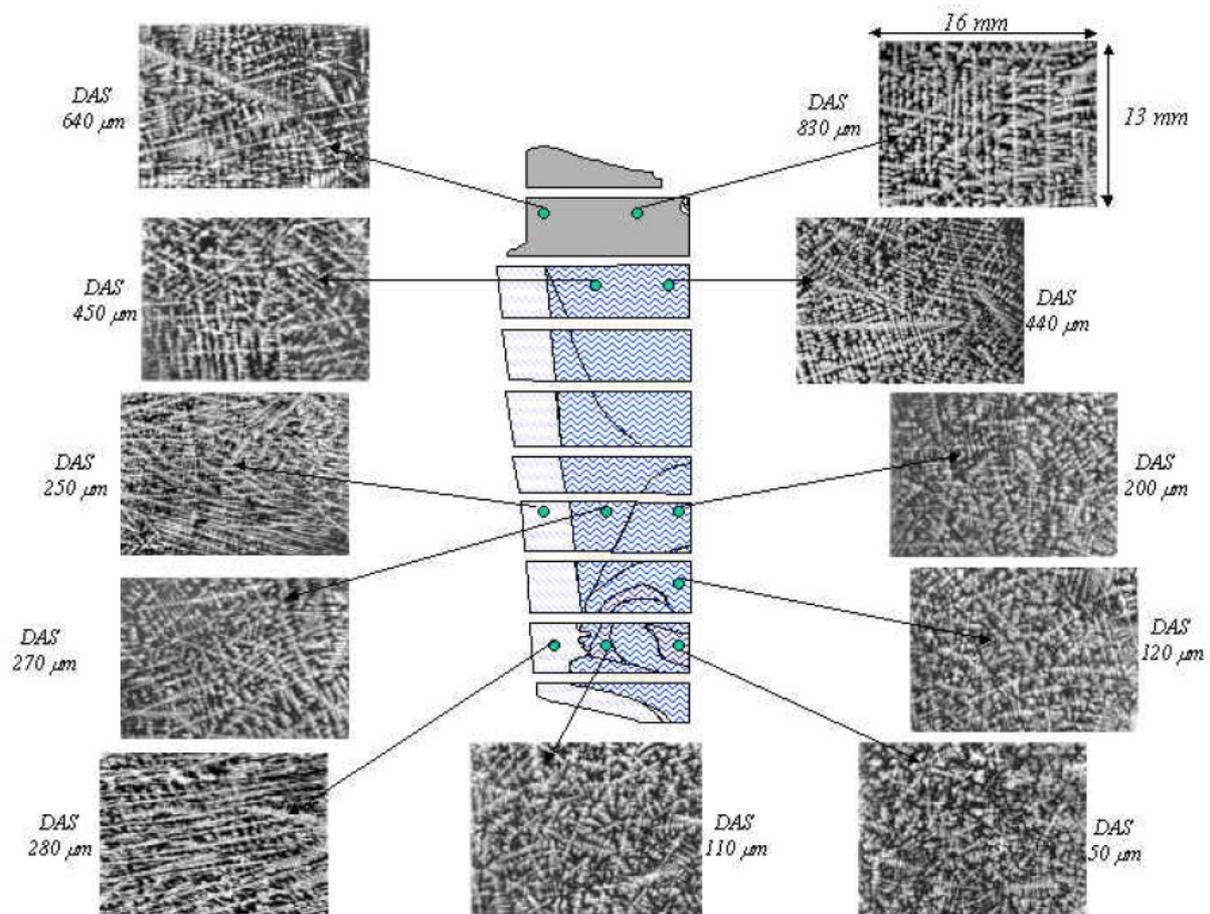


Figure 1-5 : Microstructure dans le lingot et espaceur interdendritique (zone blanche solidification colonnaire, zone bleue solidification équiaxe) [HANS, 2002]

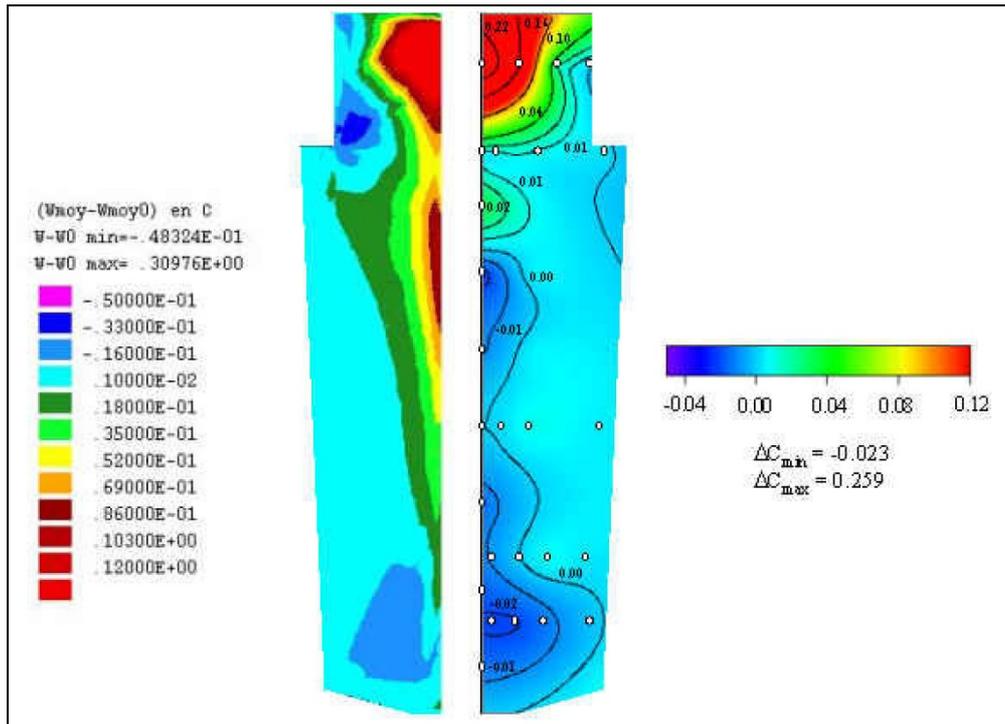


Figure 1-6 : Distribution de la macroségrégation en carbone pour le lingot O3t3 (à gauche SOLID, à droite résultats expérimentaux interpolés) [HANS, 2002]

L'aspect axisymétrique renforçant l'écoulement au centre le calcul sera donc assez sensible dans cette zone. En particulier en 3D où l'on simule en général des sections de la pièce, la représentation d'une zone angulaire comme celle-ci pourra poser des problèmes.

En conclusion, cet exemple de lingot instrumenté a permis de montrer la complexité du phénomène à partir de l'analyse des microstructures ce qui affecte de manière importante la macroségrégation. Ainsi notre modèle ne pourra sans doute pas reproduire les mesures expérimentales sur les lingots mais il a pour but d'être un outil de compréhension de la solidification et aussi d'analyse pour l'optimisation de certains paramètres. Cette étude n'est en effet qu'un premier pas vers une meilleure modélisation de la solidification et de la macroségrégation mais d'importantes étapes resteront encore à franchir.

L'intérêt d'un code de calcul 3D est aussi notable dans ce type de simulation puisque pour réaliser le calcul avec SOLID, il a été nécessaire de rendre la pièce octogonale axisymétrique ce qui conduit à certaines approximations.

Cet exemple d'étude de solidification d'un lingot industriel montre bien l'intérêt de la simulation pour les fondeurs. Ainsi le développement d'un outil de simulation permettant à terme de prédire à la fois les déformations mécaniques et aussi la macroségrégation est particulièrement pertinent dans le contexte de la fonderie de lingots massifs, ce qui constitue l'objectif principal de cette étude. Ce champ d'étude a d'ailleurs été largement abordé dans la littérature scientifique ces dernières années.

1.3. Simulation de la macroségrégation, état de la recherche

Pour finir l'introduction de la macroségrégation, nous allons faire un tour d'horizon des différents modèles qui sont utilisés et de quelques points clés de ce type de simulation. La bibliographie sur la solidification des métaux est très riche et beaucoup d'aspects ont été étudiés. Au cours de cette description générale nous essayerons de nous limiter aux aspects les plus importants pour la simulation de la macroségrégation.

1.3.1. Présentation de la solidification dendritique colonnaire d'un alliage binaire

Lors de la solidification d'un alliage, le changement de phase se produit dans un intervalle de température. Sur certaines isothermes, la phase solide et la phase liquide sont donc présentes à l'échelle macroscopique, cette nouvelle zone est appelée zone pâteuse du fait que ce milieu ne se comporte ni comme un solide ni comme un liquide.

Présentation de la zone pâteuse et formation de structure

Cette zone pâteuse est généralement représentée comme un milieu poreux car la complexité des structures qui s'y forment ne permet généralement pas une représentation directe. Cela est tout au moins le cas pour les alliages métalliques qui en général forment des structures dendritiques. A partir de germes à la paroi, on voit alors croître des formations dendritiques à la forme très complexes avec des bras secondaires et tertiaires. La Figure 1-7 illustre ce type structure. On appelle ces formations de la solidification dendritique colonnaire du fait que la croissance globale des dendrites est quasiment unidirectionnelle par opposition aux grains équiaxes qui ont plusieurs directions de croissance (cf. Figure 1-7). Généralement les deux types de solidification existent simultanément mais pour des raisons de simplicité ce projet ne traite que de la croissance colonnaire.

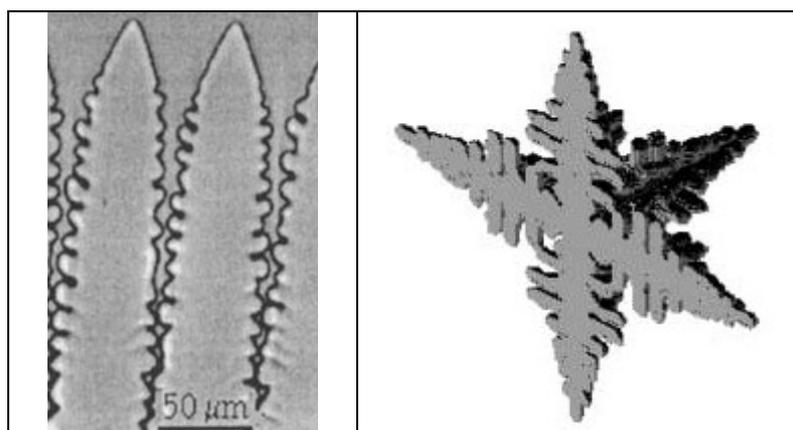


Figure 1-7 : Illustration de croissance de dendrite colonnaire (à gauche [AKAMATSU, 1995]) et équiaxe (à droite, résultat de simulation [BROWN, 2002])

Etant donné la forme de ces dendrites, l'écoulement à travers une telle structure est nécessairement difficile à simuler directement. L'approximation par un milieu poreux permet

de séparer l'aspect microscopique et macroscopique par l'ajout d'un terme de Darcy dans les équations de conservation de la quantité de mouvement. La valeur de la perméabilité ainsi introduite peut être déterminée suivant plusieurs modèles comme nous le verrons par la suite. Cependant on peut déjà remarquer que sa valeur diminue très rapidement avec la fraction de liquide à mesure que la solidification bloque l'écoulement qui devient de plus en plus tortueux et est donc fortement freiné. Cette structure conduit donc à un écoulement qui ne sera effectif que dans les premières épaisseurs de la zone pâteuse. D'autre part, cette structure permet aussi une grande surface de contact entre le liquide et le solide.

