



AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10

http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php

<http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm>

INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE LORRAINE

[M] 1992 ROCH, F. 1

MODELISATION DE LA SOLIDIFICATION

D'UN LINGOT DE FORGE

THESE

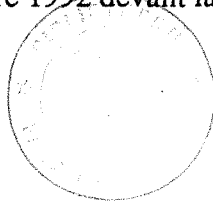
présenté devant l'Institut National Polytechnique de Lorraine
pour obtenir le titre de

Docteur de l'I.N.P.L.
(Science et Génie des Matériaux)

par

François ROCH

soutenu le 9 Décembre 1992 devant la Commission d'Examen



<u>Jury</u> :	Monsieur	Jean-Charles CHEVRIER	Président
	Messieurs	Francis DURAND Dominique GOBIN	Rapporteur Rapporteur
	Madame	Isabelle POITRAULT	Examineur
	Messieurs	Hervé COMBEAU Gérard LESOULT Jean SALEIL	Examineur Examineur Examineur

SOMMAIRE

Introduction générale	1
1 Généralités sur les lingots de forge	3
<i>1.1 Spécificités</i>	3
1.1.1 Masse	3
1.1.2 Trois types de lingots	
<i>1.2 Elaboration</i>	4
1.2.1 Affinage	4
1.2.2 Coulée	4
1.2.3 Masselottage	5
<i>1.3 Description de la solidification et microstructures</i>	5
<i>1.4 Ségrégations</i>	8
1.4.1 Définition	8
1.4.2 Taux de ségrégation du carbone	8
1.4.3 Description d'une empreinte Baumann	9
1.4.4 Revue des phénomènes impliqués dans la genèse des ségrégations	10
<i>1.5 Résultats industriels publiés</i>	14
<i>1.6 Conclusion : objectifs généraux de l'étude</i>	16
2 Modélisation de la solidification d'un lingot de forge	18
<i>2.1 Technique de mise en équations</i>	18
2.1.1 Définition de l'échelle de grandeur du volume élémentaire considéré	18
2.1.2 Technique de prise de moyenne	19
<i>2.2 Application à la solidification d'un lingot de forge</i>	19
2.2.1 Hypothèses générales	19
2.2.2 Mise en équations	21

2.2.2.1	Système d'équations de transport	23
	Transfert de quantité de mouvement	23
	Conservation de la masse	25
	Transferts thermiques	25
	Transfert de soluté	27
2.2.2.2	Couplage entre ces différents transferts	29
2.2.2.3	Solutions initiales	31
2.2.2.4	Conditions aux limites	32
2.2.3	Calcul de la perméabilité de la zone pâteuse	33
2.3	<i>Conclusion</i>	34
3	Discrétisation et résolution des équations	35
3.1	<i>Concept de discrétisation</i>	35
3.2	<i>Application de la méthode des volumes finis</i>	36
	3.2.1 Discrétisation de l'espace	36
	3.2.2 Discrétisation de la forme générale des équations de transport	37
	3.2.3 Application spécifique à l'équation de l'énergie	42
3.3	<i>Algorithme de résolution</i>	43
	3.3.1 Boucle sur les pas de temps	43
	3.3.2 Enchaînement des calculs au cours d'un pas de temps	43
	3.3.3 Boucle de résolution des systèmes	44
3.4	<i>Validation</i>	45
	3.4.1 Présentation du cas-test choisi	46
	3.4.2 Résultats	46
4	Exploitation du modèle	49
4.1	<i>Confrontation avec l'expérience de Creusot-Loire Industrie</i>	49
	4.1.1 coulée expérimentale	49
	4.1.1.1 Description de la coulée	49
	4.1.1.2 Présentation des champs de vitesse et de température calculés	50

4.1.1.3	Présentation du champ calculé de concentration en carbone	51
4.1.1.4	Transferts de chaleur mesurés et calculés	51
4.1.1.5	Transferts de soluté mesurés et calculés	53
4.1.2	Profils de ségrégation d'un lingot de 110 tonnes	57
4.1.3	Relation de Comon	58
4.1.3.1	Influence du molybdène	58
4.1.3.2	Influence du diamètre du lingot	59
4.1.3.3	Conclusion	59
<i>4.2</i>	<i>Extrapolations</i>	59
4.2.1	Surchauffe	59
4.2.2	Masselottage	60
4.2.3	Composition initiale	61
<i>4.3</i>	<i>Mise en évidence des limites du modèle</i>	61
4.3.1	Solidification équiaxe	61
4.3.2	Couplage du transfert de soluté	61
4.3.3	Veines sombres	62
<i>4.4</i>	<i>Conclusion</i>	62
	Conclusion générale	64
	Bibliographie	67
	Nomenclature	72
	Annexe 1 : Calcul de la perméabilité d'un milieu poreux	74
	Annexe 2 : Etude bibliographique de la modélisation des transferts couplés lors de la solidification d'un alliage, en vue du calcul des macroségrégations	83

Annexe 3 : Description sommaire de la méthode des volumes finis	88
Annexe 4 : Discrétisation par la méthode des volumes finis de l'équation de diffusion-convection	89
Annexe 5 : Données numériques employées dans le modèle	92

INTRODUCTION

Plus de 95 % de l'acier élaboré en France est mis en forme par coulée continue et la solidification en lingotière apparaît appartenir au passé. Cependant la fabrication de grosses pièces forgées ne peut être conduite qu'à partir de lingots. Le faible tonnage produit par la forge ne doit pas faire oublier la haute valeur ajoutée des produits finis et le caractère stratégique de la maîtrise d'un tel procédé de fabrication. Ceci conduit les aciéristes à produire des lingots de forge dont la santé interne - absence d'inclusions et de porosités, homogénéité chimique - est la meilleure possible. En effet les propriétés finales des produits forgés peuvent être grandement affectées par de tels défauts. Ainsi, un alésage dans la partie centrale d'un lingot fait déboucher des canaux (ségrégations en A, encore appelés veines sombres) sur la surface interne, canaux fortement enrichis en éléments d'alliage et en impuretés, et qui nuisent à la soudabilité de la surface. Un effort de recherche dans la compréhension de la genèse de défauts du type ségrégation dans un lingot de forge est donc indispensable ; ceci d'autant plus que l'étendue des ségrégations est directement reliée à la taille des lingots et que la tendance est à la fabrication de pièces de plus en plus lourdes (300 tonnes et plus).

Les mécanismes de formation des ségrégations dans les lingots peuvent sembler bien connus ; en effet les travaux dans le domaine sont nombreux. En particulier les résultats de COMON, DELORME et BASTIEN [1] portant sur le dépouillement statistique de 152 lingots d'acier ont montré l'influence de la composition initiale de l'acier sur la ségrégation du carbone ; d'autre part HULTGREN [2] et FLEMINGS [3] ont mis en évidence le rôle prépondérant du mouvement du liquide interdendritique sur les différents types de ségrégations. Cependant l'approche numérique de la solidification d'un lingot de forge, à savoir la modélisation des transferts de chaleur, de masse et de quantité de mouvement dans l'acier en cours de solidification en est encore à ses débuts. Il faut mentionner à ce propos les travaux d'OHNAKA [4,5] dans le domaine.

Creusot-Loire Industrie et le Laboratoire de Science et Génie des Matériaux Métalliques de l'Ecole des Mines de Nancy ont décidé en 1987 de lancer un programme de recherche sur le thème de la modélisation de la solidification des lingots de forge. L'objectif de cette étude est de développer un outil numérique capable de prévoir la carte de composition chimique d'un lingot de forge après solidification, ainsi que les zones où des veines sombres risquent d'apparaître. Le développement de ce programme ambitieux est passé par la réalisation de quatre étapes :

- un "état de l'art" sur les lingots de forge, depuis leur fabrication jusqu'à la mise en évidence des phénomènes impliqués dans la genèse des ségrégations, de manière à définir le cadre de l'étude,

- une mise en équations des phénomènes de transferts couplés de chaleur, masse et quantité de mouvement dans l'acier se solidifiant et dans la lingotière. Il est à remarquer que si la mise en équation des transferts de chaleur ne semble pas poser de problème théorique, en dépit des mouvements convectifs, il n'en est pas de même pour l'équation de conservation de la quantité de mouvement dans un milieu continu liquide, poreux ou solide. Notre effort a donc en particulier porté sur l'écriture de ce bilan et sur la meilleure description possible de la perméabilité de la zone pâteuse.
- la discrétisation du système d'équations obtenu à l'étape précédente, ainsi que le développement d'un programme informatique à même de résoudre au moins en partie le problème. Le code de calcul disponible au Laboratoire de Métallurgie (MODULEF) s'est en effet avéré impuissant à traiter un tel problème, il a donc été nécessaire de développer un outil spécifique.
- la validation et l'exploitation de l'outil numérique, pour d'une part retrouver par le calcul des résultats connus et d'autre part apporter des éléments de réponse aux questions portant sur l'influence de tel ou tel paramètre sur l'intensité et l'étendue des ségrégations. Il faut souligner que la validation est passée par l'instrumentation, la coulée et l'étude métallurgique d'un lingot de 65 tonnes. Une telle expérimentation a été une étape majeure dans le déroulement de ce projet. La nature des quatre étapes montre que cette étude se situe à l'intersection de l'analyse numérique et de la métallurgie et n'a été possible que par la collaboration étroite entre l'industrie et la recherche publique.

Certains aspects de ce travail sont donc éloignés de la métallurgie classique et sont plutôt du domaine de l'analyse numérique. Les résultats obtenus justifient les efforts réalisés dans le domaine numérique et informatique.

1 Généralités sur les lingots de forge

1.1 Spécificités propres aux lingots coulés au Creusot par Creusot-Loire Industrie

1.1.1 Masse

Les lingots de forge se caractérisent par une masse importante ; les plus petits lingots coulés par Creusot-Loire Industrie (C.L.I.) pèsent 40 à 50 tonnes et les plus gros avoisinent les 200 tonnes. Des lingots de 500 tonnes ont été coulés par les sidérurgistes japonais. Solidifier de telles masses nécessite plusieurs dizaines d'heures et, une fois le métal introduit dans la lingotière, il est difficile d'avoir la moindre action sur la solidification, contrairement à la coulée continue où il est possible d'agir sur la vitesse de refroidissement, sur le mouvement du liquide (brassage électromagnétique) et sur la déformation du solide (réduction douce).

1.1.2 Trois types de lingots

Tous les lingots de forge coulés par C.L.I. présentent une symétrie axiale ; cependant Le Creusot a mis au point des lingots dont la géométrie initiale se rapproche de la forme du produit forgé. Ainsi, les pièces plates et les pièces creuses sont forgées à partir de lingots distincts des lingots conventionnels : les lingots à solidification dirigée (LSD) et les lingots creux (PISSELOUP et al. [6]). Ces deux types de lingots sont brevetés.

- Lingots conventionnels

Ce sont les lingots les plus courants. Leur rapport H/D (H hauteur et D diamètre du lingot) est compris entre 1 et 1,3. Ils présentent tous une partie supérieure qui s'est solidifiée plus lentement que le corps (masselotte) et qui sera chutée, ainsi qu'une partie inférieure présentant une extension (pied) pour une manutention facile (figure I-1).

- Lingots à solidification dirigée

Ils présentent un faible rapport H/D et de ce fait se solidifient principalement par la base. On distingue deux types de LSD :

- les LSD avec H/D inférieur à 0,8 appelés LSD courts.
- les LSD avec H/D supérieur à 0,8 appelés LSD longs, dont la solidification se rapproche d'un lingot conventionnel.

Contrairement aux lingots conventionnels, ils n'ont ni masselotte ni pied.

- Lingots creux

La mise au point de lingots creux a permis l'obtention de pièces creuses exemptes de ségrégations dans l'alésage. Le principe repose sur la mise en place avant coulée d'un noyau central, dans lequel un gaz circule, de manière à refroidir rapidement la surface interne du lingot. Le débit de gaz de refroidissement est tel que la vitesse de solidification sur la face interne est égale à celle sur la face externe du lingot ; la fin de solidification se situe donc à environ mi-épaisseur. Outre un alésage sans ségrégations, ces lingots présentent une ségrégation interne plus faible que celle des lingots conventionnels et une mise au mille réduite. Ces lingots sont masselottés et n'ont pas de pied.