Solidification et ségrégation

L'interface entre les deux phases est supposée à l'équilibre thermodynamique et on utilise donc le diagramme de phase pour prédire les proportions de phase et les concentrations correspondantes. Deux approches sont employées la première consiste à linéariser les courbes pour simplifier le problème et permettre un calcul aisé des variables, la deuxième introduit généralement une base de données externes qui permet de déduire directement les valeurs. Cependant cette méthode nécessite des bases de données coûteuses mais elle est plus précise et permet aussi d'étudier directement les alliages multi-constitués. Notre étude étant centrée sur les alliages binaires, nous avons choisi la méthode la plus simple et la plus directe par les diagrammes de phase linéarisés. L'exemple présenté à la Figure 1-8 donne une première compréhension de la ségrégation qui se produit lors de la solidification. En effet on voit qu'à une température donnée un alliage à la composition initiale c voit se former un solide de composition c_s , très inférieur à c alors que la concentration dans le liquide augmente par le rejet du soluté. Ainsi à l'interface se forme une ségrégation du soluté entre la phase liquide et la phase solide. Ce phénomène qui se produit à l'échelle microscopique à la surface de la dendrite va conduire à la macroségrégation à l'échelle du lingot. Ce changement d'échelle est principalement du dans le cas des lingots à l'entraînement par le fluide de ce surplus de soluté dans le reste du domaine. En effet un écoulement important se forme dans le lingot lors de la solidification. La ségrégation peut aussi être produite par d'autres phénomènes comme une déformation mécanique, le mouvement des grains, ...

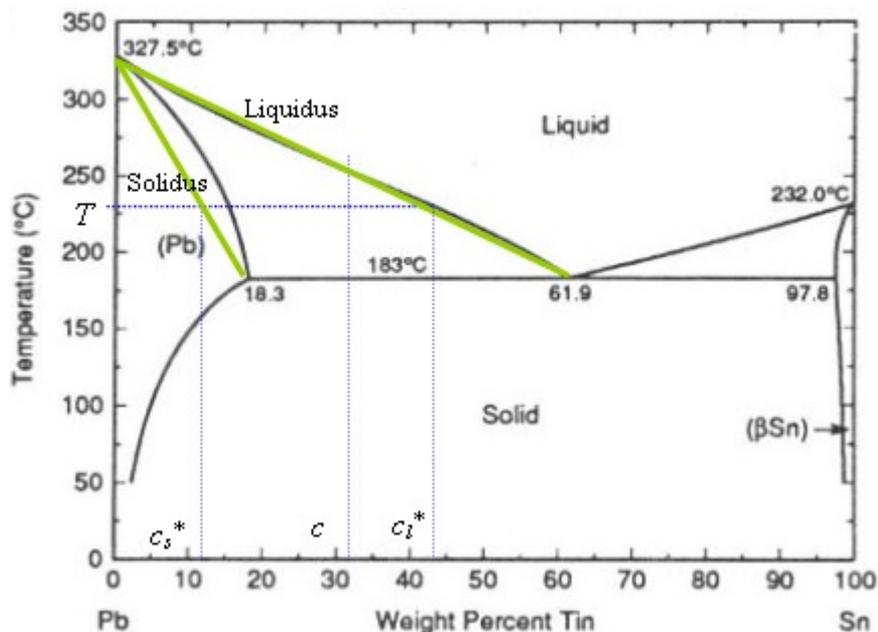


Figure 1-8 : Diagramme de phase de l'alliage plomb - étain (linéarisation en vert)

Convection thermo-solutale

La formation de cet écoulement est produite par deux forces différentes. La première est due au refroidissement qui engendre des gradients thermiques dans la phase liquide générant de la convection naturelle car la densité augmente lorsque la température diminue. La deuxième force est produite par la ségrégation. En effet la densité du soluté est différente de la densité de la base de l'alliage. Les zones enrichies seront donc soit plus denses soit moins denses. Cet effet est principalement sensible dans la zone où les gradients thermiques sont faibles par rapport aux gradients solutaux. La Figure 1-9 montre ainsi l'inversion de l'écoulement qui peut se produire suivant la densité du soluté. Ainsi la résolution de la macroségrégation impose un couplage avec la résolution de la mécanique.

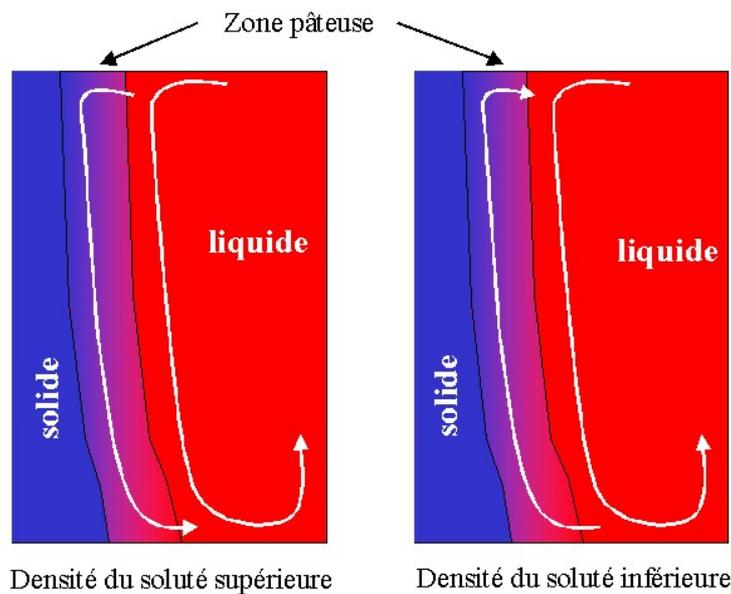


Figure 1-9 : Ecoulement thermo-solutal durant la solidification, effet de la densité du soluté

1.3.2. Les modèles macroscopiques

La modélisation de la solidification s'effectue principalement à l'échelle macroscopique, au moins pour avoir une idée générale du processus. Les premières études se sont naturellement portées sur la solidification des substances pures avec une interface plane. Le traitement dans les zones liquide et solide peut alors être différencié et la résolution se faisait dans chacun des milieux avec un couplage à l'interface [JURIC, 1996]. Au cours du calcul, il est donc nécessaire de connaître précisément la position et la forme de l'interface. Lorsque l'on est ensuite passé aux alliages binaires en particulier au cas de solidification dendritique, il est devenu irréaliste de chercher à connaître constamment la forme et la position de l'interface à l'échelle macroscopique, qui est extrêmement complexe. C'est pourquoi des modèles macroscopiques s'appliquant à l'ensemble du domaine ont commencé à être développés en particulier par Bennon et Incropera [BENNON, 1987] ou Voller *et al.* [VOLLER, 1989]. Ce type de modèle est devenu le standard de la modélisation de la solidification, il est scindé en deux branches, d'une part le modèle continuum initialement développé par Bennon et Incropera, basé sur les lois de mélange et d'autre part le modèle moyenné développé par Ni et Beckermann [NI, 1991], basé sur la technique des prises de

moyenne volumique. Ces deux méthodes vont être présentées ainsi que les hypothèses couramment utilisées.

Modèle basé sur la loi de mélange

Les équations sont établies à partir des principes suivants de la théorie des mélanges :

- les composants du mélange peuvent être vus comme des sous-systèmes, si les interactions sont traitées correctement.
- toutes les propriétés du mélange sont des conséquences mathématiques des propriétés de ses composants.
- le mélange est gouverné par des équations similaires à celles gouvernant les composants individuellement.

Ces principes supposent une substance inerte ce qui n'est pas le cas dans les changements de phase, il est donc nécessaire de traiter spécifiquement ce cas ce qui conduit à ajouter des relations supplémentaires. Dans leurs premiers articles Bennon et Incropera ont introduit des termes de manière plus intuitive que rigoureuse ce qui les a conduit par la suite à devoir préciser certains points dans un article [PRESCOTT, 1991]. C'est un des principaux reproches qui a été fait à cette méthode, l'autre étant qu'elle conduit à une modélisation moins précise de certains termes qu'elle découple des phénomènes microscopiques. Toutefois cette méthode a donné de bons résultats lors de simulations par différents auteurs dont on pourra trouver des exemples dans [PRESCOTT, 1996].

Les équations développées par la suite sont basées sur les hypothèses suivantes :

- La zone pâteuse est cohérente et forme donc une structure rigide continue et indéformable, la vitesse du solide est nulle.
- Les phases liquide et solide sont à l'équilibre thermique localement.
- La diffusion macroscopique dans la phase solide est nulle.
- Le liquide est supposé newtonien.
- Le terme de Darcy est prépondérant dans la zone pâteuse.

Les équations de conservation ont la forme suivante ont la forme suivante :

Conservation de la masse :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = 0 \quad (1.3.1)$$

où les variables (vitesse ou densité, ...) sont des variables du mélange.

Conservation de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{V}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} \otimes \mathbf{V}) = \nabla \cdot \left(\mu_l \frac{\rho}{\rho_l} \nabla \mathbf{V} \right) - \frac{\mu_l}{K} \frac{\rho}{\rho_l} \mathbf{V} - \nabla P + \rho_l B_l \quad (1.3.2)$$

où B_l regroupe les forces volumiques agissant sur le liquide.

Conservation de l'énergie :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho h) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} h) = \nabla \cdot \left(\frac{\kappa_s}{c_{ps}} \nabla h \right) + \nabla \cdot \left(\frac{\kappa_s}{c_{ps}} \nabla (h_s - h) \right) - \nabla \cdot [\rho f_s (h_l - h_s) \mathbf{V}] \quad (1.3.3)$$

Conservation de la masse de soluté :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} c) = \nabla \cdot (\rho D \nabla c) + \nabla \cdot (\rho D \nabla (c_l - c)) - \nabla \cdot (\rho (c_l - c) \mathbf{V}) \quad (1.3.4)$$

Les variables apparaissant dans les équations précédentes sont des variables de mélange, moyenne pondérée par la fraction volumique de chacune des phases des valeurs dans les phases liquide et solide.

Remarque : la signification de l'ensemble des variables utilisées dans ce manuscrit est précisée dans la nomenclature, parfois leur sens sera réprécisé aussi dans le texte.

L'intérêt de ces équations est qu'elles sont valables quelle que soit la valeur de la fraction de solide ce qui permet une modélisation de tout le domaine. Ces équations nécessitent aussi des relations supplémentaires pour résoudre ce système. Il s'agit entre autre du diagramme de phase pour lequel on considère en général une approximation linéaire des courbes de solidus et liquidus. On choisit aussi un des modèles de macroségrégation qui sont décrits par la suite.

Par la suite Ni et Incropera ([NI, 1995a], [NI, 1995b]) ont étendu les capacités de ce modèle, en particulier en ajoutant la prise en compte de la surfusion solutale, de la contraction ou du mouvement du solide. En conclusion, ce modèle a montré une bonne capacité de prédiction et une simplicité de programmation qui en ont fait un modèle largement utilisé.

Modèle basé sur la prise de moyenne volumique

Présentation générale de la théorie de prise de moyenne volumique

Dans la méthode de prise de moyenne volumique, on considère un volume élémentaire représentatif (VER) sur lequel on va déterminer la valeur moyenne de chaque variable de manière à s'affranchir en partie des variations locales à plus petite échelle. La Figure 1-10 illustre ainsi un VER dans le cas de la solidification dendritique colonnaire où l'on distingue les deux phases β et σ . On peut déjà identifier plusieurs échelles de taille, la première est l'échelle macroscopique L, la seconde l'échelle du VER r_0 et la dernière l'échelle de la dendrite l_β .

Soit ψ^β une grandeur physique définie sur la phase β . Sa moyenne $\langle \psi^\beta \rangle$ définie sur le VER est donnée par :

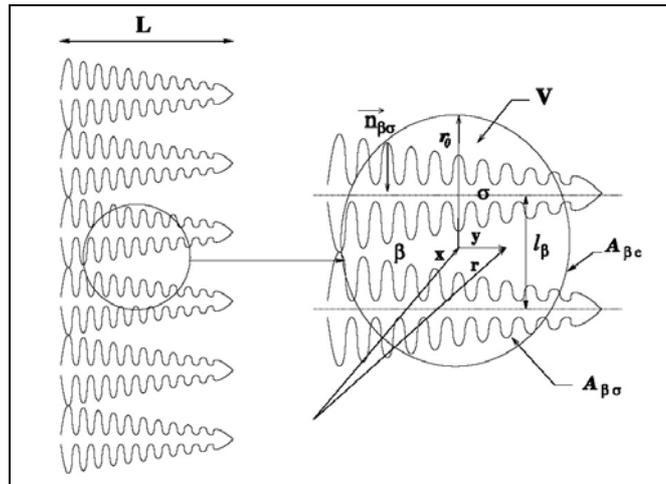
$$\langle \psi^\beta \rangle_x = \frac{1}{V} \int_V \psi^\beta(x+y) \cdot \gamma_\beta(x+y) dV \quad (1.3.5)$$

où γ_β est la fonction de phase définie par $\gamma_\beta = \begin{cases} 1 & \text{dans la phase } \beta \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$ et V est le volume du VER

On définit également une moyenne dite moyenne intrinsèque de phase, notée $\langle \psi^\beta \rangle^\beta$:

$$\langle \psi^\beta \rangle^\beta = \frac{1}{V_\beta} \int_{V_\beta} \psi^\beta dV \quad (1.3.6)$$

où V_β est le volume occupé par la phase β à l'intérieur du volume V : $V_\beta = \int_V \gamma_\beta dV$



**Figure 1-10 : Zone pâteuse dendritique à l'échelle macroscopique et VER associé
[BOUSQUET-MELOU, 2002]**

Par la décomposition de Gray, on peut d'autre part décomposer ψ_β en deux parties :

$$\psi_\beta = \gamma_\beta \left(\langle \psi_\beta \rangle^\beta + \tilde{\psi}_\beta \right) \quad (1.3.7)$$

ce qui signifie que dans la phase β , la valeur de ψ est la somme de la moyenne intrinsèque de ψ sur la phase et d'une fluctuation locale de cette variable ψ dans la même phase : $\tilde{\psi}_\beta$ est cette fluctuation par rapport à la moyenne intrinsèque.

On utilise aussi les théorèmes de dérivation spatiale et temporelle de la moyenne volumique :

$$\begin{aligned} \langle \nabla \psi_\beta \rangle &= \nabla \langle \psi_\beta \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} n_{\beta\sigma} \psi_\beta dA \\ \left\langle \frac{\partial \psi_\beta}{\partial t} \right\rangle &= \frac{\partial \langle \psi_\beta \rangle}{\partial t} - \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} n_{\beta\sigma} \cdot w_{\beta\sigma} \psi_\beta dA \end{aligned} \quad (1.3.8)$$

où $n_{\beta\sigma}$ est la normale sortante du domaine β et $w_{\beta\sigma}$ la vitesse de l'interface entre les milieux β et σ comme illustré sur la Figure 1-10.

Formulation moyennée des équations

L'hypothèse de base de cette formulation est le rapport d'échelle suivant : $l_\beta \ll r_0 \ll L$. Cette hypothèse va donner lieu à plusieurs simplifications, nous verrons dans la suite comment cette hypothèse peut être relaxée.

Ni et Beckermann [NI, 1991] ont appliqué la méthode de prise de moyenne pour obtenir les équations de conservation, parallèlement Ganesan et Poirier [GANESAN, 1990] ont décrit la même stratégie.

Les hypothèses suivantes sont utilisées pour l'obtention des équations :

- La zone pâteuse est cohérente et forme donc une structure rigide continue et indéformable, la vitesse du solide est nulle.

- La température est uniforme dans le VER
- La densité microscopique est uniforme dans le VER
- La quantité de mouvement induite par le changement de volume est négligeable
- Les termes de dispersion sont négligeables
- Le liquide est newtonien
- La relation de Darcy est applicable
- On se limite au terme de deuxième ordre dans la décomposition de la fonction de tortuosité pour exprimer la perméabilité, que l'on suppose isotrope
- Le milieu est saturé : $g_s + g_l = 1$

Dans les relations qui suivent nous utiliserons la notation simplifiée des variables telle que $\psi_\beta = \langle \psi_\beta \rangle^\beta$ ainsi par exemple $\rho_l = \langle \rho_l \rangle^l$.

Conservation de la masse :

$$\frac{\partial}{\partial t} (g_s \rho_s + g_l \rho_l) + \nabla \cdot (g_l \rho_l \langle \mathbf{V}_l \rangle^l) = 0 \quad (1.3.9)$$

Conservation de la quantité de mouvement :

$$g_l \rho_l \left[\frac{\partial \langle \mathbf{V}_l \rangle^l}{\partial t} + \langle \mathbf{V}_l \rangle^l \cdot \nabla \langle \mathbf{V}_l \rangle^l \right] = -g_l \nabla \langle P_l \rangle^l + g_l \rho_l \mathbf{g} + \mu \nabla^2 (g_l \langle \mathbf{V}_l \rangle^l) - \mu \frac{g_l^2}{K} \langle \mathbf{V}_l \rangle^l \quad (1.3.10)$$

Conservation de l'énergie :

$$\frac{\partial}{\partial t} (g_l \rho_l \langle h_l \rangle^l + g_s \rho_s \langle h_s \rangle^s) + \nabla \cdot (g_l \rho_l \langle \mathbf{V}_l \rangle^l \langle h_l \rangle^l) = \nabla \cdot ((g_l \kappa_l + g_s \kappa_s) \nabla T) \quad (1.3.11)$$

Conservation de la masse de soluté :

$$\frac{\partial}{\partial t} (g_l \rho_l \langle c_l \rangle^l + g_s \rho_s \langle c_s \rangle^s) + \nabla \cdot (g_l \rho_l \langle \mathbf{V}_l \rangle^l \langle c_l \rangle^l) = \nabla \cdot (D_l g_l \rho_l \nabla \langle c_l \rangle^l) + \nabla \cdot (D_s g_s \rho_s \nabla \langle c_s \rangle^s) \quad (1.3.12)$$

En complément de ces équations, on utilise, de même que pour le modèle précédent, des relations supplémentaires pour la perméabilité, la microségrégation, etc.

Discussion sur les problèmes de prise de moyenne

Les équations présentées précédemment prennent en compte des approximations qui se font au cours de la prise de moyenne des équations, en effet des termes supplémentaires apparaissent et par des comparaisons d'ordre de grandeur, ils sont jugés négligeables. Nous allons maintenant voir plus précisément cette méthode en nous basant sur les articles [WHITAKER, 1986], [GOYEAU, 1997] et [BOUSQUET-MELOU, 2002].

Le milieu poreux est généralement considéré comme étant homogène, isotrope et stationnaire. Or dans le cas de la solidification, il convient de prendre en compte le fait que la structure dendritique ne remplit aucun de ces trois critères ce qui influe sur le processus de prise de moyenne. En effet [WHITAKER, 1986] montre que l'application de la loi de Darcy sur un milieu hétérogène conduit à l'apparition de nouveaux termes dépendant du gradient de g_s . D'autre part Goyeau *et al.* [GOYEAU, 1997] montrent, à partir d'une approximation d'une

structure dendritique, que l'évaluation de la perméabilité varie en fonction de la taille du volume de contrôle, surtout lorsque l'hétérogénéité est importante. Ils arrivent ainsi à l'estimation suivante pour les échelles de grandeur : $r_0 \cong 3 \cdot l_\beta$ et $L \cong 48 \cdot l_\beta \tau^{-1}$, où τ est le taux d'hétérogénéité.

Pour illustrer ce propos, prenons l'exemple de la prise de moyenne des équations de Stokes pour laquelle, on arrive à :

$$-\nabla \langle P_\beta \rangle + \varepsilon_\beta \rho_\beta g + \mu_\beta \nabla^2 \langle V_\beta \rangle + \frac{1}{V} \int_{V_\beta} n_{\beta\sigma} \cdot (-I \cdot P_\beta + \mu_\beta \nabla V_\beta \delta_{\beta\sigma}) dV = 0 \quad (1.3.13)$$

où $\delta_{\beta\sigma}$ est la distribution correspondant à l'interface $A_{\beta\sigma}$.

Dans l'équation précédente, le terme de pression est décomposé avec le théorème de Gray, seulement cela conduit à intégrer une valeur moyenne qui varie en chaque point de l'intégrale. Pour obtenir une évaluation de cette valeur moyenne, on utilise une décomposition en série de Taylor :

$$\langle P_\beta \rangle^\beta \Big|_{r=x+y} = \langle P_\beta \rangle^\beta \Big|_x + (r-x) \cdot \nabla \langle P_\beta \rangle^\beta \Big|_x + \dots \quad (1.3.14)$$

Goyeau *et al.* effectuent ensuite une étude numérique sur une forme analogue à une dendrite simplifiée pour montrer que ces termes sont généralement négligeables.

Cet exemple montre à quel point il est difficile d'appliquer de manière rigoureuse la théorie de prise de moyenne volumique dans le cas d'une structure aussi complexe que les dendrites.