1.2 Elaboration pratiquée au Creusot

1.2.1 Affinage

L'acier est élaboré à partir de ferrailles fondues dans un four électrique. L'affinage est réalisé en poche de coulée (affinage en poche chauffante ou APC). De l'oxygène est insufflé dans l'acier liquide et l'aluminium, le silicium, le phosphore sont oxydés et passent par décantation dans le laitier recouvrant le bain. Le carbone est éliminé sous forme gazeuse par formation de CO, cette décarburation contribue à l'élimination des gaz dissous comme l'azote ou l'hydrogène. Le métal liquide est ensuite désoxydé par introduction de silicium dans le bain (on dit encore calmé). Ensuite la mise à la nuance est réalisée et la température de coulée ajustée.

1.2.2 Coulée

Le remplissage de la lingotière est une étape rapide (environ 5% du temps total de solidification), mais délicate. En effet au cours de cette opération une pollution chimique du liquide est à craindre, ainsi que l'introduction accidentelle d'inclusions non métalliques dans le bain ; de plus si la quantité de métal à couler dépasse 100 tonnes (capacité maximale d'une poche d'affinage), les aciéristes de C.L.I. doivent verser le contenu de deux poches dans la lingotière, avec un temps de battement minimum pour changer de poche. La surchauffe du liquide, c'est-à-dire l'écart entre sa température et sa température de liquidus, est élevée, typiquement 80 à 100 °C, de manière à éviter tout risque de solidification ailleurs qu'à l'interface liquide-lingotière pendant la phase de remplissage. Deux modes de coulée sont pratiqués.

- Coulée en chute

Cette coulée s'effectue sous un vide de 0,1 à 0,5 Torr, soit de l'ordre de 10^{-4} atmosphère (10 Pa). Le métal est versé directement par le haut de la lingotière (figure I-2). Le vide a pour effet de briser le jet liquide dès son entrée dans l'enceinte dépressurisée. C'est donc sous forme de gouttelettes que l'acier est introduit dans la

lingotière. Ce mode de coulée est utilisé quand on désire obtenir un acier à très faible teneur en hydrogène ou en azote. Une fois la lingotière remplie, des poudres réfractaires sont répandues à la surface du bain de manière à assurer son isolation.

- Coulée en source

Le liquide est versé dans un conduit, la mère de coulée, qui le canalise et l'introduit dans la lingotière par la base (figure I-2). Cette coulée s'effectue à la pression atmosphérique mais le jet d'acier liquide passe de la poche à la mère de coulée sous protection.

1.2.3 Masselottage

L'acier présente la propriété de se contracter en se solidifiant, phénomène communément appelé retrait à la solidification. Un apport constant de liquide vers les parties se solidifiant est donc nécessaire pour compenser la variation de volume et éviter la formation de porosités au sein du lingot. Cette alimentation en liquide est possible en isolant thermiquement la partie haute du lingot de telle sorte qu'elle se solidifie en dernier. Ceci est en partie réalisé par l'emploi des poudres de couverture ; cette technique assure en effet aux lingots à solidification dirigée une absence de porosités à coeur moyennant l'emploi massif de poudres exothermiques et de poudres de couverture. Cependant ceci n'est pas suffisant pour garantir la même santé interne aux lingots conventionnels et aux lingots creux ; la partie interne supérieure de la lingotière est donc revêtue de plaques de réfractaires, de manière à ménager un volume dans lequel le liquide se solidifie beaucoup plus lentement que dans le reste de la lingotière. Le métal contenu dans ce volume est appelé masselotte. La masselotte représente plus de 10% de la masse de métal introduit dans la lingotière. Cette masselotte sera ensuite chutée ; la mise au mille sera donc fortement tributaire de son existence. Toute amélioration conduisant à limiter la masse de la masselotte aura des conséquences importantes sur le prix de revient du lingot.

1.3 Description de la solidification et microstructures des lingots de forge

La solidification d'un alliage non eutectique à plusieurs constituants tel que l'acier présente trois caractéristiques fondamentales :

- L'interface entre les phases solide et liquide présente une géométrie complexe, la solidification est dite dendritique.
- Elle ne se produit pas à température unique (cas d'un corps pur ou d'un mélange eutectique), mais dans un intervalle de température où la fraction liquide évolue de 1 à 0 suivant des conditions fixées par la thermodynamique et les différents phénomènes de transport (chaleur, masse et quantité de mouvement).

- Elle se traduit par un enrichissement du liquide résiduel en pratiquement tous les éléments d'alliage au fur et à mesure que le solide se forme, du fait de la plus faible solubilité de ces éléments dans la phase solide.

Ces trois propriétés sont responsables de deux phénomènes particulièrement importants :

- L'existence d'une zone contenant à la fois du solide et du liquide, la zone pâteuse, analogue à un milieu poreux dont la perméabilité est fonction de l'espace et du temps.
- Le développement de courants de convection naturelle non seulement d'origine thermique mais également d'origine solutale, du fait de la variation de la masse volumique du liquide suivant sa composition chimique, phénomène conduisant à un transport de soluté à longue distance.

A ces deux phénomènes se superposent deux modes de solidification : basaltique (encore appelée colonnaire) et équiaxe, à l'origine de deux types de texture de grain observables dans la coupe d'un lingot de forge. La solidification basaltique correspond au développement de la phase solide à partir des parois du moule et vers le centre du produit (les grains de solidification sont alors constitués de groupes de dendrites développées parallèlement les unes aux autres), alors que la solidification équiaxe correspond à la croissance de cristaux au coeur du lingot dans le liquide en surfusion (les grains de solidification sont alors des entités cristallographiques distinctes sans direction de croissance privilégiée) (figure I-3).

La solidification d'un lingot de forge se présente donc comme un processus complexe, dont la description fait intervenir des transferts de masse, de chaleur et de quantité de mouvement. Une manière de la présenter est de suivre chronologiquement son déroulement.

La solidification débute dès l'étape de remplissage par la formation d'une peau à l'interface acier liquide-lingotière. Cette peau est constituée de petits cristaux sans orientation particulière et dont la nature dendritique est difficilement discernable. On parle de texture équiaxe de peau. La carte de température dans l'ensemble acier-lingotière, ainsi que le champ résiduel de vitesse dans le liquide en fin de coulée sont certainement fonction de la manière dont est introduit le métal dans le moule. Mais rien ne permet actuellement de dire si cette différence a une influence notable sur le déroulement ultérieur de la solidification. Le remplissage est une étape pendant laquelle le liquide se refroidit fortement, du fait d'un brassage intense, et perd une bonne partie de sa surchauffe. Cependant la température initiale de coulée est telle que l'ensemble du liquide en fin de remplissage présente encore une température supérieure à sa température de liquidus, hormis une fine couche devant le front de solidification. Toute cristallisation au sein même du liquide surchauffé est par conséquent impossible puisqu'elle nécessite une surfusion. La solidification progresse donc uniquement à partir de la peau et dans la

direction du gradient thermique (LESOULT [7]) (figure I-4), conférant ainsi au solide formé une orientation caractéristique. On parle de solidification colonnaire ou basaltique. En présence d'un écoulement du liquide parallèle au front de solidification, des études ont montré que la cristallisation colonnaire se déroule avec une désorientation de la direction moyenne des grains par rapport à la normale au front : les joints de grain sont inclinés vers l'amont du courant liquide (LESOULT [8]).

La croissance de cristaux non orientés au sein du liquide en surfusion caractérise la solidification équiaxe [7]. Les germes de ces cristaux sont constitués en grande partie de particules de solide telles que des bras de dendrites arrachés au front colonnaire, du fait du mouvement du liquide. Ces particules sont cependant susceptibles de refondre partiellement ou totalement du fait de leur transport dans des zones surchauffées. Il faut noter que la dissipation totale de la surchauffe et la présence d'une surfusion au sein du liquide (figure I-5), c'est-à-dire la réalisation des conditions nécessaires à la croissance de cristaux au sein du liquide, n'inhibe pas nécessairement la solidification basaltique ; en fait les deux types de solidification vont coexister jusqu'à ce que les cristaux équiaxes bloquent mécaniquement ou thermiquement la croissance des cristaux colonnaires.

Le dégagement de chaleur latente accompagnant la cristallisation équiaxe peut provoquer un réchauffement du liquide, phénomène appelé recalescence. Les cristaux formés sont entraînés par les courants de convection naturelle ou tombent au pied du lingot du fait de leur masse volumique supérieure à celle du liquide. Quand cette solidification est suffisamment avancée, les cristaux entrent progressivement en contact les uns avec les autres, on parle ainsi de la coalescence des cristaux équiaxes. A ce degré d'avancement de la solidification, le lingot ne présente plus de partie entièrement liquide ; partout coexistent solide et liquide. La fraction volumique locale de liquide correspond alors à la porosité locale de la zone pâteuse considérée comme un milieu poreux.

La solidification finale du lingot consiste en la prise en masse de la zone pâteuse centrale formée de cristaux équiaxes enchevêtrés. Il est à noter que la taille moyenne des dendrites est une fonction croissante du temps local de solidification (EDVARDSON, FREDRIKSSON et SVENSON [9], JAKOBI et SCHWERDTFEGER [10]). Ainsi l'espacement interdendritique moyen des parties se solidifiant en dernier sera plus grand que celui des parties se solidifiant rapidement.

L'acier solidifié se contracte au fur et à mesure de son refroidissement. Ceci est à l'origine du décollement du lingot de la surface de la lingotière. Une lame d'air de quelques millimètres d'épaisseur s'interpose donc entre les deux milieux, ralentissant l'échange thermique à cette interface. La chronologie de ce phénomène est incertaine, en particulier il ne se produit probablement pas subitement sur l'ensemble de la surface du lingot, il est possible que des parties décollées entrent à nouveau en contact avec le moule.

1.4 Ségrégations

La constitution interne d'un lingot de forge peut être étudiée par attaque chimique d'une coupe, de manière à mettre en évidence les différentes structures, ainsi que les zones dont la composition chimique diffère de la composition nominale. Plus précisément, les zones riches en soufre (élément dont le coefficient de partage est particulièrement faible) sont mises en évidence par une révélation des sulfures de manganèse en réalisant une empreinte Baumann.

1.4.1 Définition

La ségrégation est un écart en composition chimique par rapport à la composition de l'alliage à la coulée. La ségrégation la plus couramment étudiée est celle du carbone.

L'étendue de cet écart permet de distinguer trois types de ségrégations :

- les microségrégations, à l'échelle de la microstructure,
- les macroségrégations, à l'échelle du produit,
- les mésoségrégations, à une échelle intermédiaire.

L'intensité d'une ségrégation est évaluée en mesurant l'écart en % entre la composition locale et la composition initiale de l'acier : $(w_C - {}^0w_C) / {}^0w_C \cdot 100$.

1.4.2 Taux de ségrégation du carbone

Le taux de ségrégation du carbone, noté $\Delta C/C$, est défini de la manière suivante :

$$\Delta C/C = (w_{C \max} - w_{C \min}) / {}^0w_C \cdot 100 \quad (I-1)$$

avec $w_{C \max}$ titre massique maximum en carbone (hors masselotte)

$w_{C \min}$ titre massique minimum en carbone

Généralement, $w_{C \max}$ et $w_{C \min}$ sont mesurés sur l'axe de symétrie du lingot.

Ce taux de ségrégation du carbone a été largement étudiée par COMON, DELORME et BASTIEN [1]. Par une étude statistique portant sur 152 lingots, il a dégagé une corrélation permettant d'estimer $\Delta C/C$:

$$\Delta C/C \cdot 1/D = 2,81 + 4,31H/D + 28,9 \text{ Si}\% + 805,8 \text{ S}\% + 235,2 \text{ P}\% \\ - 9,2 \text{ Mo}\% - 38,2 \text{ V}\% \quad (I-2)$$

H est la hauteur du lingot et D son diamètre. Les domaines de validité de cette relation sont les suivants :

$0,1 < C\% < 0,54$
 $1,05 < H/D < 3,2$
 $0,11 < Si\% < 0,45$
 $0,004 < S\% < 0,033$
 $0,006 < P\% < 0,036$
 $0,015 < Mo\% < 1,28$
 $0 < V\% < 0,37$

Cette formule met en évidence l'influence de la taille du lingot sur la ségrégation : plus la masse à solidifier est importante, c'est-à-dire plus le temps de solidification est long, plus la ségrégation majeure sera intense. L'influence de la composition initiale de l'acier est plus complexe, certains éléments aggravant la ségrégation (Si, S), d'autres la limitant (Mo, V).