En conclusion, d'après [BECKERMANN, 2002], les avantages clés de la procédure de prise de moyenne volumique sont les suivants :

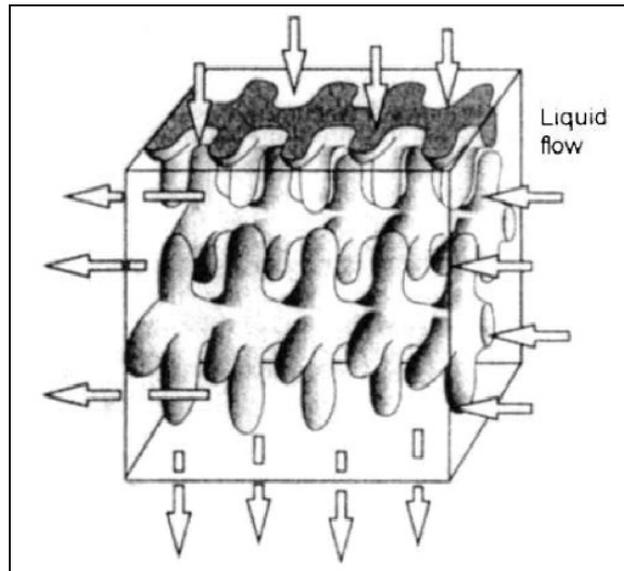
- Les variables macroscopiques sont définies de manière exacte à partir des profils microscopiques
- L'origine de chacun des termes est claire et apparaît naturellement au cours du procédé de prise de moyenne. La prise en compte de certains phénomènes est ainsi facilitée
- Les équations moyennées contiennent directement des paramètres microscopiques
- Les problèmes de fermeture locale peuvent être abordés à partir des variables fluctuantes des volumes de contrôle que l'on peut ensuite résoudre séparément.

1.3.3. Les paramètres des modèles

Dans les équations macroscopiques de nombreux paramètres interviennent dont on ne connaît pas les valeurs car ils sont dépendants de la structure de solidification à l'échelle microscopique. Généralement des hypothèses simplificatrices sont utilisées pour déterminer ces valeurs, on considère par exemple la conductivité thermique égale dans les deux phases dans l'intervalle de solidification. Toutefois pour d'autres paramètres il est important de faire intervenir les phénomènes microscopiques. Nous allons, dans cette partie, illustrer cela par l'étude de la perméabilité et de la macroségrégation, l'objectif étant de déterminer ces valeurs microscopiques à partir des valeurs macroscopiques connues.

Détermination de la perméabilité K

Différents modèles et relations vont être présentés, ils permettent de calculer la perméabilité intervenant dans les équations de quantité de mouvement macroscopiques. Le milieu est considéré comme un milieu poreux saturé de liquide comme illustré sur la Figure 1-11.



**Figure 1-11 : Schéma d'écoulement du liquide à travers la structure dendritique
[FLEMINGS, 1974]**

Les modèles présentés sont les suivants :

- Modèle classique Kozeny-Carman : environ 1960
- Modèle de West : 1985
- Corrélations tirées d'expériences, Poirier : 1987
- Modèle de Xu, corrélation des expériences de Piwonka-Flemings : 1989
- Modèle de Oldenburg : 1992
- Modèle Bhat-Poirier-Heinrich, simulation numérique à partir de données expérimentales : 1995

Plusieurs de ces modèles sont présentés dans un document récapitulatif décrivant l'état des lieux de la recherche rédigé par Prescott et al. [PRESCOTT, 1996]. Si aucune référence particulière n'est indiquée dans la suite de cette section, il faut se reporter à cette publication.

Modèle de Kozeny-Carman

Kozeny et Carman posent la formule suivante pour la perméabilité $K = \frac{(1 - g_s)^3}{kS_0^2 g_s^2}$.

Cette formulation est basée sur un écoulement capillaire où la distribution du liquide est uniforme. L'écoulement se fait à travers une structure régulière de canaux. Les canaux ont la même section et sont uniformes, k ne variant pas avec g_s . Généralement on prend $k=5$ et S_0 indépendant de g_s avec S_0^2 égal à $4 \cdot 10^9 \text{ m}^2$.

Ce modèle n'est a priori pas valide pour les structures dendritiques car l'expérience montre que k décroît continûment lorsque la fraction de solide augmente. De plus il est à noter que la valeur de S_0 peut aussi dépendre de la tortuosité de la structure ainsi que de l'espacement interdendritique qui varient au cours de la solidification ce qui conduit alors à une modification de la formule :

$$K = \frac{(1 - g_s)^3 \lambda_2^2}{\pi^2 k \tau^2 g_s^2} \quad (1.3.15)$$

où λ_2 est l'espace interdendritique secondaire et τ la tortuosité.

Généralement on remplace les valeurs de k et de τ par des valeurs standards : $k=5$ et

$$\tau=1,91. \text{ On obtient alors la formule simplifiée : } K = \frac{(1-g_s)^3 \lambda_2^2}{180 g_s^2}$$

Enfin au cours de la solidification des poches de liquide apparaissent et étant isolées du fluide elles ne doivent pas être prises en compte pour le calcul de la perméabilité. Toutefois ce modèle très simple est souvent utilisé et fournit une bonne première approximation.

Modèle de West

Mais a priori la relation de Kozeny-Carman n'est plus valable pour les faibles fractions solides car alors le fluide ne s'écoule pas à travers une structure de canaux mais plutôt à travers des pointes de dendrites. West a donc développé une formulation par morceaux :

$$K = K_1 f_1(g_l) + K_2 f_2(g_l) \quad \text{avec} \quad f_1(g_l) = g_l^2 \quad \text{et} \quad f_2 = 0 \quad \text{pour} \quad g_l < 0,3 \quad \text{et}$$

sinon $f_2(g_l) = (1-g_l)^{2/3} \left[3 + \frac{4}{1-g_l} - 3 \sqrt{\frac{8}{1-g_l} - 3} \right]$. Les constantes $K_1 = 6,4 \cdot 10^{-13}$ et $K_2 = 8,8 \cdot 10^{-11}$ étant fixées à partir des expériences de Piwonka-Flemings [PIWONKA, 1966].

Modèle de Xu

Xu [XU, 1991b] propose aussi un modèle pour la perméabilité à partir des résultats expérimentaux de Piwonka-Flemings [PIWONKA, 1966].

$$K = 2,6 \cdot 10^{-5} \left[1,923 \cdot 10^{-2} g_l^2 + \frac{4 + 3g_s - 3\sqrt{g_s(8-3g_s)}}{g_s} \right] \quad \text{pour} \quad g_l \geq \frac{1}{3} \quad (1.3.16)$$

$$K = 5,0 \cdot 10^{-7} g_l^2 \quad \text{pour} \quad g_l < \frac{1}{3}$$

On peut noter une certaine similitude avec la relation de West même s'il existe des écarts entre les résultats des deux modèles.

Relations de Poirier

Poirier [POIRIER, 1987] a réalisé des expériences avec un alliage Pb-Sn, dont il a regroupé les résultats avec ceux d'autres études sur l'alliage Pb-Sn et du borneol-paraffine. Il en a déduit les relations suivantes pour la perméabilité à faible fraction de liquide. Pour les fractions liquides plus élevées, les formules proviennent de [FELICELLI, 1991] et correspondent à des solutions analytiques d'écoulement à travers un réseau de cylindres.

Parallèlement au bras principal de la dendrite

$$K_{\xi\xi} = \begin{cases} \left(4,53 \cdot 10^{-4} + 4,02 \cdot 10^{-6} (g_l + 0,1)^{-5} \right) \frac{\lambda_1^2 g_l^3}{1-g_l} & \text{pour } g_l < 0,7 \\ 0,07425 \lambda_1^2 \left(-\ln(1-g_l) - 1,476 + 2(1-g_l) - 0,5(1-g_l)^2 \right) & \text{pour } g_l \geq 0,7 \end{cases} \quad (1.3.17)$$

où λ_1 est l'espace interdendritique primaire

Perpendiculairement au bras principal de la dendrite

$$K_{\eta\eta} = \begin{cases} \left(1,73 \cdot 10^{-3} \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right)^{1,09} \right) \frac{\lambda_1^2 g_l^3}{1 - g_l^{0,749}} & g_l < 0,7 \\ 0,03979 \lambda_1^2 \left(-\ln(1 - g_l) - 1,476 + 2(1 - g_l) - 1,774(1 - g_l)^2 + 4,076(1 - g_l)^3 \right) & g_l \geq 0,7 \end{cases} \quad (1.3.18)$$

Relations proposées par Oldenburg-Spera

Une approche similaire proposée par Oldenburg et Spera [OLDENBURG, 1992] consiste à diviser le comportement du fluide en deux parties. En effet à partir d'une étude dimensionnelle, ces auteurs remarquent que l'écoulement est contrôlé par le gradient thermique ou thermo-solutal qui s'oppose dans la partie liquide à la viscosité et à la perméabilité pour les fractions de solide élevées. Ils présentent donc une relation qui bascule pour une valeur critique de la fraction de solide et ils combinent donc ainsi un modèle de viscosité augmentée avec la loi de Kozeny-Carman.

$$\begin{aligned} \mu_l &= \mu_l^0 \left(\frac{A_\mu}{A_\mu - F g_s} \right)^2 \\ K &= G K_0 \frac{(1 - g_s)^3}{g_s^2} \end{aligned} \quad (1.3.19)$$

$$\text{avec } A_\mu = 0,5, g_s^{\text{crit}} = 0,5 \text{ et } \begin{cases} F = 0,5 - \frac{1}{\pi} \arctan(100(g_s - g_s^{\text{crit}})) \\ G = \left[0,5 + \frac{1}{\pi} \arctan(100(g_s - g_s^{\text{crit}})) \right]^{-4} \end{cases}$$

La valeur de g_s^{crit} est cependant un paramètre qui dépend sans doute de l'alliage considéré et du type de solidification. Il apparaît donc nécessaire de fixer les valeurs des paramètres à partir des données de l'alliage que l'on souhaite étudier.

Relations de Bhat-Poirier-Heinrich

Cette approche est assez différente des précédentes puisqu'elle comprend plusieurs étapes mêlant la simulation numérique et des expériences. Lors de la réalisation de l'expérience des images sont prises pour différentes valeurs de la fraction de solide, à des valeurs faibles pour lesquelles il y a peu de mesures. Ces images sont ensuite numérisées et la structure dendritique ainsi obtenue est maillée. A partir de ce maillage, on effectue une simulation de l'écoulement à travers cette structure et on en déduit donc une valeur de la perméabilité.

Bhat-Poirier-Heinrich [BHAT, 1995] obtiennent ainsi les relations suivantes :

$$\begin{aligned} K S_v^2 &= -0,2395 + 1,3607 \omega + 0,5327 \omega^2 - 0,04959 \omega^3 + 0,001108 \omega^4 \\ \omega &= \frac{1}{g_s} \left[1 - \left[\frac{4 g_s}{\pi} \right]^{1/2} \right]^{5/2} \end{aligned} \quad (1.3.20)$$

où S_v , la surface de l'interface liquide/solide par unité de volume, est déterminé par analyse d'images mais peut être reliée à l'espacement interdendritique

Cette relation est valide pour $0,7 < g_l < 0,98$ et perpendiculairement au bras dendritique primaire.

Remarques sur les modèles de perméabilité

Etant donné la difficulté expérimentale de mesure des perméabilités d'un milieu en cours de solidification, le recalage des modèles est très difficile et des écarts importants subsistent. On peut ainsi voir sur la Figure 1-12 que les modèles divergent fortement en particulier pour les faibles fractions solides. Le modèle de Oldenburg est très éloigné des autres mais il faut tenir compte du fait que dans ce modèle la viscosité est modifiée et que donc on ne peut pas le comparer directement. Sinon l'ensemble des courbes se situe dans une même zone et globalement prédisent la même évolution. Il est donc difficile de sélectionner une loi en particulier étant donné que les résultats dépendent des paramètres que l'on doit introduire et qui peuvent être impossible à obtenir lors de certaines simulations. Ainsi si l'on considère un calcul dans lequel le modèle ne prédit pas la taille de l'espacement interdendritique primaire, certains modèles doivent être écartés. Généralement, les modèles les plus simples sont donc utilisés.

Une alternative aux mesures expérimentales est la simulation directe de l'évolution de la structure dendritique et le calcul numérique de l'écoulement à travers cette structure. Cette méthode diffère de celle de Bhat-Poirier-Heinrich, car alors les résultats expérimentaux n'interviennent pas et la structure dendritique est alors simulée directement par une méthode de champ de phase par exemple (pour plus de détail sur la méthode de champ de phase se reporter à [BOETTINGER, 2002]). Cette méthode semble très prometteuse et permettrait de s'affranchir de toutes les difficultés expérimentales empêchant une mesure précise de la perméabilité ou du coefficient de transfert thermique.

Devant la variabilité des modèles et la difficulté de les calibrer, nous avons donc choisi de privilégier la formulation de Kozeny –Carman faisant intervenir comme paramètres extérieurs l'espacement interdendritique secondaire et la tortuosité du milieu poreux. De plus ces informations devront être fournies par l'utilisateur et elles n'évolueront pas au cours du calcul. Ces conditions sont assez restrictives mais cela permet à notre formulation de rester simple en laissant la possibilité d'introduire plus tard un modèle plus complexe.

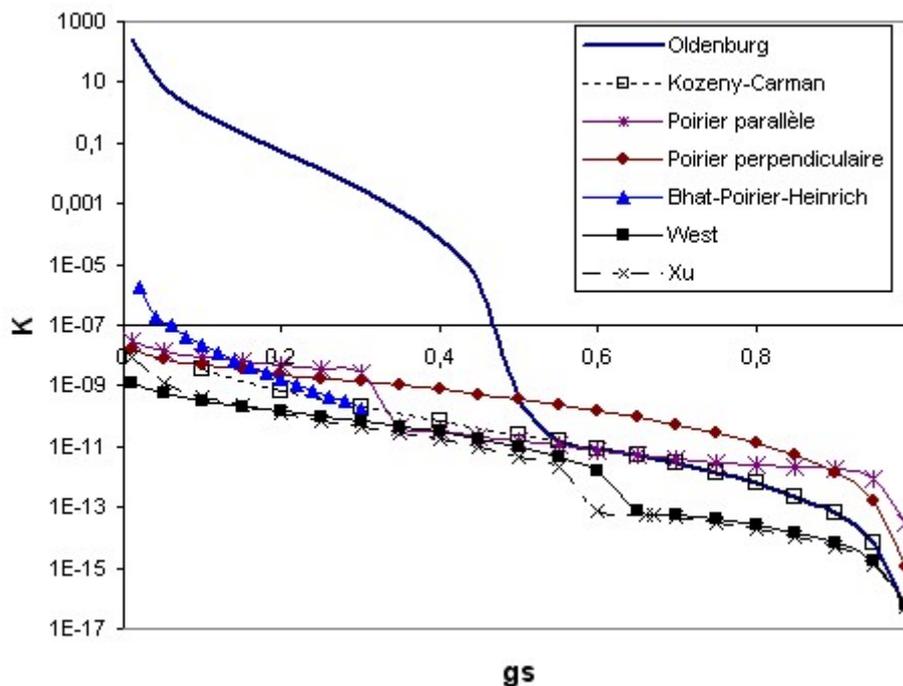


Figure 1-12 : Comparaison des modèles de perméabilité

Modèles de microségrégation

Les équations macroscopiques présentées dans la première partie nous permettent d'obtenir en général les valeurs de l'enthalpie (ou de la température) et de la concentration moyenne. Le modèle de microségrégation permet alors d'obtenir à partir de ces résultats les valeurs de la température, de la fraction de solide et des concentrations moyennes intrinsèques dans le liquide et dans le solide. Dans cette partie, nous n'allons présenter que les modèles les plus simples qui peuvent donc être introduits facilement dans un code de macroségrégation. Nous verrons dans une autre partie comment la résolution de ces relations peut se faire dans un code de calcul.

Plus généralement, un modèle de microségrégation doit contenir les points suivants :

- Choix des hypothèses comme l'équilibre thermique
- Modèle pour l'évolution de la concentration
- Modèle pour le coefficient de partage
- Expression des longueurs de diffusion
- Détermination des espacements interdendritiques
- Détermination des surfaces de contact
- Modèle pour la croissance d'une dendrite

Toutefois les principaux schémas utilisent des relations simplifiées qui permettent de ne pas avoir à déterminer l'ensemble de ces paramètres. La première approximation de ces modèles est de considérer une morphologie localement plane pour l'interface solide/liquide au niveau de la dendrite. Une autre hypothèse consiste à considérer que la température est uniforme au niveau microscopique et égale à la température du liquidus pour la concentration c_l^* . Dans les modèles suivants on considère donc le problème décrit sur la figure 7 où l'on cherche à déterminer une approximation de la courbe de concentration dans la phase liquide et dans la phase solide. L'exposant * correspondant aux valeurs à l'interface et la largeur de notre zone d'étude étant de l'ordre de la moitié de l'espacement interdendritique secondaire.

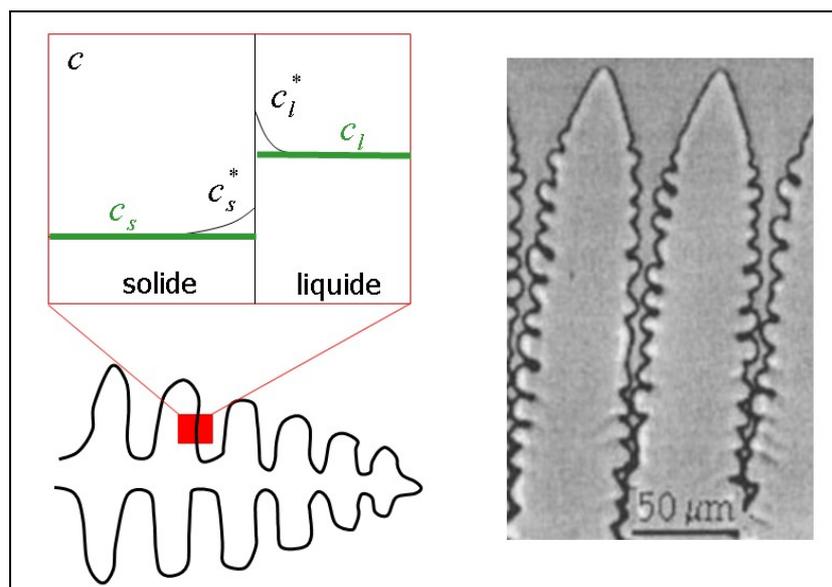


Figure 1-13 : Illustration de l'élément représentatif à l'échelle microscopique, courbes de variation de la concentration et image d'une dendrite [AKAMATSU, 1995]

Modèle de loi de levier

Dans ce modèle on suppose qu'il y a diffusion complète aussi bien dans le liquide que dans le solide, ce qui correspond à un état d'équilibre.

$$\begin{aligned} \langle c_s \rangle^s &= c_s = c_s^* = k_p c_l^* = k_p c_l = k_p \langle c_l \rangle^l \\ \langle c_l \rangle^l &= \frac{\langle c \rangle}{(1 - g_s) + k_p g_s} \end{aligned} \quad (1.3.21)$$

où k_p est le coefficient de partition.

Modèle de Scheil

La diffusion dans le liquide est ici considérée complète (comme dans tous les modèles qui suivent) alors que celle dans le solide est nulle, on obtient ainsi la relation :

$$\begin{aligned} c_s^* &= k_p c_0 (1 - g_s)^{k_p - 1} \\ \langle c_s \rangle^s &= \frac{1}{g_s} \int_0^{g_s} c_s^* d\varepsilon \end{aligned} \quad (1.3.22)$$

Cette relation est inadéquate lorsque la solidification se rapproche de l'eutectique, il convient alors de changer de mode de solidification qui se produit alors à température constante (température eutectique).

Modèle de Brody-Flemings (cf. [KOBAYASHI, 1988])

Brody et Flemings ont ensuite proposé un modèle à partir d'une hypothèse de solidification parabolique soit g_s proportionnel à \sqrt{t} . En posant $\gamma = \frac{2D_s}{\zeta^2}$ avec $g_s = \zeta\sqrt{t}$, ils

obtiennent : $c_s^* = k_p c_0 \left[1 - (1 - \gamma k_p) g_s \right]^{k_p - 1 / (1 - \gamma k_p)}$ en suivant la formulation de Kobayashi (dans le modèle originel γ est fonction de α le nombre de Fourier). Le calcul de la concentration moyenne intrinsèque $\langle c_s \rangle^s$ reste inchangé. Toutefois ce modèle n'est plus physique si $\gamma > 0,35$ d'après Clyne et Kurz qui ont donc apporté une légère modification.

Modèle de Clyne-Kurz (cf. [KOBAYASHI, 1988])

Le paramètre γ du modèle Brody-Flemings est ici remplacé par β qui est calculé à partir de γ .

$$\begin{aligned} c_s^* &= k_p c_0 \left[1 - (1 - \beta k) g_s \right]^{k_p - 1 / (1 - \beta k_p)} \\ \beta &= \gamma \left[1 - \exp\left(-\frac{2}{\gamma}\right) \right] - \exp\left(-\frac{1}{\gamma}\right) \end{aligned} \quad (1.3.23)$$

Modèle de Ohnaka et loi de puissance (cf. [COMBEAU, 1996])

Un autre type d'approche consiste à postuler une forme pour la courbe de concentration dans la phase solide. Cette technique a d'abord été utilisé par Ohnaka (fonction quadratique) et ensuite été étendue à une loi de puissance de la forme :

$$c_s(\eta) = a\eta^\gamma + b \text{ où } \eta \text{ est l'abscisse dans l'élément représentatif, } \eta \text{ varie entre 0 et } g_s.$$

La constante γ est un paramètre ajustable.