1.4.3 Description d'une empreinte Baumann

- Macroségrégations

L'empreinte Baumann d'un lingot de 35 tonnes de 1,3 m de diamètre et de composition 0,35 % C, 0,36 % Si, sans molybdène ni vanadium, est présentée figure I-6 (POKORNY A. et J. [11]). Cette empreinte met en évidence des ségrégations dont l'étendue atteint plusieurs dizaines de centimètres :

- une ségrégation négative près du pied du lingot,
- une ségrégation positive en masselotte et sous la masselotte,
- des ségrégations alternativement positives puis négatives sur l'axe du lingot, en forme de V, d'où leur nom de Vés ségrégés.

- Mesoségrégations

Deux types de ségrégation ont un développement moins étendu que les précédentes : les cernes et les veines sombres. Les cernes, ou franges de peau, sont constituées de bandes ségrégées, alternativement positives puis négatives, localisées près de la peau. Il ne s'agit pas de défauts susceptibles d'avoir des conséquences sur les propriétés des pièces de forge, mais seulement de particularités mineures dont la nature et l'origine peuvent être intéressantes dans le cadre général de l'étude (COMON et BASTIEN [12]).

Les veines sombres, encore appelées ségrégations en A, sont constituées de canaux de quelques millimètres de diamètre mais de plusieurs dizaines de centimètres de longueur, remplies de métal fortement enrichi en éléments d'alliage. Ces veines sont regroupées à environ mi-rayon, à la limite de la zone colonnaire, inclinées en V renversés dans le corps du lingot et en V droit dans la masselotte.

1.4.4 Revue des phénomènes impliqués dans la genèse des ségrégations

- Microségrégation

La ségrégation des éléments d'alliage est sous la dépendance directe des lois régissant la solidification de l'acier. La microségrégation, c'est-à-dire la ségrégation à l'échelle de la dendrite, est le phénomène à la base de toutes les hétérogénéités chimiques dans un lingot solidifié (à l'exception des inclusions exogènes bien évidemment). Ceci est d'autant plus vrai que l'intensité de la ségrégation en un élément i est directement reliée à la valeur du coefficient de partage $k_i^{s/l}$ de cet élément ($k_i^{s/l}$ désigne le coefficient de partage du constituant i : $k_i^{s/l} = w_i^{s*} / w_i^{l*}$; l'astérisque signifie que les compositions sont celles à l'interface des deux phases). Ainsi la ségrégation du soufre sera beaucoup plus intense que la ségrégation du silicium ($k_S^{s/l} = 0,05$ et $k_{Si}^{s/l} = 0,77$). Cependant la microségrégation seule est impuissante à expliquer le transport de soluté à longue distance, donc la genèse des macroségrégations. De même la formation de veines ségréguées, chemins préférentiels d'écoulement du liquide interdendritique, ne tire pas uniquement son origine de la différence de solubilité des éléments d'alliage entre solide et liquide.

Il est donc nécessaire de mettre en évidence, d'une part les phénomènes conduisant à la mise en mouvement aussi bien du liquide que du solide en formation, d'autre part les conséquences de ces mouvements.

- Mouvement du liquide

L'introduction du métal dans la lingotière confère au liquide, une fois le remplissage terminé, une vitesse résiduelle. Cette vitesse est certainement fonction du mode de coulée. Cependant ce champ de vitesse se dissipe rapidement à l'échelle du temps de solidification d'un lingot, et il paraît de fait légitime de considérer qu'il est sans effet sur la solidification ultérieure.

La densité de l'acier solide est supérieure à celle de l'acier liquide. La solidification se traduit donc par une diminution de volume de l'acier au fur et à mesure de sa solidification. La manifestation de ce phénomène est la formation de la retassure dans la masselotte. Ceci a également pour effet de mettre en mouvement le liquide résiduel vers le front de solidification, à une vitesse qui dépend de la vitesse d'avancée des isothermes. Dans le cas des gros lingots, FLEMINGS [3] évalue la vitesse du liquide due au retrait à environ 0,1 à 1 $\mu\text{m/s}$.

La solidification conduit à l'existence de gradients thermiques et solutaux dans le puits liquide et dans la zone pâteuse. Or la masse volumique de l'acier liquide dépend de la température et de la teneur en éléments d'alliage, à un instant donné, elle n'est donc pas

la même en tout point du lingot. Ceci se traduit par une mise en mouvement du liquide sous l'action du champ de gravité : c'est la convection naturelle. Au début, cette convection naturelle est essentiellement d'origine thermique, mais au fur et à mesure que la surchauffe se dissipe, les gradients thermiques s'atténuent, alors que les gradients solutaux se développent. Le moteur thermique est donc progressivement remplacé par un moteur solutal. Mais rien ne permet d'affirmer a priori que l'enrichissement progressif du liquide résiduel en éléments d'alliage va conduire - comme un simple refroidissement - à une augmentation de la masse volumique du liquide résiduel. En fait tout va dépendre de la composition initiale de l'acier. Pour les aciers au carbone, dans la plupart des cas, une fois franchi le liquidus, le liquide résiduel va s'alléger en se refroidissant notamment du fait de son enrichissement en carbone ($\partial\rho^l/\partial w_c < 0$), ainsi que l'a mis en évidence FLEMINGS [3]. Cette propriété remarquable peut aller jusqu'à provoquer une inversion progressive du sens de l'écoulement, aussi bien dans le puits liquide que dans la zone pâteuse, une fois les gradients thermiques atténués. La figure I-7 schématise les deux types d'écoulement possibles au sein d'un lingot de forge se solidifiant. Dans le premier cas le liquide interdendritique voit sa masse volumique augmenter au fur et à mesure du déroulement de la solidification, il est donc animé d'un mouvement descendant le long des parties froides. Par contre dans le second cas sa masse volumique diminue à mesure que la solidification progresse et le mouvement est l'inverse du précédent.

FLEMINGS [3] présente un calcul d'ordre de grandeur de la vitesse du liquide interdendritique (supposée monodimensionnelle) due à la convection naturelle. Pour ce faire il assimile la zone pâteuse d'un lingot de forge à un milieu poreux et il y applique la relation de Darcy, qui postule la proportionnalité entre la vitesse du fluide et la perméabilité du milieu :

$$\| \mathbf{V} \| = K/\mu \cdot \Delta p/\Delta y \quad (\text{I-3})$$

avec Δp différence de pression à travers une zone pâteuse de hauteur Δy . Δp trouve son origine dans l'écart de masse volumique $\Delta\rho$ entre liquide chaud dans le puits liquide et liquide froid dans la zone pâteuse :

$$\Delta p = \Delta\rho \cdot \Delta y \cdot g \quad (\text{I-4})$$

avec g gravité.

FLEMINGS prend une valeur globale de perméabilité très faible (10^{-12} m^2) et évalue alors la vitesse dans la zone pâteuse due à la convection naturelle à environ $0,1 \mu\text{m/s}$. Ce calcul l'amène à remarquer qu'elle est du même ordre de grandeur que celle évaluée pour le retrait à la solidification. Cependant la perméabilité de la zone pâteuse d'un lingot de

forge est certainement beaucoup plus élevée que celle qu'il a choisie. Une revue bibliographique sur le thème de la perméabilité des milieux poreux est présentée en annexe 1. Cette étude nous amène à penser que dans le cas des gros lingots la perméabilité de la zone pâteuse est de l'ordre de 10^{-9} à 10^{-8} m². La vitesse du fluide due à la convection naturelle est alors grande devant celle due au retrait à la solidification (de l'ordre de 0,1 mm/s à comparer à environ 0,1 à $1 \cdot 10^{-3}$ mm/s).

L'interaction entre la microségrégation et la convection provoque le transport à longue distance des éléments d'alliage, ce qui conduit à l'enrichissement progressif du puits liquide en soluté au fur et à mesure de la progression de la solidification. La ségrégation positive observée en masselotte tire son origine de ce phénomène car cette partie du lingot est la dernière à se solidifier.

En outre, le déroulement de la solidification est perturbé par la modification locale de la composition du liquide interdendritique. Considérons un élément de volume pâteux (figure I-8) dont le liquide est à la composition w^l_1 et le solide à la composition w^s_1 ; les deux phases sont supposées à l'équilibre thermodynamique, la température est donc la température de liquidus T_{liq} . Cet élément est traversé par du liquide dont la composition w^l_2 est différente de w^l_1 . Deux cas sont alors envisageables :

- le liquide entrant est moins chargé en soluté que le liquide initial, donc plus chaud (sauf exception la pente de liquidus d'un élément d'alliage est négative et son coefficient de partage inférieur à 1, figure I-9). Le mouvement a pour effet d'abaisser la composition moyenne du liquide dans l'élément de volume. Le maintien de l'équilibre thermodynamique va alors se traduire par une accélération de la solidification (figures I-8 et 9). Si aucun événement ultérieur ne vient contrecarrer cette tendance, le résultat final est un solide localement moins chargé en soluté que l'alliage de départ.
- le liquide entrant est plus riche en soluté que le liquide initial, donc plus froid, la composition moyenne dans l'élément de volume va alors augmenter. Cette fois le maintien de l'équilibre thermodynamique va se traduire par un ralentissement de la solidification, voire dans certains cas par une refusion (figures I-8 et 9). La conséquence finale est alors un solide plus chargé en soluté que l'alliage de départ.

La composition du liquide entrant est liée à l'orientation locale du champ de vitesse v^l relativement à la composante parallèle au flux de chaleur de la vitesse de l'isotherme $T = v_T$. En effet si le rapport v^l / v_T est négatif le liquide provient des parties chaudes du lingot, ce qui correspond au premier cas décrit. Par contre si le rapport est positif le liquide se déplace alors dans le même sens que les isothermes et provient des parties froides du lingot, ce qui correspond à la seconde possibilité. Dans ce cas l'écoulement du liquide interdendritique à travers le tissu dendritique prend un caractère instable par rapport à des perturbations locales diverses (LESOULT [13]). Enfin, d'après FLEMINGS et NEREO [14], quand le liquide va non seulement dans le même sens que

les isothermes, mais qu'en outre sa vitesse est supérieure à la vitesse de déplacement des isothermes, la refusion locale du squelette interdendritique peut se produire et entraîne, par exemple, la formation de veines sombres. Il convient cependant de remarquer que la refusion n'est pas a priori une condition nécessaire au développement de ce type de défauts, un simple ralentissement local de la solidification peut conduire à un résultat moins marqué mais de même nature.

L'interaction entre la microségrégation et la convection se manifeste également dans l'existence des veines sombres et également de ségrégations semblables, les freckles, présents dans certains produits solidifiés verticalement et par la base.

ASAI et MUCHI [15] ont étudié la formation de canaux ségrévés durant la solidification d'une solution aqueuse de chlorure d'ammonium (NH_4Cl), liquide présentant comme la plupart des aciers la propriété de s'alléger en se refroidissant une fois le liquidus franchi ($\partial\rho^l/\partial w_i^l < 0$) ; ils mettent en évidence le rôle initiateur d'une perturbation locale de la température dans la zone pâteuse sur l'apparition des canaux, quand le liquide interdendritique se déplace dans le même sens que les isothermes. Ils proposent de modifier la composition chimique initiale des alliages, de manière à ce qu'ils s'alourdissent en se refroidissant ($\partial\rho^l/\partial w_i^l > 0$) pour limiter la formation des canaux ségrévés.

SUZUKI et MIYAMOTO [16], à partir de travaux expérimentaux sur des lingots d'acier, attribuent la formation des veines sombres à cette même propriété du liquide interdendritique ($\partial\rho^l/\partial w_i^l < 0$), propriété se traduisant par un écoulement ascendant le long du front de solidification. En outre leurs observations les conduisent à proposer un critère thermique d'apparition des ségrégations en A pour un acier à 0,7 % de carbone. Ils constatent en effet que quand le produit de la vitesse de solidification R (en mm par minute) par la vitesse de refroidissement η (en °C par minute) dans la zone pâteuse est inférieur à une valeur critique, des canaux ségrévés se développent ; le critère proposé s'écrit :

$$R \cdot \eta < 8,75$$

Dans deux autres publications ([17] et [18]), SUZUKI et ses collaborateurs mettent en évidence le rôle bénéfique d'une faible teneur en silicium et d'une forte teneur en molybdène sur l'absence de ségrégations type veines sombres. Cependant ils n'attribuent pas ceci à une modification de la variation de la masse volumique du liquide résiduel avec la température, mais à une modification de la morphologie des dendrites. Ainsi, peu de silicium ou beaucoup de molybdène conduiraient à abaisser la perméabilité de la zone pâteuse (à fraction liquide constante), donc à limiter le mouvement du liquide interdendritique et ainsi à limiter la formation de canaux ségrévés.

SHAW, BEECH et HICKLEY [19] ont reproduit en laboratoire les conditions de solidification de la zone pâteuse d'un lingot de forge. Eux aussi mettent en évidence l'influence majeure de la composition de l'acier sur le développement des ségrégations en A, en particulier le rôle bénéfique d'un accroissement de la teneur en tungstène. Ils attribuent ceci à une modification de l'évolution de la masse volumique du liquide avec la température, ils n'envisagent pas une influence de la composition sur la morphologie des dendrites.

Ces considérations sur le développement des veines sombres mettent d'ores et déjà en évidence l'impact considérable de la composition initiale de l'alliage sur le mouvement du liquide interdendritique, donc sur le développement d'autres types de macro et mésoségrégations. Elles suggèrent également que la perméabilité de la zone pâteuse est un paramètre dont l'influence sur les ségrégations est à approfondir.

- Mouvements du solide

Par leur nature même, les cristaux équiaxes sont libres de tout mouvement. Ils peuvent donc, du fait de leur masse volumique supérieure à celle du liquide, sédimenter au pied du lingot. Ces cristaux sont moins alliés que le liquide qui leur a donné naissance - conséquence de la microségrégation - . Leur accumulation à la base du lingot est donc admise comme étant à l'origine de la ségrégation négative en pied de lingot, appelée pour cette raison cône de sédimentation (OLSSON, WEST et FREDRIKSSON [20]). Cependant, FREDRIKSSON [21] a observé de telles ségrégations négatives sur de petits lingots en alliage plomb-étain sans structure équiaxe, ce qui lui fait suggérer que la chute de cristaux n'est pas le seul phénomène en cause dans la genèse de cette macroségrégation, le mouvement du liquide interdendritique y prendrait également part.

Le liquide interdendritique est susceptible d'être chassé du squelette dendritique si la zone pâteuse est comprimée mécaniquement. De même, si elle est en traction, du liquide sera aspiré dans le réseau. Ce phénomène est la manifestation d'un comportement de la zone pâteuse analogue à celui d'une éponge. Ainsi la ségrégation axiale des produits longs en coulée continue s'explique de cette manière (LESOULT et SELLA[22]). Rien ne permet à l'heure actuelle de dire si des phénomènes mécaniques sont à l'origine de ségrégations dans les lingots de forge. Cependant, comme nous le démontrerons plus loin, le refroidissement en fin de solidification à coeur d'un lingot est plus rapide que le refroidissement en peau (phénomène identique à ce qui se produit en coulée continue) ; ceci est forcément à l'origine de contraintes mécaniques à coeur, c'est à dire dans les zones analogues à une éponge imprégnée de liquide résiduel. Les ségrégations en V tirent peut-être leur origine de ce phénomène, comme le suggèrent d'ailleurs SUZUKI et MIYAMOTO [23].

1.5 Résultats industriels publiés

Les publications issues du monde industriel et livrant des résultats expérimentaux sur la ségrégation des lingots de forge sont rares. Il convient donc encore une fois de mettre en relief les travaux de COMON, DELORME et BASTIEN [1] dont la formule de régression reste toujours valable et instructive.

La Commission des Communautés Européennes a favorisé la collaboration des aciéristes européens sur le thème des défauts dans les lingots de forge. Ainsi, Creusot-Loire, Cockrill et Thyssen ont publié en 1977 les résultats d'une investigation commune sur ce thème [24]. En particulier, l'utilisation de procédés de marquage par introduction de radiotraceurs dans les lingots à différents moments après la coulée, a permis de visualiser la progression de la solidification en fonction du temps dans deux lingots de 30 tonnes. On constate que la partie inférieure de la zone solidifiée présente d'abord une forme plate, puis une forme de cuvette, puis de cônes à pointes de plus en plus effilées ; l'explication de ce phénomène n'est pas connue. Des profils de répartition de carbone le long de l'axe pour deux lingots de Creusot-Loire sont également présentés. Le premier est un lingot d'acier au carbone de 1,3 m de diamètre, pesant 30 tonnes et d'analyse : 0,335 % C, 0,36 % Si, 0,69 Mn, 0,026 S, 0,014 P, 0,16 % Cu, 0,025 % Sn, 0,050 % As ; le second est un lingot de 2,15 m de diamètre, pesant 98 tonnes, en acier allié, à basses teneurs en impuretés et d'analyse : 0,245 % C, 0,095 % Si, 0,36 % Mn, 0,008 % S, 0,009 % P, 3,70 % Ni, 1,85 % Cr, 0,45 % Mo, 0,10 % V, 0,067 % Cu, 0,012 % Sn, 0,009 % As (pourcentages massiques). Le lingot de 30 tonnes montre une ségrégation négative en pied et un taux de ségrégation de 75 %, alors que le lingot de 98 tonnes est beaucoup plus homogène (taux de ségrégation de 28 %) ; cette remarquable santé interne peut être attribuée à la composition initiale de l'acier : basses teneurs en impuretés, faible teneur en silicium et présence de molybdène et de vanadium. Cockrill fait les mêmes observations sur des lingots de mêmes tonnages, en particulier le très faible taux de ségrégation d'un lingot de 98 tonnes. Thyssen, par l'étude de trois lingots de 105, 150 et 300 tonnes, montre que la ségrégation du carbone croît avec l'augmentation du poids du lingot et confirme que les ségrégations négatives affectent le pied et les positives les régions axiales en tête.

Enfin, pour chacun de ces lingots, les zones de peau ne présentent pas de macroségrégation marquée, c'est à environ 700 mm de la peau, à la limite des régions colonnaires, que se manifestent les différentes macro et mésoségrégations.

MAIDORN et BLIND [25] présentent les résultats d'investigations sur trois lingots, deux de 180 tonnes et un de 90 tonnes. En mesurant la teneur en carbone en de nombreux points de chacun des trois lingots, ils dressent la carte de composition en carbone pour chacun d'eux. En supposant que la composition en carbone mesurée

correspond à la température de solidus donnée par un diagramme de phase proche de celui de l'acier en question (hypothèse de l'équilibre thermodynamique complet), les isocarbones dans le lingot sont alors interprétées comme étant la représentation de la position du front de solidification finissante à différents instants. Les auteurs établissent ainsi une sorte de film de la solidification. Il est à noter que les fronts de solidification proposés ne montrent pas la même évolution que ceux présentés en [24]. Ceci est probablement dû au fait que dans le cas présent ils correspondent à une iso fraction solide de 1, alors que précédemment l'iso fraction solide révélée était celle correspondant à la limite de pénétration du traceur radioactif, dont la valeur est inconnue. Remarquons que SUZUKI et MIYAMOTO [16, 17] proposent 0,35 comme valeur de la fraction solide mise en évidence par introduction de sulfure de fer. MAIDORN et BLIND montrent également l'influence bénéfique des poudres exothermiques et d'un faible rapport H/D sur l'absence de porosités à coeur. Ils constatent aussi qu'une réduction de la teneur en soufre et en silicium limite fortement le développement des canaux ségrévés.

SAKUDA, OOI et MATSUNO [26] ont étudié la ségrégation de trois lingots de 40 tonnes, deux en acier allié et un en acier au carbone. Ils observent une ségrégation négative en pied, dont l'intensité dépend de la nuance et est la plus forte dans le cas du lingot en acier au carbone. Ils attribuent cette ségrégation négative à la sédimentation des cristaux équiaxes et pensent que la solidification équiaxe est plus tardive dans le cas des aciers alliés. La figure I-10 reproduit les cartes de ségrégation que ces auteurs ont mesuré dans les trois lingots en question. Cette figure montre l'existence dans le cas des deux lingots alliés d'une ségrégation négative dans la partie externe de la masselotte ; ces auteurs sont les seuls à mettre en évidence cette ségrégation.

Ce panorama des résultats industriels publiés recoupe les conclusions des chercheurs en ce qui concerne la forte corrélation entre la composition de l'alliage et la ségrégation. Il apporte également des informations sur l'évolution du front de solidification en fonction du temps dans différents lingots, ainsi que sur l'importance du masselottage sur les porosités à coeur.

1.6 Conclusion : objectifs généraux de l'étude

L'ensemble des données présentées dans cette première partie permet de dégager les grandes lignes du modèle à développer pour simuler la formation de ségrégations :

- une description la meilleure possible des aspects thermiques du problème,
- une prise en compte des aspects convectifs, aussi bien dans le puits liquide que dans la zone pâteuse,
- l'écriture d'un bilan de soluté pour évaluer le développement des macroségrégations.

En outre, les résultats présentés, tant industriels que de laboratoire, mettent en évidence la nécessité de prendre finement en compte deux aspects particuliers du problème :

- la composition initiale de l'acier,
- la perméabilité de la zone pâteuse.

Une mise en équation des différents phénomènes de transport contrôlant la solidification d'un lingot va maintenant être présentée dans la partie suivante.

2 Modélisation des phénomènes de transfert couplés lors de la solidification d'un alliage. Application à la solidification d'un lingot de forge.

L'objet de cette partie est la modélisation mathématique des phénomènes physiques décrits dans le premier chapitre de manière à être à même de prédire la position et l'intensité des macroségrégations et des veines sombres dans un lingot de forge. La modélisation doit donc prendre en compte les transferts couplés de chaleur, de masse et de quantité de mouvement dans le système lingot-lingotière.

Une difficulté majeure dans la description de ces transferts repose sur la complexité géométrique de l'interface liquide-solide et sur son déplacement au cours du temps. Au début de la solidification il est possible de distinguer trois zones dans le lingot :

- une zone totalement liquide appelée puits liquide,
- une zone où coexistent liquide et solide, appelée zone pâteuse,
- une zone constituée uniquement de solide.

La figure II-1 donne une idée de l'interface liquide-solide à ce stade de la solidification. Une fois la surchauffe évacuée et la solidification équiaxe mise en place, la première zone n'existe plus car le coeur du lingot est également pâteux.

Il paraît difficile dans ces conditions d'établir et de résoudre les équations de conservation dans chacune des phases, puis d'appliquer les conditions aux limites adéquates le long de l'interface liquide-solide. Il paraît donc plus raisonnable d'utiliser une technique de prise de moyenne des grandeurs à étudier dans les différentes phases en présence. En effet, une telle démarche permet de considérer l'acier se solidifiant non pas comme un système composite liquide-pâteux-solide, mais comme un milieu continu unique équivalent localement caractérisé par la fraction de solide formé. Cette technique de prise de moyenne doit s'effectuer sur un volume élémentaire dont l'échelle reste à définir, à partir de lois de conservation connus à l'échelle microscopique c'est à dire au niveau d'une dendrite.

2.1 Technique de mise en équation

2.1.1 Définition de l'échelle de grandeur du volume élémentaire considéré

Avant d'aborder la mise en équation proprement dite des phénomènes de transfert, il est nécessaire de préciser l'échelle du volume élémentaire qu'il faut considérer. Il est possible de définir d'une manière générale trois échelles :

- microscopique, c'est à dire de la taille d'une dendrite,

- macroscopique, c'est à dire de la taille d'une zone délimitée figure II-1 (puits liquide, zone pâteuse...),
 - intermédiaire entre les deux précédentes, c'est à dire de la taille de quelques dendrites.
- Lorsque l'on s'intéresse à une grandeur ϕ (fraction de phase, enthalpie d'une phase, composition chimique massique) dans un volume V défini ici par une sphère de rayon R_0 , la moyenne de cette grandeur ϕ notée $\langle\phi\rangle_{R_0}$ sur ce volume V s'exprime par :

$$\langle\phi\rangle_{R_0} = \frac{1}{V} \int_V \phi dV \quad (\text{II-1})$$

La représentation schématique de cette moyenne permet de distinguer trois domaines de variation en fonction du volume (figure II-2). Dans un volume appelé volume élémentaire représentatif (VER), dont la dimension correspond physiquement à la troisième échelle évoquée précédemment, la grandeur $\langle\phi\rangle_{R_0}$ est constante. Nous allons par conséquent travailler dans ce volume schématisé figure II-3.