Modèle à variable interne de Mo (cf. [COMBEAU, 1996])

Dans ce modèle au lieu d'exprimer une relation donnant directement la concentration moyenne, Mo détermine une équation d'évolution de la concentration moyenne dans le solide :

$$\frac{d\langle c_s \rangle^s}{dt} = \frac{k_p \langle c_l \rangle^l - \langle c_s \rangle^s}{g_s} \left[\frac{dg_s}{dt} + \frac{D_s}{x_0^2} \frac{\xi}{1 - (1 - k_p)g_s} \right] \quad (1.3.24)$$

où ξ est un paramètre ajustable et x_0 est égal à la moitié de l'espacement interdendritique secondaire.

Remarques à propos des différents modèles de macroségrégation

Le modèle de macroségrégation sert à prédire la variation de la concentration dans le solide et le liquide à l'échelle microscopique. Cette information est ensuite complétée par d'autres relations qui permettent ensuite de pouvoir calculer les valeurs de la température de la fraction et des valeurs moyennes de la concentration dans le solide et dans le liquide à l'échelle macroscopique.

Ces quelques modèles ne sont pas les seuls qui ont été développés mais ils permettent de mettre en avant quelques points intéressants. Ainsi à partir des deux cas limites que sont la loi de levier et la loi de Scheil, d'autres modèles ont été dérivés en adaptant graduellement la relation pour permettre d'obtenir une représentation plus réaliste. [KOBAYASHI, 1988] a ainsi comparé ces formulations avec une résolution analytique, il montre ainsi que pour une large plage de valeurs les résultats des modèles ne sont pas très satisfaisants. Plus tard [VOLLER, 1999] montre que les modèles de Brody-Flemings et Ohnaka donnent de meilleurs résultats non pas dans le cas d'une solidification parabolique comme écrit dans les hypothèses mais dans le cas d'une solidification avec un taux de refroidissement constant.

D'autres modèles ont ainsi été développés avec des approches différentes comme de choisir une formule pour la courbe de concentration dans le solide ou de résoudre une équation d'évolution. Ces approches ont été étudiées par Combeau *et al.* [COMBEAU, 1996] et montrent des résultats intéressants. Wang et Beckermann [WANG, 1993] ont aussi présenté un modèle décomposant en trois zones le VER : le solide, le liquide interdendritique et le liquide.

Toutefois, dans les codes de calcul on commence généralement par introduire les deux premières lois qui ont le gros avantage d'être très simples et d'être une bonne première approximation. Une deuxième étape étant d'introduire une discrétisation microscopique dans notre VER et de résoudre alors la macroségrégation directement au moyen d'une discrétisation monodimensionnelle, comme le décrivent Sundarraj et Voller [SUNDARRAJ, 1994].

Pour finir, il est à noter que la plupart de ces modèles considère l'interface comme localement plane, or la topologie de cette interface évolue au cours de la solidification comme l'a étudié [XU, 2001]. Le changement de topologie de cette interface modifie les relations comme le montrent Combeau *et al.* [COMBEAU, 1996].

1.3.4. Modèles de couplage T-g-c₁

Un autre point très important est la manière dont on résout le système d'équations macroscopiques. En effet il est très coûteux en temps de calcul de résoudre directement les équations couplées. On cherche donc à les résoudre séparément et ensuite à utiliser une méthode de couplage pour améliorer la résolution. Dans cette partie nous allons présenter les méthodes suivantes :

- Méthode de couplage de Xu et Li
- Source Based Scheme
- Méthode de Schneider-Beckermann
- Méthode de Swaminathan-Voller

Méthode de couplage de Xu et Li

Dans leur article Xu et Li [XU, 1991a] utilisent les équations suivantes pour la conservation de l'énergie et du soluté :

$$\begin{aligned} \frac{\partial((\rho c_p)_m T)}{\partial t} + \nabla \cdot (g_l \rho_l c_{pl} \mathbf{V}T) &= \nabla \cdot (\kappa_m \nabla T) + \rho_s \Delta H_{ls} \frac{\partial g_s}{\partial t} \\ g_l \frac{\partial(\rho_l c_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (g_l \rho_l \mathbf{V}c_l) &= \nabla \cdot (\rho_l D_l \nabla(g_l c_l)) + (\rho_l - \rho_s k_p) c_l \frac{\partial g_s}{\partial t} \end{aligned} \quad (1.3.25)$$

Où l'indice m indique la valeur du mélange solide-liquide qui est obtenue par une moyenne sur les deux phases.

Ces équations sont ensuite discrétisées par différences finies avec un schéma upwind mais au temps t^i . Le terme de chaleur latente est omis dans la résolution de T^{i+1} , la variation de la fraction de solide est donc calculée par rapport à la température du liquidus à l'aide de l'équation :

$$\Delta g_s^{i+1} = \left(\frac{g_s \rho_s c_{ps} + g_l \rho_l c_{pl}}{\rho_s \Delta h_{ls}} \right)^i (T_{liq}^{i+1} - T^{i+1}) \quad (1.3.26)$$

La méthode de résolution de la corrélation T- g_s - c_l est basée sur la procédure suivante :

- 1- Calcul de T^{i+1} en considérant $\Delta g_s^{i+1}=0$
- 2- Calcul de c_l^{i+1} en utilisant la valeur T^{i+1} et c_l^i , ensuite calcul de T_{liq}^{i+1} à partir de cette valeur
- 3- Calcul de Δg_s^{i+1} , alors $F1=0,5*(F1+\Delta g_s^{i+1})$
- 4- Calcul de la nouvelle valeur de T^{i+1} à partir de $c_l=c_l^{i+1}$ et F1, alors $T1=0,5*(T1+T^{i+1})$
- 5- Calcul de c_l^{i+1} à partir de T1 et F1, alors $C1=0,5*(C1+c_l^{i+1})$
- 6- Si les écarts entre F1 et Δg_s^{i+1} , T1 et T^{i+1} , c_l^{i+1} et C1, ne remplissent pas les critères de convergence retour sur les étapes 3 à 6.

Ce schéma de résolution du couplage T- g_s - c_l mérite quelques explications. L'idée de base est de se rapprocher progressivement de la solution de l'équilibre thermodynamique que doivent respecter ces trois variables. Ainsi on commence par calculer une température plus basse car on ne prend pas en compte la solidification. On calcule aussi une nouvelle concentration. Cette solution n'est pas bonne car l'écart de température obtenue induit une solidification et de plus la température calculée doit être égale à la température du liquidus avec la nouvelle concentration dans le liquide. Il est donc nécessaire de corriger les valeurs de température et de concentration dans le liquide en prenant en compte cette solidification induite par notre première estimation de la température. Pour stabiliser le schéma, les auteurs pondèrent la nouvelle valeur calculée par la valeur précédente. Ainsi petit à petit l'écart entre la température et la température de liquidus calculée avec la concentration dans le liquide se réduit et on arrive alors à la convergence. D'ailleurs Xu et Li montrent que leur schéma de couplage converge nécessairement. En moins de 30 itérations ils atteignent une précision de 10^{-4} .

Les trois schémas de couplage suivant sont décrits dans l'article de Swaminathan et Voller [SWAMINATHAN, 1997], ils reprennent donc le même système d'équations :

$$\begin{aligned} \frac{\partial((\rho c_p)_m T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l \mathbf{V} c_{pl} T) &= \nabla(\kappa \nabla T) - \rho_s \Delta h_{ls} \frac{\partial g_l}{\partial t} \\ \frac{\partial(\rho c)_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l \mathbf{V} c_l) &= 0 \end{aligned} \quad (1.3.27)$$

Méthode du terme source

Ce schéma utilise la procédure suivante à deux niveaux d'itération :

- 1- Calcul de la température T et de la variable $(\rho c)_m$ à l'aide des équations précédentes
- 2- En chaque point une valeur auxiliaire de l'enthalpie est calculée :
 $h^{aux} = c_p T^{i+1} + g_l^i \Delta h_{ls}$
- 3- Itération interne pour ajuster la température et déterminer la concentration liquide et la fraction de liquide en satisfaisant les contraintes suivantes :

$$h^{aux} = c_p T^* + g_l^* \Delta h_{ls} \quad (a)$$

$$c_l^* = F((\rho c)_m, g_l^*) \quad (b)$$

$$T^* = G((c_l^1)^*, \dots, (c_l^N)^*) \quad (c)$$

La relation (b) correspond au modèle de microségrégation, la contrainte (c) est imposée par la surface du liquidus et dépend de tous les constituants. Pour le diagramme de phase linéarisé d'un alliage binaire cette relation se simplifie en $T^* = T_f + m \cdot c_l$ où m est la pente du liquidus.

- 4- Après convergence des itérations internes, les valeurs alors calculées deviennent les valeurs pour l'itération externe.
- 5- Vérification de la convergence des itérations externes.

Ce schéma se rapproche du précédent, en effet on part d'une solution des équations thermique et solutale basée sur des valeurs connues de g_l et c_l , qui sont initialisées à l'incrément précédent pour la première itération. Ensuite on actualise ces valeurs pour résoudre de nouveau le système d'équations thermo-solutal jusqu'à obtenir la convergence. Mais ici on cherche aussi à assurer la consistance des variables T, c_l et g_l par des itérations internes entre chaque résolution.

Ce schéma pose quelques problèmes puisque la substitution successive dans les itérations internes ne fonctionne pas forcément et qu'il est parfois difficile d'obtenir la convergence des itérations internes ce qui pousserait à faire une résolution directe des trois équations.