2.1.2 Technique de prise de moyenne

La technique de prise de moyenne consiste à moyenniser chaque terme d'une équation de conservation, écrite à l'échelle microscopique sur le volume représentatif, ceci pour chaque phase considérée, sauf pour la quantité de mouvement où l'équation est moyennée seulement sur la phase liquide. L'équation générale traduisant le transfert d'une grandeur est alors obtenue en combinant l'équation du liquide à celle du solide. La grandeur résultant de la combinaison de ces deux équations est appelée grandeur de mélange (NI et BECKERMANN [27]). Cette technique permet d'obtenir à l'échelle du VER des équations de conservation sur chacune des phases. Le bilan aux interfaces combiné aux équations attachées à chaque phase permet d'obtenir une équation de conservation moyennée.

2.2 *Application à la solidification d'un lingot de forge*

L'écriture des équations à partir des grandeurs de mélange est grandement simplifiée si des hypothèses générales sont formulées dès à présent.

2.2.1 Hypothèses générales

I. Nature des écoulements.

- Ecoulement du liquide dans le puits liquide.

Le nombre de Rayleigh noté R_a caractérise le régime d'écoulement en convection naturelle thermique. Il est défini par la relation

$$Ra = \frac{|g| \beta \Delta T L^3}{\nu \alpha} \quad (\text{II-2})$$

avec $|g|$ norme du vecteur gravité ($10 \text{ m}^2/\text{s}$)

β coefficient d'expansion thermique de l'acier liquide ($8,9 \cdot 10^{-5} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$)

ΔT écart maximum de température dans le liquide

L dimension caractéristique du lingot, ici prise égale au rayon de la partie purement liquide.

ν viscosité cinématique de l'acier liquide ($6 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$)

α diffusivité thermique de l'acier liquide ($6 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$)

FLEMINGS [3] propose 10^8 comme valeur limite du nombre de Rayleigh au delà de laquelle l'écoulement présente un caractère nettement turbulent. Dans le cas d'un lingot de 1,8 m de diamètre (masse d'environ 60 tonnes) dont le front de solidification colonnaire a atteint le milieu du rayon, en prenant un écart maximum de température de 1°C , le nombre de Rayleigh prend la valeur $2,3 \cdot 10^7$. Ce calcul nous laisse supposer que, une fois la surchauffe dissipée et la solidification établie, l'écoulement dans le puits liquide peut être considéré comme laminaire.

- Ecoulement dans la zone pâteuse.

La zone pâteuse peut être assimilée à un milieu poreux dans lequel circule le liquide interdendritique. Les axes dendritiques primaires délimitent des canaux et l'écoulement se caractérise alors non plus par le nombre de Rayleigh mais par le nombre de Reynolds R_e calculé dans un canal (HOUBEURT [28]) :

$$Re = \frac{\rho |v| \delta}{\mu} \quad (\text{II-3})$$

avec δ diamètre du canal (de l'ordre du mm)

μ viscosité dynamique de l'acier ($4,2 \cdot 10^{-3} \text{ kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$)

ρ masse volumique du liquide ($7000 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$)

d'après Houpeurt l'écoulement est parfaitement laminaire tant que le nombre de Reynolds est inférieur à l'unité. DULLIEN [29] donne comme valeur de Reynolds critique la fourchette 0,1 à 75. Dans le cas d'une vitesse d'écoulement égale à $10 \text{ }\mu\text{m}/\text{s}$ dans une zone pâteuse à 10% de liquide ($g^l=0,1$) dans un canal de diamètre 1 mm, R_e prend la valeur 0,16. Il apparaît donc délicat de supposer a priori laminaire l'écoulement dans la zone pâteuse quelle que soit la vitesse du liquide, le caractère turbulent de

l'écoulement à l'intérieur d'un canal devra être pris en compte par le biais d'une extension à la formule classique de Darcy.

II. La masse volumique du solide est égale à celle du liquide, autrement dit le retrait à la solidification est négligeable. Un calcul d'ordre de grandeur présenté dans le chapitre précédent montre que, dans le cas d'un lingot de forge, la vitesse conférée au liquide par ce phénomène est négligeable devant la vitesse due à la convection naturelle. En outre la masse volumique du liquide est supposée constante exception faite du terme moteur de la convection naturelle (hypothèse de Boussinesq classique en mécanique des fluides).

III. La solidification est uniquement colonnaire, en d'autres termes la solidification équiaxe n'est pas prise en compte. La conséquence directe de cette hypothèse est que le solide reste immobile durant la solidification, seul le liquide est mis en mouvement par les forces volumiques puisque nous supposons qu'il n'y a aucun cristal libre de bouger.

IV. Les phases liquide et solide de l'alliage sont en équilibre thermodynamique local.

2.2.2 Mise en équation

Un certain nombre d'inconnues doivent être déterminées en tout point du système durant le déroulement de la solidification. Il est utile à ce niveau de préciser la nature de ces grandeurs.

La connaissance du transfert de chaleur nécessite la détermination de la température ainsi que de la fraction de phase liquide dans l'acier. L'enthalpie est une grandeur qui englobe chaleur latente et chaleur sensible, il est donc séduisant d'employer cette variable pour l'établissement de l'équation de conservation de l'énergie. Cependant cela nécessite quand même la connaissance d'une relation supplémentaire, entre la fraction liquide et la température du liquide. Cette relation s'obtient à l'aide de la thermodynamique du changement de phase. Le calcul du transfert de chaleur passe donc par l'utilisation d'une grandeur scalaire, l'enthalpie, ainsi que par l'écriture de deux équations, la conservation de l'énergie et la relation entre enthalpie et température.

La connaissance du transfert de quantité de mouvement nécessite le calcul du champ de vitesse du liquide (grandeur vectorielle) et du champ de pression dans le liquide (grandeur scalaire). Dans le cas d'un lingot de forge pour lequel les équations peuvent être écrites en coordonnées cylindriques, l'écriture de la conservation de quantité de

mouvement permet de dégager deux équations aux dérivées partielles : une pour la vitesse suivant l'axe du lingot et une pour la vitesse suivant son rayon. Une troisième équation portant sur la conservation globale de la masse peut également être obtenue. Les trois inconnues vitesse selon le rayon, vitesse suivant l'axe et pression sont alors calculables à l'aide de ces trois équations.

La connaissance du transfert de soluté nécessite la détermination, pour chaque élément d'alliage, de l'évolution du titre massique dans le liquide, ainsi que la connaissance du titre massique dans le solide qui s'est déjà déposé. La première inconnue est obtenue à l'aide d'une équation de conservation de soluté, la seconde grâce à une relation liant ces deux inconnues et dépendant du type de soluté (soit interstitiel, c'est à dire dont les atomes se répartissent dans les sites octaédriques ou tétraédriques du réseau cubique constitué par les atomes de fer, soit de substitution, c'est à dire dont les atomes remplacent les atomes de fer). Il est donc possible d'écrire deux équations pour déterminer les deux inconnues pour chaque élément d'alliage.

Le tableau suivant regroupe les grandeurs par type de transfert.

transfert	inconnues	équations
chaleur	température et fraction liquide ou enthalpie (chaleur sensible et chaleur latente)	conservation de l'énergie thermodynamique du changement de phase
quantité de mouvement	vitesse du liquide suivant le rayon vitesse du liquide suivant l'axe pression	conservation de la quantité de mouvement suivant l'axe et suivant le rayon conservation globale de la masse
soluté	titre massique en soluté dans le liquide et dans le solide	conservation globale de la masse conservation du soluté relation entre la composition dans le liquide et dans le solide

Notons que la conservation globale de la masse est implicitement utilisée en ce qui concerne le bilan de soluté et explicitement dans le cadre du transfert de quantité de mouvement, car l'écriture de la conservation de cette grandeur ne fournit que deux

relations pour trois inconnues. Finalement le dénombrement des inconnues et relations montre qu'il est possible d'écrire le nombre nécessaire et suffisant de relations pour décrire les transferts correspondant à la solidification d'un lingot de forge.

Les équations qui vont suivre sont présentées sans démonstration et sont tirées pour la plupart des travaux de BECKERMANN et VISKANTA [30].

- Système d'équations de transport

BECKERMANN et VISKANTA [30] présentent une modélisation de la convection naturelle thermique avec changement de phase dans un milieu poreux. La mise en équations des transferts thermiques et de quantité de mouvement qu'ils proposent est très facilement adaptable à la solidification d'un acier ; nous avons donc choisi leur manière d'écrire mathématiquement ces deux transferts, tout en sachant que d'autres jeux d'équations proposés par différents auteurs sont également très proches (BENNON et INCROPERA [31, 32], VOLLER, BRENT et PRAKASH [33], NANDAPURKAR, POIRIER, HEINRICH et FELLICELLI [34]). Une revue bibliographique de ces différentes approches est proposée en annexe 2.

- Transfert de quantité de mouvement

La prise de moyenne concernant cette grandeur est uniquement réalisée sur la phase liquide car le solide est supposé immobile. La vitesse qui apparaît dans l'équation qui va suivre est la vitesse moyenne débitante, encore appelée vitesse macroscopique et notée V . Dans le domaine poreux la vitesse réelle du fluide dans un canal d'écoulement est appelée vitesse de filtration, ou encore vitesse microscopique et notée v . En supposant que cette vitesse est la même dans chacun des canaux du réseau dendritique (hypothèse de Dupuit-Forchheimer (DULLIEN[28])), il existe alors une relation simple entre V et v :

$$V = v \cdot g^l \quad (\text{II-4})$$

Le frottement du liquide sur la phase solide de la zone pâteuse génère une contrainte qui a pour effet global de freiner le mouvement du liquide interdendritique. Les écoulements dans les milieux poreux sont l'illustration de ce phénomène largement étudiée dans le passé et à l'heure actuelle. Le pionnier dans le domaine est DARCY [35] qui, suite à des mesures d'écoulement de l'eau dans des terrains sédimentaires, a mis en évidence en 1856 que la vitesse du liquide était proportionnelle au gradient de la pression motrice \hat{p} ainsi qu'à la perméabilité K (en m^2) du milieu, et inversement proportionnelle à la viscosité dynamique μ , :

$$V = \hat{p} \cdot K/\mu \quad (\text{II-5})$$

D'autres chercheurs ont essayé de généraliser cette relation aux écoulements à fort nombre de Reynolds (c'est-à-dire turbulents) en la corrigeant par une extension connue sous le nom d'extension de Forchheimer.

L'équation de conservation de quantité de mouvement telle que la proposent BECKERMANN et VISKANTA [30] est la suivante :

$$\frac{1}{g^1} \rho_{\text{ref}} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + \frac{1}{g^1 g^2} \rho_{\text{ref}} (\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{V} = -\nabla \hat{p} + \frac{1}{g^1} \mu \nabla^2 \mathbf{V} - \left(\frac{\mu}{K} + \frac{c}{\sqrt{K}} \rho_{\text{ref}} |\mathbf{V}| \right) \mathbf{V} - \rho_{\text{ref}} \left[\beta_T (T - T_{\text{ref}}) + \sum_{i=1}^n \beta_i (w_i - w_{i\text{ref}}) \right] \mathbf{g} \quad (\text{II-6})$$

avec c coefficient d'inertie de l'extension de Forchheimer, $c = 0,075$ à $0,5$ (DULLIEN [28])

β_i coefficient d'expansion solutal du liquide dû à l'élément d'alliage i (en $\%^{-1}$), $\beta_i = -\frac{1}{\rho_{\text{ref}}} \left(\frac{\partial \rho}{\partial w_i} \right)_T = 1,43 \cdot 10^{-2}$ pour le carbone dans l'acier liquide

β_T coefficient d'expansion thermique de l'acier liquide (en K^{-1}),

$\beta_T = -\frac{1}{\rho_{\text{ref}}} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{w_i} = 8,93 \cdot 10^{-5}$ pour l'acier liquide

ρ_{ref} masse volumique de référence, connue à la température T_{ref} et à la composition $w_{i\text{ref}}$.

K perméabilité (en m^2).

La perméabilité K apparaît comme un terme majeur de cette équation. En effet quand la fraction liquide tend vers 1, c'est-à-dire quand le milieu est principalement composé de liquide, la perméabilité est forcément très grande et cette équation se réduit à celle de Navier-Stokes avec l'approximation de Boussinesq. Par contre quand la fraction liquide est inférieure à 1 la perméabilité diminue, jusqu'à ce que l'équation se réduise à l'équation de Darcy généralisée à l'aide de l'extension de Forchheimer. Le deuxième terme de l'expression de droite est souvent appelé extension de Brinkmann car ce chercheur a été le premier à proposer une équation de cette nature en généralisant l'équation de Darcy. Notons enfin que le dernier terme de droite traduit l'effet des forces volumiques sur le mouvement du liquide ; il prend en compte les variations de la masse volumique du liquide avec la température et la composition chimique.

En coordonnées cylindriques on obtient pour la composante radiale V_r et axiale V_z les deux relations suivantes :

$$\begin{aligned}
r\rho_{\text{ref}}\frac{\partial V_r}{\partial t} + \frac{r}{g^l}\rho_{\text{ref}}V_r\frac{\partial V_r}{\partial r} + \frac{r}{g^l}\rho_{\text{ref}}V_z\frac{\partial V_r}{\partial z} &= g^l\mu\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial V_r}{\partial r}\right) + \mu r g^l\frac{\partial^2 V_r}{\partial z^2} \\
&\quad - g^l\mu\frac{rV_r}{r^2} \\
- r g^l\frac{\partial P}{\partial r} - r g^l\left(\frac{\mu}{K} + \frac{c}{\sqrt{K}}\rho_{\text{ref}}|\mathbf{V}|\right)V_r &\quad (\text{II-7})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
r\rho_{\text{ref}}\frac{\partial V_z}{\partial t} + \frac{r}{g^l}\rho_{\text{ref}}V_r\frac{\partial V_z}{\partial r} + \frac{r}{g^l}\rho_{\text{ref}}V_z\frac{\partial V_z}{\partial z} &= g^l\mu\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial V_z}{\partial r}\right) + \mu r g^l\frac{\partial^2 V_z}{\partial z^2} \\
&\quad - r g^l\frac{\partial P}{\partial z} - r g^l\left(\frac{\mu}{K} + \frac{c}{\sqrt{K}}\rho_{\text{ref}}|\mathbf{V}|\right)V_z \\
- \rho_{\text{ref}}\left[\beta_T(T-T_{\text{ref}}) + \sum_{i=1}^n (w_i - w_{i\text{ref}})\right]g &\quad (\text{II-8})
\end{aligned}$$

- conservation de la masse

Les variations de masse volumique du liquide sont supposées négligeables (excepté pour le calcul des forces volumiques). En outre la masse volumique de l'acier liquide est supposée égale à celle de l'acier solide (deuxième hypothèse générale formulée plus haut). Dans ces conditions l'équation de conservation de la masse prend la forme :

$$\nabla \mathbf{V} = 0 \quad (\text{II-9})$$

- Transferts thermiques

L'équation de conservation de l'énergie proposée par BECKERMANN et VISKANTA [30] est adaptable à la solidification d'un alliage. Dans ce dernier cas elle s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho [g^l h^l + (1-g^l)h^s] + \nabla (\rho \mathbf{V} h^l) = \nabla (\lambda \nabla T) \quad (\text{II-10})$$

λ désigne la conductivité thermique moyenne du mélange liquide-solide :

$$\lambda = g^l \lambda^l + g^s \lambda^s \quad (\text{II-11})$$

h^α désigne l'enthalpie massique de la phase α . En supposant les capacités calorifiques de chacune des phases indépendantes de la température et en prenant comme état de référence enthalpie de la phase solide nulle à T_0 , les enthalpies de la phase solide et de la phase liquide prennent les expressions :

$$h^s = c_p^s (T - T_0) \quad (\text{II-12a})$$

$$h^l = c_p^l (T - T_0) + (c_p^s - c_p^l) (T_0 - T_f) + L \quad (\text{II-12b})$$

avec T_0 température de référence, T_f température de fusion du fer pur et L chaleur latente de changement de phase (J.kg^{-1}). La variable de mélange est l'enthalpie totale massique h :

$$h = g^l \cdot h^l + g^s \cdot h^s \quad (\text{II-13})$$

(Ceci en supposant que $f^\alpha = g^\alpha$)

L'équation (II-10) prend alors la forme :

$$\rho \frac{\partial h}{\partial t} + \nabla (\rho V h^l) = \nabla (\lambda \nabla T) \quad (\text{II-14})$$

Le deuxième terme du membre de gauche de cette équation traduit le transport par convection de l'enthalpie de la phase liquide. Si la vitesse du liquide est nulle, cette équation devient l'équation classique de la chaleur, ce qui est le cas dans les parties totalement solidifiées et dans les différentes parties du moule .

En coordonnées cylindriques cette équation s'écrit :

$$\rho r \frac{\partial h}{\partial t} + \rho r V_r \frac{\partial h^l}{\partial r} + \rho r V_z \frac{\partial h^l}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial r} (\lambda r \frac{\partial T}{\partial r}) + r \left(\frac{\partial}{\partial z} (\lambda \frac{\partial T}{\partial z}) \right) \quad (\text{II-15})$$

Notons que l'équation (II-14) met en jeu simultanément l'enthalpie et la température. Cette particularité se traduira lors de l'étape de discrétisation par l'emploi d'une relation permettant de passer de l'une à l'autre de ces deux variables. Cette relation nécessite la connaissance de la dérivée de la température en fonction de l'enthalpie. En ce qui concerne les matériaux n'étant pas le siège d'un changement de phase ou d'une réaction chimique, cette dérivée prend l'expression simple :

$$\frac{\partial T}{\partial h} = \frac{1}{c_p} \quad (\text{II-16})$$

Par contre pour l'acier il est indispensable de distinguer trois cas suivant la valeur de la fraction liquide g^l :

- si $g^l = 1$

$$\frac{\partial T}{\partial h} = \frac{1}{c_p^l} \quad (\text{II-17})$$

- si $1 < g^l < 0$

$$\frac{\partial T}{\partial h} = \frac{1}{\frac{dg^l}{dT} [(c_p^l - c_p^s) (T - T_{ref}) + L] + [g^l c_p^l + g^s c_p^s]} \quad (\text{II-18})$$

Le terme dg^l/dT sera explicité plus loin.

- si $g^l = 0$

$$\frac{\partial T}{\partial h} = \frac{1}{c_p^s} \quad (\text{II-19})$$

- Transfert de soluté

Au même titre que l'énergie, les éléments d'alliage sont transportés dans la phase liquide par diffusion et par convection. Cependant les coefficients de diffusion chimique α^i (en $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$) sont beaucoup plus faibles que la diffusivité thermique. FLEMINGS [3] propose $10^{-9} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ comme ordre de grandeur du coefficient de diffusion d'un élément d'alliage dans l'acier liquide, alors que la diffusivité thermique est d'environ $6 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$. Dans le cas d'un lingot de forge mettant 20 heures à se solidifier, l'ordre de grandeur du temps pendant lequel les parties les plus longues à changer de phase restent pâteux est environ 1 heure. Il est possible, connaissant ce temps, d'évaluer la distance parcourue par un atome de soluté diffusant dans le liquide. Cette valeur est donnée par la relation suivante : $d = (\alpha^i \cdot t)^{1/2} = (\alpha^i \cdot 3600)^{1/2}$, soit 1,9 mm. Cette valeur est négligeable devant l'étendue des macroségrégations observées dans un lingot de forge (de l'ordre de 0,1 à 1 m). L'équation générale décrivant le transfert de soluté a une forme analogue à l'équation (II-15) de transferts thermiques, avec le terme de diffusion en moins :

$$\frac{\partial \bar{w}_i}{\partial t} = - \mathbf{V} \cdot \nabla w_i^l \quad (\text{II-20})$$

avec la variable de mélange \bar{w}_i définie de la même manière que l'enthalpie totale h :

$$\bar{w}_i = g^l w_i^l + g^s w_i^s \quad (\text{II-21})$$

w_i^s est ici la composition moyenne du solide.

La combinaison des deux équations précédentes permet d'obtenir la relation suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} (g^l w_i^l) + \mathbf{V} \cdot \nabla w_i^l = - \frac{\partial}{\partial t} (g^s w_i^s) \quad (\text{II-22})$$

Le second terme du membre de gauche traduit le transfert de soluté par convection, le terme de droite correspond à l'évolution de la composition du liquide lors du dépôt de la phase solide.

L'évaluation de la quantité de soluté rejetée par la phase solide au fur et à mesure de la solidification nécessite la distinction de deux types d'éléments d'alliage :

- si l'élément d'alliage est du type interstitiel (cas du carbone) le soluté diffuse très rapidement dans le solide. L'hypothèse de l'équilibre thermodynamique local énoncée plus haut s'applique donc, à l'échelle du VER, sur l'ensemble des phases liquide et solide. Le terme de droite de l'équation (II-22) s'écrit donc :

$$\frac{\partial}{\partial t} (g^s w_i^s) = \frac{\partial}{\partial t} [(1-g^l) k_i^{s/l} w_i^l] \quad (\text{II-23})$$

L'équation (II-22) prend alors la forme :

$$\frac{\partial}{\partial t} (g^l w_i^l) + \mathbf{V} \nabla w_i^l = - \frac{\partial}{\partial t} [(1-g^l) k_i^{s/l} w_i^l] \quad (\text{II-24})$$

Notons que si les mouvements de convection affectent peu le soluté, l'équation (II-24) après intégration n'est autre que la règle du bras de levier :

$$w_i^l = \frac{0w_i^l}{k_i^{s/l} + (1 - k_i^{s/l})g^l} \quad (\text{II-25})$$

- si l'élément d'alliage est du type substitution (cas de tous les autres éléments considérés ici), le soluté ne diffuse pas dans le solide. L'hypothèse de l'équilibre thermodynamique local ne s'applique plus qu'à l'interface solide-liquide. On obtient donc la relation suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} (g^s w_i^s) = - k_i^{s/l} w_i^l \frac{\partial g^l}{\partial t} \quad (\text{II-26})$$

Soulignons que cette équation n'est strictement valable que pour $\frac{\partial g^l}{\partial t} < 0$

L'équation (II-22) s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t} (g^l w_i^l) + \mathbf{V} \nabla w_i^l = k_i^{s/l} w_i^l \frac{\partial g^l}{\partial t} \quad (\text{II-27})$$

Notons de même que si le transfert convectif du soluté est négligeable, l'équation (II-27) après intégration devient :

$$w_i^l = w_i^0 (g^l)^{k_i^{s/l}-1} \quad (\text{II-28})$$

Cette relation simplifiée est connue sous le nom de relation de Gulliver-Scheil. $k_i^{s/l}$ désigne le coefficient de partage du constituant i : $k_i^{s/l} = w_i^{s*} / w_i^{l*}$. L'astérisque signifie que les compositions sont celles à l'interface des deux phases.

Ainsi, une fois obtenus les champs de vitesse et de température, la composition du liquide est calculée à l'aide de l'équation (II-24) pour le carbone et (II-27) pour les autres éléments. La composition du solide est ensuite obtenue grâce à l'équation (II-22) et la composition moyenne grâce à l'équation (II-21).

- Couplage entre ces différents transferts

Les trois transferts décrits précédemment sont mutuellement dépendant les uns des autres. Leurs interactions sont représentées figure II-4. Les gradients thermiques et solutaux génèrent des forces volumiques mettant le liquide en mouvement, ces mouvements modifient les gradients. Le volet thermique de ce phénomène est pris en compte dans les équations (II-6) et (II-14). En effet le terme des forces volumiques de l'équation (II-6) contient la contribution de la thermique à la convection naturelle ; de plus le terme advectif de l'équation (II-14) représente la contribution du mouvement du liquide aux transferts thermiques. En outre les forces volumiques de l'équation (II-6) prennent également en compte la contribution du transfert de soluté à la convection naturelle. Par contre il reste encore à préciser la façon dont nous avons traité l'influence de la mécanique des fluides sur le transfert de soluté, ainsi que les influences mutuelles des transferts thermiques et solutaux à travers la thermodynamique du changement de phase.

La quatrième hypothèse énoncée au début de cette partie, à savoir le postulat selon lequel les phases liquide et solide sont localement à l'équilibre thermodynamique a déjà été mis en application pour l'écriture du transfert de soluté (équations (II-23) et (II-26)). Cette hypothèse permet en outre de dégager à l'échelle du VER une relation entre la température et les titres massiques en soluté w_i^l dans la zone pâteuse. En effet, en supposant que la température est égale à la température de liquidus locale, il vient, dans le cas où il est possible de se contenter d'une relation linéaire :

$$T = T_f + \sum_{i=1}^n m_i w_i^l \quad (\text{II-29})$$

T_f est la température de fusion du fer pur, m_i représente la pente de liquidus de l'élément i (en °C. %⁻¹).