Schéma de Swaminathan et Voller

L'objectif de ce schéma est d'éviter le calcul d'une solution dans la boucle interne du schéma précédent. A partir de l'équation (1.3.27), Swaminathan et Voller [SWAMINATHAN, 1997] obtiennent les équations discrétisées suivantes en posant que

$$\frac{\partial g_l}{\partial t} = \frac{dg_l}{dT} \cdot \frac{\partial T}{\partial t} \text{ et en explicitant le calcul de la concentration moyenne :}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial((\rho c_p)_m T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l \mathbf{V} c_{pl} T) &= \nabla(\kappa \nabla T) - \rho_s \Delta h_{ls} \frac{dg_l}{dT} \cdot \frac{\partial T}{\partial t} \\ \frac{\partial(\rho c)_m}{\partial t} &= -\nabla \cdot (\rho_l \mathbf{V} c_l^0) \end{aligned} \quad (1.3.28)$$

La procédure de résolution itérative employée suit alors le schéma suivant :

- 1- Initialisation aux valeurs du pas de temps précédent.
- 2- Résolution de l'équation de $(\rho c)_m$ réalisée une seule fois grâce à la formulation explicite.
- 3- Calcul d'une approximation de la température T_{aux} en utilisant l'équation suivante :

$$\frac{dg_l}{dT} = \begin{cases} \frac{g_l^n - g_l^{n-1}}{T^n - T^{n-1} + 10^{-6}}, & 0 < g_l^n < 1 \\ 0, & g_l^n = 1 \text{ ou } g_l^n = 0 \end{cases}$$

- 4- Calcul de g_l^{n+1} à partir de T_{aux} et de la température du liquidus T^{liq} provenant du diagramme de phase avec les c_l pris à l'itération n .

$$g_l^{n+1} = g_l^n + SLOPE * (T^{aux} - T^{liq})$$

$$SLOPE = \begin{cases} \frac{dg_l}{dT}, & 0 < g_l^n < 1 \\ \frac{c_{pl}}{\Delta H_{ls}}, & g_l^n = 0 \text{ ou } g_l^n = 1 \end{cases}$$

- 5- Calcul de $c_l^{n+1} = F((\rho c)_m, g_l^{n+1}, \text{valeurs de l'itération } n)$
- 6- Pour un système eutectique, si $c_l < c_{eut}$ alors $c_l = c_{eut}$
- 7- Calcul de la nouvelle température : $T^{n+1} = \begin{cases} G((c_l^1)^{n+1}, \dots), & 0 < g_l^n < 1 \\ T^{aux}, & g_l^n = 0 \text{ ou } g_l^n = 1 \end{cases}$
- 8- Mise à jour des variables
- 9- Les étapes 4 à 9 sont répétées jusqu'à obtenir la convergence fixée lorsque la variation de fraction de solide est inférieure à 10^{-5} .

Ce schéma présente donc une linéarisation de l'équation de la thermique avec une correction successive de la concentration dans le liquide et de la fraction de liquide ainsi qu'une résolution explicite de l'équation de transport du soluté.

Les différentes méthodes de couplage présentées ci-dessus ont donné de bons résultats d'après leurs auteurs. Même si le dernier modèle de Swaminathan et Voller a l'intérêt d'éviter des itérations internes, il est difficile de juger lequel est le plus intéressant.

Différentes stratégies de couplage ont été testées dans la thèse de Weitao Liu [LIU, 2005] et en partie testées aussi dans THERCAST. Ces résultats seront décrits plus loin lors de la présentation de la résolution des équations macroscopiques. Mais globalement l'équation de la thermique a été résolue en utilisant une technique de Newton-Raphson appelant le module de macroségrégation pour calculer la dérivée de la température par rapport à l'enthalpie en fonction de la concentration moyenne.

1.3.5. Etat de l'art de la simulation et applications

La simulation numérique de la macroségrégation a débuté depuis plus d'une dizaine d'années et de nombreux articles ont été publiés sur le sujet. Cependant les aspects les plus marquants de ces travaux sont le manque de résultats expérimentaux directement exploitables sur les gros lingots qui nous intéressent. Ce manque est en grande partie du au fait que la réalité physique s'écarte largement de l'approche simplifiée des modèles utilisés et qu'il n'est donc pas facile d'exploiter directement les résultats expérimentaux. Les coûts sont aussi très élevés pour la mise en place de ces expériences. D'autre part les résultats présentés sont souvent succincts et ne permettent pas une analyse détaillée de l'évolution de la solidification et donc la compréhension des cartes de ségrégation finales. Toutefois des simulations ont permis de retrouver certains phénomènes rencontrés par les fondeurs et de les expliquer et reproduire numériquement. En particulier certains types de ségrégation apparaissant dans les lingots sont reproduits par les calculs. Ces aspects sont donc très encourageants même si il reste encore beaucoup de travail avant de pouvoir avoir un outil numérique à vocation industrielle fiable et efficace.

Pour ce tour d'horizon de la recherche nous nous appuyons sur trois publications ([PRESCOTT, 1996], [BECKERMANN, 2000], [BECKERMANN, 2002]) qui présentent une revue de ce qui se fait en ségrégation et des différentes applications actuelles. Même si certaines de ces applications sont éloignées de notre cas industriel, il semble bon d'avoir une idée de ces travaux pour mieux cerner les limites des modèles ainsi que leurs atouts.

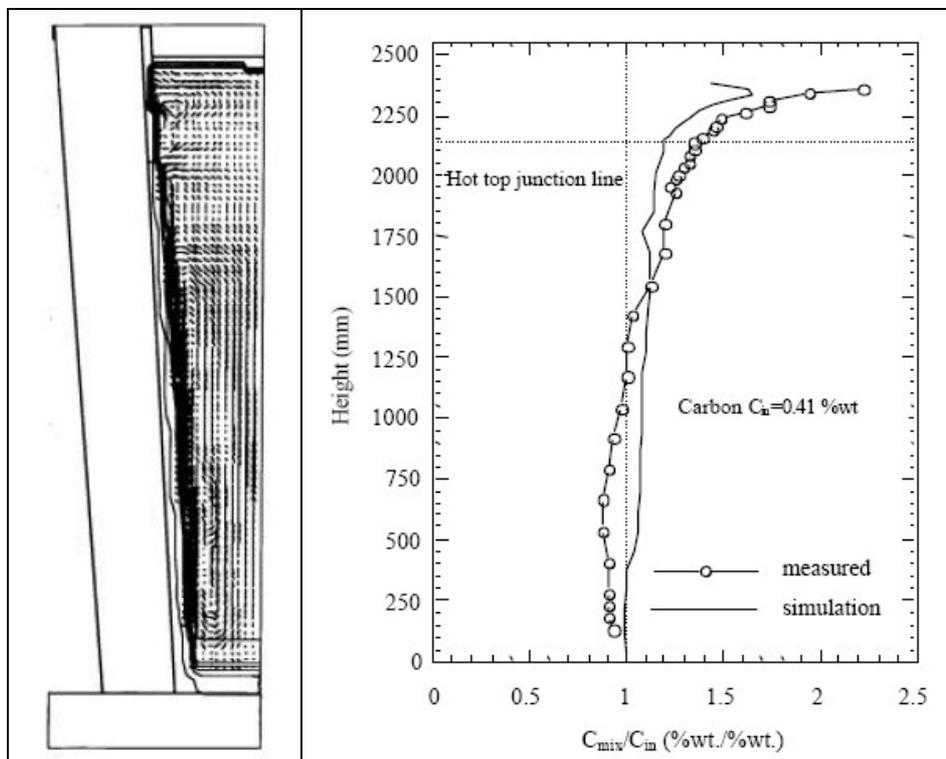
Les travaux de recherche se sont bien souvent cantonnés à l'étude de substance semi transparentes analogues à des alliages métalliques, du $\text{NH}_4\text{Cl-H}_2\text{O}$ par exemple. La solidification dendritique de ces alliages permettait d'avoir une approximation de la structure colonnaire des alliages métalliques tout en pouvant visualiser la formation du front et aussi les dendrites. Toutefois les caractéristiques de ces matériaux restent tout de même éloignées de celles des métaux en particulier le nombre de Prandtl est très différent. Cette approche a donc ces limites mais peut permettre une première comparaison avec des résultats expérimentaux au moins pour le codage numérique des équations. L'aspect dendritique de la solidification peut aussi être utilisé pour valider des modèles microscopiques prédisant la formation de la dendrite.

Les cas étudiés sont généralement simplifiés en se limitant à une géométrie pouvant se ramener à un cas 2D et en contrôlant les échanges avec l'extérieur. Ainsi la majorité des cas sont soit du refroidissement latéral soit du refroidissement par le bas, les autres faces étant considérées adiabatiques. Le premier cas est bien adapté pour simuler l'avance d'un front de solidification alors que le second sert plus à analyser les instabilités dans le front de solidification qui peuvent conduire à la formation de canaux ségrévés. Ces cas plus académiques qu'industriels servent de référence pour les validations. Cependant la simplification parfois excessive de ces cas les rend difficilement exploitables pour une extrapolation sur des lingots industriels. Il est donc nécessaire de simuler des cas plus proches de la réalité.

Les simulations sur les alliages métalliques reprennent aussi en partie ces cas simplifiés (cf. [PRESCOTT, 1996], [AHMAD, 1998], [CHAKRABORTY, 2003], [STELIAN, 2003], [DESBIOLLES, 2003]) mais sont aussi appliquées à des cas plus complexes, comme les calculs et les analyses présentés dans [VANNIER, 1993] et [THIEBAUT, 1999]. [BECKERMANN, 2000] fournit ainsi dans ces articles quatre principaux exemples de simulations :

- lingot d'acier axisymétrique
- coulée continue d'aluminium
- croissance monocristalline d'un superalliage
- Pièce coulée complexe en acier

Le premier exemple correspond bien à notre problématique. En effet, comme l'illustre la Figure 1-14, la simulation comporte les différents éléments du moule et des réfractaires qui en font une bonne approximation de la géométrie du cas industriel. Les calculs permettent une prédiction de la ségrégation sur l'axe du lingot qui est bien souvent utilisée comme référence. Ce lingot a été coulé et analysé ce qui permet cette comparaison intéressante avec l'expérience. Les écarts de concentration sont expliqués par la non prise en compte de la partie de la solidification qui est en grande partie équiaxe. Cet exemple illustre bien la difficulté de la validation des codes de calcul de la macroségrégation. Il est en plus difficile d'estimer les effets numériques sur ces écarts car elles sont rarement évaluées. De plus les propriétés des matériaux ne sont pas toujours connues avec suffisamment de précision.



**Figure 1-14 : Schéma du lingot et écart de concentration en carbone sur l'axe du lingot
[BECKERMAN, 2000]**

Les autres exemples illustrent des types de calcul différents. La simulation en coulée continue est centrée sur la macroségrégation due à la contraction du solide dans la zone pâteuse qui expulse le liquide enrichi. La déformation du solide est donc ici la source principale de ségrégation même si pour l'aluminium le mouvement dans le liquide est important ([VENNEKER, 2002]) contrairement à la coulée continue d'acier pour laquelle la zone pâteuse est beaucoup plus longue.

Les problèmes de croissance de cristaux font intervenir une solidification verticale qui génère des instabilités dans le front de solidification. Cela provoque parfois la formation de « freckles », des canaux avec une forte ségrégation. Ce problème a été largement étudié dans la littérature (cf. [FELICELLI, 1997], [GUO, 2003], [HEINRICH, 2004], [LIU, 2005]). Il

nécessite de faibles tailles de maille mais les simulations se font seulement sur de petites pièces ce qui rend acceptable le nombre d'éléments spécialement pour les cas 2D. Ce type de simulations n'a pas été effectué avec THERCAST car l'objectif de l'étude était plutôt centré sur les lingots de grande taille pour lesquels ce phénomène est moins crucial.

Enfin le dernier exemple consiste en une pièce coulée complexe dans laquelle le refroidissement et l'écoulement sont compliqués par la géométrie. Cela limite l'amplitude des zones de recirculation et donc les ségrégation que l'on observe sont différentes et les termes de retrait peuvent avoir leur importance. Pour ce type de calcul, la phase de remplissage est très importante et ce type de simulation requiert donc une approche différentes de celles employées pour la solidification de lingots plus classiques.