L'utilisation de cette équation nécessite la connaissance de w_i^l . En toute rigueur il serait donc indispensable de résoudre les équations (II-24) et (II-27) (selon la nature du soluté). Cependant ceci nécessiterait des temps de calcul trop importants dans le cas d'un alliage à plus de deux constituants. C'est pourquoi une approche simplifiée a été adoptée. Pour le calcul du champ de vitesse et de température, nous supposons connu le chemin de solidification de l'alliage. Plus précisément ceci revient à se donner une loi de variation du titre massique en soluté i du liquide en fonction de la fraction volumique de phase liquide. Cette loi est obtenue en négligeant dans les équations (II-24) et (II-27) le terme convectif, c'est à dire en utilisant la règle du bras de levier pour le carbone (équation (II-25)), ainsi que la loi de Gulliver-Scheil pour les autres éléments (équation (II-28)). Il est alors possible de réécrire l'équation (II-29) sous la forme :

$$T = T_f + m_c \frac{{}^0w_c}{k_c^{s/l} + (1-k_c^{s/l})g^l} + \sum_{i=1}^{n-1} m_i {}^0w_i (g^l)^{k_i^M-1} \quad (\text{II-30})$$

Cette expression définit un chemin de solidification obtenu en négligeant les phénomènes convectifs.

De plus les forces volumiques solutales sont évaluées à partir des concentrations dans la phase liquide calculées à l'aide de la règle du bras de levier ou de la loi de Gulliver-Scheil.

La résolution des équations (II-6), (II-9), (II-14) et (II-30) permet d'estimer l'évolution des champs de vitesse, de température et de fraction volumique de la phase liquide au cours de la solidification. Les différentes grandeurs calculées souffrent des restrictions du modèle, à savoir principalement :

- pas de prise en compte de l'influence des phénomènes convectifs sur le chemin de solidification (les iso-fractions liquides sont des isothermes),
- pas de prise en compte de l'influence de la variation de la composition du puits liquide sur les mouvements convectifs.

Les couplages réellement pris en compte sont représentés figure II-5.

Notons enfin, concernant le transfert de soluté, que les équations (II-24) et (II-27) sont résolues une fois calculé le champ de vitesse et d'une manière totalement découplée des autres équations de transfert : les concentrations calculées ne sont pas "réinjectées" dans le modèle pour un nouveau calcul des champs de température et de vitesse. La partie spécifiquement algorithmique du couplage entre ces différents transferts est par ailleurs décrite en détail dans la troisième partie de ce mémoire.

Il est maintenant possible à partir de la relation (II-30) de calculer la dérivée de la fraction liquide par rapport à la température :

$$\frac{\partial g^l}{\partial T} = \frac{1}{m_c \frac{0w_c(k_c^{s/l}-1)}{(k_c^{s/l} + (1-k_c^{s/l})g^l)^2} + \sum_{i=1}^{n-1} (k_i^{s/l}-1) m_i 0w_i (g^l)^{k_i^{s/l}-2}} \quad (\text{II-31})$$

- Solutions initiales

Le problème à résoudre étant fonction du temps, il est nécessaire de préciser l'état initial du système lingot-lingotière à l'instant choisi comme origine du temps, à savoir la fin de l'étape de remplissage de la lingotière.

- acier

A l'heure actuelle l'influence du mode de remplissage sur la ségrégation des lingots de forge n'est pas complètement établie. Etant donné que la durée de cette étape est négligeable par rapport au temps total de solidification (environ 5 %), il apparaît raisonnable de ne pas la prendre en compte d'un point de vue thermique et hydrodynamique. Ceci revient à formuler trois nouvelles hypothèses :

- la perte de surchauffe associée au remplissage de la lingotière est faible,
- les gradients de température dans l'acier liquide se dissipent rapidement une fois le remplissage terminé,
- La vitesse résiduelle du liquide se dissipe elle aussi rapidement.

Le champ initial de vitesse dans l'acier sera donc pris uniforme et nul. La température de l'acier, également considérée comme uniforme, sera prise égale à la température de coulée.

Les différentes températures de contact (acier-fonte, acier-réfractaire, acier-poudre) seront initialisées aux températures théoriques de contact. Ces températures sont calculées en supposant que le contact initial est parfait, que les deux milieux en présence sont semi-infinis et que le régime est transitoire. La relation est la suivante :

$$T = \frac{E_{\text{acier}} T_{\text{acier}} + E' T'}{E_{\text{acier}} + E'} \quad (\text{II-32})$$

avec E_{acier} et E' effusivité de l'acier et du second matériau. L'effusivité est définie par la relation :

$$E = \sqrt{\lambda \rho c_p} \quad (\text{II-33})$$

avec λ conductivité thermique ($\text{W.m}^{-1}.\text{°C}^{-1}$), ρ masse volumique (kg.m^{-3}) et c_p capacité calorifique ($\text{J.kg}^{-1}.\text{°C}^{-1}$) du matériau considéré.

Enfin les concentrations en éléments d'alliage sont également supposées uniformes et égales aux teneurs définissant la nuance de l'acier choisi.

- autres matériaux

Les autres matériaux sont à l'état solide et le restent durant la solidification du lingot, leurs vitesses sont donc évidemment nulles. Les températures de la fonte et du réfractaire sont initialisées à la température ambiante (20°C), la température de la poudre à sa température de combustion le cas échéant.

- Conditions aux limites

- Transferts thermiques

Les conditions aux limites sur les transferts thermiques revêtent deux aspects :

- l'échange entre la lingotière et le milieu extérieur,
- l'échange entre l'acier et la lingotière.

La première condition est de type Newton :

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial n} = h(T - T_{\infty}) \quad (\text{II-34})$$

n vecteur sortant perpendiculaire à la surface d'échange.

La température extérieure de la lingotière évolue au cours du temps, en passant de la température ambiante à une valeur atteignant plusieurs centaines de °C. Au début l'échange radiatif est donc négligeable, mais il prend progressivement de l'importance comparativement à l'échange convectif. Le coefficient d'échange h ($\text{W.m}^{-2}.\text{°C}^{-1}$) dépend donc de la température extérieure de la lingotière suivant la relation :

$$h = \sigma (T^2 + T_{\infty}^2) (T + T_{\infty}) + h_{\text{conv}} \quad (\text{II-35})$$

avec σ constante de Stefan ($5,67 \cdot 10^{-8} \text{W.m}^{-2}.\text{K}^{-4}$) et h_{conv} coefficient de transfert due à la convection naturelle de l'air sur la paroi extérieure de la lingotière. Les températures doivent ici être exprimées en Kelvin.

Le coefficient d'échange dépend donc du cube de la température .

En ce qui concerne la seconde condition, nous avons déjà remarqué que le décollement du lingot affectait l'échange thermique entre l'acier et le moule. Plus précisément, tant que le contact entre le lingot et la lingotière est établi, ce contact est supposé parfait. Par contre, dès que le décollement se produit, l'échange est supposé radiatif, la condition est donc également du type Newton, avec un coefficient de transfert h qui suit la relation :

$$h = \varepsilon \sigma (T_{\text{acier}}^2 + T_{\text{fonte}}^2) (T_{\text{acier}} + T_{\text{fonte}}) \quad (\text{II-36})$$

avec ε émissivité globale, à savoir pour deux plans parallèles :

$$\varepsilon = \frac{1}{\frac{1}{\varepsilon_1} + \frac{1}{\varepsilon_2} - 1} \quad (\text{II-37})$$

où ε_1 et ε_2 sont les émissivités de l'acier et de la fonte.

- Autres transferts

En ce qui concerne la mécanique des fluides, la condition aux limites entre l'acier et la lingotière se caractérise par une vitesse nulle à la paroi.

La condition aux limites à appliquer aux concentrations en éléments d'alliage à la frontière acier-moule est du type flux nul, car il n'y a aucun échange de soluté entre l'acier et le moule :

$$\frac{\partial \bar{w}_i}{\partial n} = 0 \quad (\text{II-38})$$

La figure II-6 schématise le système lingot-lingotière, ainsi que les conditions aux limites et les solutions initiales retenues.

2.2.3 Calcul de la perméabilité de la zone pâteuse

L'annexe 1 regroupe une revue bibliographique sur le thème de la perméabilité des milieux poreux. Cette étude nous a conduit à exprimer la perméabilité sous la forme :

$$K = \frac{g^{l^3} \Lambda^2}{\pi^2 k' \tau^2 (1 - g^l)^2} \quad (\text{II-39})$$

avec Λ distance interdendritique moyenne de la zone pâteuse, k' constante de Kozeny (=5), τ tortuosité de la zone pâteuse (=2).

Cette relation est connue sous le nom de loi de Carman-Kozeny.

La distance interdendritique Λ est calculée à partir d'une estimation du temps local de solidification t_{sc} :

$$\Lambda = 10^{-6} M t_{sc}^N \quad (\text{II-40})$$

où M et N sont des constantes dépendant de l'alliage considéré [7].

CONCLUSION

La mise en équation des différents phénomènes de transfert impliqués dans la solidification d'un lingot de forge est maintenant réalisée, en vue de prédire la position et l'étendue des macroségrégations et des veines sombres. L'étape suivante consiste à résoudre ces équations aux dérivées partielles. Elle nécessitera la formulation de nouvelles hypothèses, la mise au point d'un algorithme de résolution, la discrétisation de ces équations et la validation du modèle numérique réalisé en résolvant un problème classique dont la solution exacte est connue.

3. Discrétisation et résolution des équations

Les équations aux dérivées partielles n'admettent une solution analytique que dans des cas particulièrement simples (linéarité, pas de couplage, géométries très simples...). Il est donc nécessaire de chercher une solution numérique approchée au système présenté précédemment en le discrétisant. Il existe principalement trois méthodes de discrétisation :

- la méthode des différences finies,
- la méthode des éléments finis,
- la méthode des volumes finis.

S'engager dans l'étude complète de ces techniques est hors de propos. Chacune d'elles est d'ailleurs abondamment décrite dans la littérature (HIRSCH [36]). Elle ont toutes en commun l'obtention d'un résultat constitué d'un ensemble fini de valeurs qui permet de reconstruire la forme de la solution. Après quelques précisions sur le concept de discrétisation, l'objet de cette troisième partie est l'application de la méthode des volumes finis (dont une description théorique sommaire figure en annexe 3) aux équations de transport dégagées dans la partie précédente. L'algorithme de résolution enchaînant les différents traitements numériques sera ensuite décrit précisément. La résolution d'un cas test permettant de valider le code de calcul est présentée en dernière partie de ce chapitre.

3.1 Concept de discrétisation

Rappelons que l'objet d'une discrétisation est le passage d'un système d'équations aux dérivées partielles à un système d'équations algébriques. L'obtention de ce système discrétisé nécessite un découpage du domaine d'étude. Une discrétisation de l'espace, associée à la façon de prendre en compte les variations des grandeurs inconnues entre deux points du maillage, permet le passage de la forme continue à la forme discrète. Une équation discrétisée est donc une équation algébrique reliant les valeurs des inconnues en différents points du maillage. Or l'équation discrétisée met en relation des propriétés attachées à des points voisins dans le maillage, de ce fait la valeur des inconnues en un point influence essentiellement celle des voisins immédiats.

Notons de plus que l'équation discrétisée va dépendre de la méthode de discrétisation, du maillage et de la loi locale de variation qui aura été retenue.

Enfin, une fois obtenue la forme algébrique, la résolution du système d'équations qui la constitue revêt une importance particulière du fait du temps de calcul nécessaire à ce traitement numérique. Il est donc utile de ne pas la négliger bien qu'elle se situe stricto sensu après l'étape de discrétisation.