Ainsi la plupart des publications concernent l'étude de points bien particuliers comme les freckles mais les articles traitant de la solidification de lingots industriels sont très rares. Il ne sera donc quasiment pas possible de comparer nos résultats avec ceux d'autres codes de calcul ou avec des résultats expérimentaux. Ce type de comparaison se fera donc sur des cas simplifiés comme l'expérience de Hebditch et Hunt [HEBDITCH, 1974] qui est couramment employée pour la validation de code de macroségrégation [AHMAD, 1998].

1.4. Contexte et objectifs de l'étude

1.4.1. Contexte de l'étude et partenaires industriels

Ce travail de recherche fait partie d'un projet d'Optimisation des Systèmes de Coulée du Ministère de l'Industrie qui réunit de nombreux partenaires industriels (principalement Arcelor, Aubert&Duval, Ascometal, Industeel, CTIF, Erasteel), des laboratoires de recherche (CEMEF et LSG2M) et des sociétés de valorisation des outils logiciels (Sciences et Computers Consultants, Transvalor).

En effet, les partenaires industriels de ce projet et les laboratoires de recherche ont lancé en février 2000, avec l'aide du Ministère de l'Industrie, un projet concernant le procédé de la coulée à la fois en lingots et en coulée continue. Ce procédé, très important au niveau de la qualité finale du produit et de son coût de revient, regroupe, pour les industriels, les phases de remplissage, de solidification et de refroidissement. Son domaine d'application concerne la fabrication, des pièces moulées (que ce soit des pièces moulées en sable, ou en coquille comme les lingots) et des brames de coulée continue.

L'objectif des industriels est, au final, de réduire les coûts et délais de cette étape de fabrication. Ceci passe par la mise au point d'outils performants de modélisation de la coulée. Ces outils permettront l'optimisation des produits actuels et la mise au point de produits nouveaux.

Pour une gestion technique plus facile, le projet a été découpé en 3 sous-projets ayant chacun une forte interaction avec les 2 autres :

Projet "Optimisation des Systèmes de Coulée - Fonderie" (OSC - F)

Le projet OSC - F s'intéresse à l'optimisation des gammes de moulage (sable ou coquille), basée sur la prévision des phénomènes thermo-mécaniques de la solidification (dimensionnel des pièces, contraintes dans les pièces et les moules). Trois points, intéressant fortement les industriels, sont particulièrement étudiés : la réduction des temps de calcul, la

prise en compte du remplissage de pièces complexes et l'élaboration d'une base de données matériau.

Projet "Optimisation des Systèmes de Coulée - Métallurgie" (OSC - M)

Le projet OSC - M prend en compte des phénomènes métallurgiques qui sont prépondérants pour la solidification de certaines nuances. Ce projet permettra l'application des logiciels développés, aux procédés industriels mettant en jeu la coulée et la solidification d'aciers ou d'alliages très alliés.

Projet "Optimisation des Systèmes de Coulée - Coulée Continue" (OSC - CC)

Ce projet s'intéresse à la prise en compte d'un phénomène essentiel pour certains procédés de coulée : la compressibilité du métal pâteux au niveau de la thermomécanique du produit mais aussi à la modélisation des rouleaux, du refroidissement de la brame, etc. Par exemple, la prise en compte de la compressibilité est essentielle pour une meilleure compréhension des phénomènes qui régissent les ségrégations axiales, criques internes et porosités... Par ailleurs, les outils numériques, déjà développés ou en cours de développement dans le cadre du projet OSC, seront adaptés à une utilisation dans le domaine de la coulée continue.

Ces sous projets sont pilotés chacun par un industriel, et la coordination est effectuée par un Comité de Pilotage, composé d'un représentant de chaque partenaire (voir Figure 1-15).

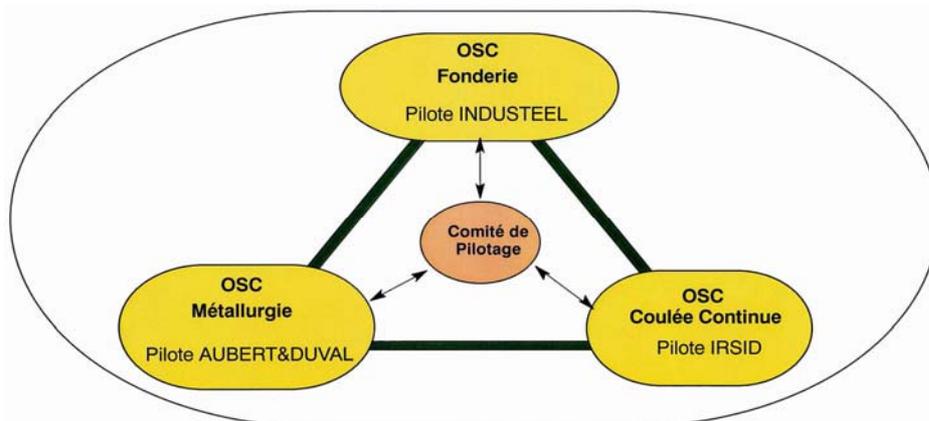


Figure 1-15 : Structure du projet OSC

Concernant plus spécifiquement le projet OSC – M dans lequel s'inscrit cette thèse, les travaux se divisent en plusieurs parties :

- perfectionnement de R2SOL, le logiciel de solidification 2D éléments finis développé au CEMEF
- développement des modèles «métallurgiques», et implantation dans le logiciel SOLID, logiciel 2D volumes finis développé au LSG2M
- validation des modèles,
- intégration des modèles de ségrégation dans le logiciel 3D THERCAST, logiciel de solidification 3D éléments finis développé au CEMEF, et validation des résultats.

Perfectionnement du logiciel R2SOL

Cette étude vise à améliorer l'efficacité du code en termes de temps de calcul, de précision et de place mémoire nécessaire (adaptation du maillage). Cette action, nécessaire

aussi à l'adaptation de R2SOL à la Coulée Continue, est prise en compte dans le projet OSC CC.

Développement des modèles métallurgiques et implantation

Il est prévu d'améliorer le modèle de prévision de la structure par l'étude de la formation des germes, de leur transport lié au mouvement du liquide, de leur survie, ainsi que par l'étude de la croissance et du mouvement des grains équiaxes issus de ces germes.

Par ailleurs, les alliages mis en œuvre par les industriels sont chargés en éléments chimiques et leur chemin de solidification est complexe. Des actions sont programmées pour pouvoir traiter la solidification des aciers fortement alliés.

Validations industrielles des modèles développés

Des pièces d'essais seront coulées en différentes nuances fortement alliées (nuances qui posent habituellement des problèmes). Ces pièces seront entièrement caractérisées. Des comparaisons avec le logiciel permettront de valider la justesse de ce dernier.

Intégration des modèles de ségrégation dans le logiciel 3D et validation

Il sera implanté dans THERCAST, les mêmes possibilités que dans R2SOL, en matière de calcul de macro et microségrégation et de traitement de la zone pâteuse.

1.4.2. Objectifs de l'étude

Objectif: simuler la solidification, supposée dendritique colonnaire, et la macroségrégation qui l'accompagne pour un lingot de taille industrielle en 3 dimensions dans un assemblage de moules et de réfractaires.

A partir de cet objectif principal très général, plusieurs points devront être remplis pour pouvoir considérer la capacité du logiciel à simuler la macroségrégation.

Parmi ces points secondaires, le premier est la prédiction correcte de l'écoulement dans la partie liquide et pâteuse. En effet, il est essentiel que le code soit capable de prédire correctement le champ de vitesse et aussi que cette résolution soit la plus efficace possible à la fois en temps de calcul mais aussi en terme d'utilisation de grands pas de temps et de taille de maillage nécessaire.

Ensuite la résolution du transport de soluté et le couplage avec la résolution thermique en enthalpie doit être réalisé à l'aide d'un module de transport et d'un module de microségrégation qui devront être construits de manière indépendante pour permettre une évolution plus aisée du code. En particulier le module de microségrégation doit pouvoir dans le futur être remplacé de manière modulaire par un modèle de microségrégation plus réaliste comme ceux introduits dans SOLID dans le cadre du projet OSC – M, ou ceux dont disposent déjà des sociétés industrielles comme ARCELOR par exemple.

Pour finir, les différents tests réalisés au cours de cette étude ont démontré la nécessité d'ajouter un module de remaillage. Il faudra donc aussi introduire une stratégie générale de remaillage adaptée à ce problème physique. Cette méthode devra idéalement être adaptable facilement à différentes configurations de lingots, peu coûteuse et raffiner efficacement le maillage pour ne pas avoir un accroissement trop important du nombre d'éléments.

Ces travaux sont effectués dans la continuité du développement du logiciel THERCAST au CEMEF. Au cours de cette thèse, nous n'avons bien entendu pas redéveloppé l'ensemble des modules de résolution. Nous sommes partis d'un noyau logiciel déjà existant à l'intérieur nous avons apporté de nouveaux, des améliorations ou des fonctions complémentaires. Ainsi le Tableau 1-2 récapitule les différents apports de ce travail au niveau du logiciel. Le symbole & signifie que cette partie a été réalisée en collaboration avec Victor Fachinotti, en postdoctorat au Cemef sur ce sujet durant ma première année de thèse, alors que le symbole * signifie qu'il l'a réalisé seul (toutefois cette partie s'intègre dans les développements pour la prédiction la macroségrégation).

L'implémentation des fonctionnalités présentées dans le Tableau 1-2 et l'analyse de bien d'autres points ont été nécessaires pour permettre une résolution efficace de la macroségrégation.

Dans la suite de ce manuscrit nous allons donc voir comment ces différents objectifs ont été abordés et quelles solutions ont été trouvées. Enfin nous essayerons d'évaluer à travers différentes simulations l'efficacité du logiciel.

Tableau 1-2 : Evolution des différentes parties du logiciel THERCAST au cours du projet macroségrégation

Etat initial du logiciel	Modifications apportées pour la prédiction de la macroségrégation
Résolution thermique : Résolution upwind nodal en température Chemin de solidification fournit par l'utilisateur sous forme d'un tableau $g_i(T)$	Résolution thermique : Résolution SUPG en température (*) Résolution SUPG en enthalpie (&) Prise en compte de l'eutectique (&) Implémentation de la méthode de line-search (*) Optimisation de la méthode de résolution Traitement des chocs thermiques (*)
Résolution mécanique : Résolution P1+/P1 upwind nodal	Résolution mécanique : Résolution P1+/P1 SUPG Résolution SUPG-PSPG (*) Semi-implication du terme de convection
Extraction de maillage	Résolution solutale : Résolution SUPG avec « splitting » (&) Module de macroségrégation (loi des leviers) (&) Intégration des données du diagramme de phase (&) Remaillage : Calcul des tailles de maille Coefficients d'anisotropie Optimisation du remaillage et extraction