3.2 Application de la méthode des volumes finis

Avant de rentrer dans le vif du sujet, il convient de justifier succinctement le choix de cette méthode. Chacune des trois méthodes citées précédemment a été employée dans des problèmes de transfert. Ainsi la méthode des différences finies a été largement utilisée dans le passé pour des calculs de mécanique des fluides (HIRT et al. [37]) et reste employée pour traiter des problèmes d'écoulement à frontière libre (JUN QING WANG [38]). De même plusieurs codes d'éléments finis disponibles dans le commerce disposent de modules de calcul de mécanique des fluides. Enfin la méthode aux volumes finis est spécifiquement employée dans les problèmes de transferts couplés ; les résultats de VOLLER [39] sont obtenus à l'aide du logiciel PHOENICS reposant sur cette technique, BENNON et INCROPERA [31, 32] ainsi que VISKANTA [40] travaillent eux aussi suivant la méthode des volumes finis ; en fait les spécialistes du domaine sont unanimes à prôner cette technique, pour les problèmes de transferts couplés. Son avantage réside d'une part dans sa simplicité de mise en oeuvre et d'autre part sur le traitement spécifique des termes convectifs, qui peuvent rendre oscillants les schémas numériques classiques obtenus en différences finies ou en éléments finis. Le choix s'est en fin de compte porté sur les volumes finis en particulier pour pouvoir maîtriser plus physiquement le couplage entre les équations. Une description théorique sommaire de cette technique figure en annexe 3.

3.2.1 Discretisation de l'espace

Il a déjà été remarqué qu'un lingot de forge présente une symétrie axiale. Ainsi le problème a priori tridimensionnel est ramené, via l'emploi de coordonnées cylindriques, à la résolution d'un système d'équations aux dérivées partielles ne dépendant que de deux variables d'espace. Le maillage à générer est donc bidimensionnel mais les volumes de contrôle sont en fait des cylindres concentriques. Ce type de maillage peut évidemment être employé à la résolution d'un problème bidimensionnel dont les équations ont été écrites dans un repère cartésien.

Par souci de simplification, les volumes de contrôle correspondant aux V.E.R. définis dans la deuxième partie doivent être des rectangles ; en effet, si ce sont plus généralement des quadrangles ou même des triangles, le calcul des bilans à établir autour de chaque volume devient alors plus complexe. Une maille élémentaire est représentée figure III-1. Autour du point P est bâti le volume de contrôle, de telle sorte que ses frontières est, nord, ouest et sud (respectivement e, n, w et s) soient situées à mi-distance du point P et de ses voisins est, nord, ouest et sud (respectivement E, N, W et S). Les dimensions du volume de contrôle sont notées Δx et Δy . Toutes les variables scalaires (enthalpie, titres massiques, pression) sont calculées au point P autour duquel est défini le volume. Par

contre les vitesses ne sont pas évaluées au même point. En effet dans l'environnement du volume de contrôle autour du point P, deux autres volumes décalés par rapport au précédent sont définis. Le premier est bâti autour du point e et permet le calcul de la vitesse horizontale à la face est du volume de la figure III-1 ; le second est défini à partir du point n et permet le calcul de la vitesse horizontale à la face nord (figure III-2). En étendant ce pavage aux deux autres points w et s, il est alors possible de calculer la vitesse sur chacune des faces du volume initial défini autour du point P. Les volumes permettant le calcul des vitesses apparaissent donc décalés par rapport aux volumes où sont calculés les grandeurs scalaires.

Il est à remarquer que si la grille n'est pas régulière, le point où est calculée l'inconnue n'est pas centré dans le volume. Cet inconvénient est sans conséquence si l'irrégularité de la grille n'est pas trop forte. Cette remarque nous amène à signaler qu'il existe deux manières de construire le maillage (PATANKAR [41]) :

- l'espace est découpé en volumes de contrôle, puis au centre de chaque volume est défini le point où sont calculées les variables scalaires, de même au milieu des faces de chaque volume sont définis les noeuds où sont calculées les vitesses.

- les points où sont calculés les variables scalaires sont d'abord définis, puis autour de ces points sont délimités les volumes de contrôle respectifs, de telle sorte que la frontière entre deux volumes soit située à mi-distance des points, ainsi que l'illustrent les figures III-1 et III-2.

Dans le cadre de notre travail nous avons appliqué la seconde technique. Ce choix était imposé dans la mesure où nous avons utilisé le mailleur quadrangle du code d'éléments finis MODULEF (BERNADOU et al. [42]), qui génère des maillages constitués de quadrangles dépourvus de points en leur centre. La seule possibilité était alors de procéder comme décrit en figures III-1 et III-2.

3.2.2 Discrétisation de la forme générale des équations de transport

Il convient de remarquer que toute équation de transport peut s'écrire d'une manière générale sous la forme :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla (\rho \mathbf{V}\phi) = \nabla (\Gamma \nabla \phi) + S \quad (\text{III-1})$$

ϕ est la grandeur transportée (enthalpie, titre massique, quantité de mouvement dans une direction). Le premier terme est un terme d'accumulation, le second correspond au transport de la grandeur ϕ par advection, le troisième est un terme diffusif et S est un

terme source. Pour chacune des grandeurs recherchées, les termes Γ et S sont regroupés dans le tableau suivant :

	Γ	S
enthalpie	λ conductivité thermique ($w.m^{-1}.K^{-1}$)	nul
titre massique	nul	carbone : $\frac{\partial}{\partial t} [(1-g^l) k_i^{s/l} w_i^l]$ autres éléments : $k_i^{s/l} w_i^l \frac{\partial g^l}{\partial t}$
Quantité de mouvement	μ viscosité dynamique ($kg.m^{-1}.s^{-1}$)	gradient de pression terme de Darcy forces volumiques $- g^l \nabla P - g^l \left(\frac{\mu}{K} + \frac{C}{\sqrt{K}} \rho V \right) V$ $- g^l \rho_{ref} \left[\beta_T (T - T_{ref}) + \sum_{i=1}^n \beta_i (w_i - w_{iref}) \right] g$

La forme générale de l'équation III-1 permet d'adopter une démarche unique commune aux trois grandeurs transportées. Cette démarche consiste à réaliser un bilan de chacune des grandeurs à calculer dans un volume de contrôle, en intégrant les équations de transport entre deux instants t_1 et t_2 sur le volume en question. Si la taille du volume est faible, c'est à dire si les valeurs des grandeurs évoluent peu d'un point de calcul à l'autre, il est alors possible de choisir arbitrairement et judicieusement des lois simples de variation de ces grandeurs entre deux points. Ces lois de variation locale sont utilisées pour estimer les termes des intégrales à calculer.

- discrétisation en temps.

la résolution numérique d'un problème transitoire s'effectue par pas de temps successifs. Le pas de temps à choisir n'a pas une valeur arbitraire. S'il est trop petit le temps de calcul risque de devenir prohibitif, s'il est trop grand des problèmes de

précision liés à la discrétisation peuvent apparaître. En outre, l'intégration sur l'espace peut se réaliser de deux manières :

- l'inconnue recherchée ϕ_p au pas de temps n est déterminée en fonction des valeurs ϕ_E , ϕ_N , ϕ_W et ϕ_S du pas de temps précédent $n-1$, donc déjà déterminées ; le schéma de discrétisation en temps est alors dit explicite.

- ϕ_p est déterminée en fonction des valeurs ϕ_E , ϕ_N , ϕ_W et ϕ_S du pas de temps n , donc elles mêmes inconnues ; le schéma de discrétisation en temps est alors dit implicite.

Le schéma explicite est séduisant car, à un pas de temps donné, il permet d'accéder directement à ϕ_p sans passer par une relation linéaire avec d'autres inconnues. Cependant son gros désavantage repose sur le fait que le pas de temps ne doit pas dépasser une valeur limite au delà de laquelle le processus numérique diverge (HIRSCH [36], PATANKAR [41]). Nous avons donc choisi le schéma de discrétisation en temps implicite.

- choix d'une loi de variation locale.

L'objet de ce paragraphe est de montrer succinctement l'importance du choix de la loi de variation locale (appelée interpolation) dans la résolution des équations de ce type, de manière à justifier le choix que nous avons fait, pour ensuite présenter la discrétisation des équations.

La question est la suivante : quelle loi simple permet de décrire avec la meilleure fidélité possible la variation de la grandeur ϕ entre le point P et ses premiers voisins ? Plaçons nous dans le cas très simple de la diffusion pure en régime permanent pour une géométrie unidirectionnelle, sans terme source et avec le terme Γ indépendant de ϕ :

$$\Gamma \frac{d^2\phi}{dx^2} = 0 \quad (\text{III-2})$$

L'intégration de l'équation (III-2) sur le volume de contrôle donne :

$$\left(\Gamma \frac{d\phi}{dx}\right)_e - \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx}\right)_w = 0 \quad (\text{III-3})$$

Si une loi de variation linéaire de ϕ est choisie entre le point P et ses voisins E et W , l'équation (III-3) s'écrit :

$$\Gamma \frac{\phi_E - \phi_P}{(\delta x)_e} - \Gamma \frac{\phi_P - \phi_W}{(\delta x)_w} = 0 \quad (\text{III-4})$$

L'équation (III-4) peut finalement se mettre sous la forme :

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W \quad (\text{III-5})$$

avec $a_E = \Gamma/(\delta x)_e$, $a_W = \Gamma/(\delta x)_w$ et $a_P = a_E + a_W$.

Il est légitime de supposer dans le cas présent une variation linéaire de la grandeur ϕ entre P et ses voisins, car il s'agit en fait de la solution exacte du problème ; en effet le laplacien d'un polynôme du premier degré est nul. Notons que dans ce cas la valeur de ϕ_e à la face est du volume est la moyenne des valeurs ϕ_E et ϕ_P . A l'échelle du V.E.R., cette relation reste satisfaisante dans le cas d'un problème avec terme source, non linéaire et instationnaire, mais toujours purement diffusif. Par contre, si la grandeur ϕ est également transportée par advection, ce mode d'évaluation de la grandeur ϕ entre deux points où elle est connue risque de conduire à des difficultés (PATANKAR [41]).

Considérons un problème stationnaire monodirectionnel linéaire et sans terme source, soit :

$$\rho V \frac{\partial \phi}{\partial x} = \Gamma \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \quad (\text{III-6a})$$

$$\phi(0) = \phi_0 \quad (\text{III-6b})$$

$$\phi(L) = \phi_L \quad (\text{III-6c})$$

La solution analytique est la suivante :

$$\frac{\phi(x) - \phi_L}{\phi_0 - \phi_L} = \frac{\exp(P \frac{x}{L}) - \exp(P)}{1 - \exp(P)} \quad (\text{III-7})$$

avec $P = \rho uL/\Gamma$, appelé nombre de Péclet (sans dimension, avec u composante suivant la direction x de la vitesse V). Il représente le rapport de l'énergie transportée par convection à l'énergie transportée par diffusion. La solution évolue de façon monotone en fonction du nombre de Péclet :

- si $P = 0$ on retrouve le cas de la diffusion pure (influence identique des voisins),
- si P tend vers plus l'infini, $\phi(x) = \phi_0$, la valeur de ϕ en $x = 0$ prévaut dans tout le domaine,
- si P tend vers moins l'infini, $\phi(x) = \phi_L$, la valeur de ϕ en $x = L$ prévaut dans tout le domaine.

Ce résultat peut se résumer en disant que la valeur en amont de l'écoulement prévaut dans tout le domaine lorsque la valeur absolue du nombre de Péclet (notée $\text{abs}(P)$) est grand devant l'unité. On dit aussi que le schéma est décentré. Il est donc clair que la valeur ϕ_e doit être évaluée en tenant compte de la valeur locale du nombre de Péclet, il n'est plus

possible de dire que ϕ_e est la moyenne de ϕ_P et ϕ_E . Ce résultat traduit le fait que le transport de la grandeur ϕ s'effectue simultanément par diffusion et par convection. Suivant l'importance relative de chacun de ces deux modes, nous sommes plus ou moins éloignés des trois cas extrêmes décrits plus haut.

Le problème représenté par l'équation (III-6-a), bien que simplifié à l'extrême, conserve l'essentiel de la difficulté numérique représenté par le choix judicieux de la loi de variation locale de la grandeur ϕ . A partir de cette solution analytique, PATANKAR [41] propose plusieurs lois locales et conseille non pas une loi exponentielle, coûteuse en temps de calcul, mais une loi de puissance qui approche avec une bonne précision le décentrement exponentiel, il s'agit du schéma puissance.

L'intégration de l'équation (III-6-a) sur un volume de contrôle s'écrit :

$$(\rho V)_e \phi_e - (\rho V)_w \phi_w = \Gamma_e \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e - \Gamma_w \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w \quad (\text{III-8})$$

L'objet est d'écrire cette équation sous la forme :

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W \quad (\text{III-5})$$

à l'aide d'une loi permettant d'évaluer ϕ aux faces est et ouest en fonction de ϕ_W , ϕ_P et ϕ_E .

En définissant $F_e = (\rho u)_e$ et $D_e = \Gamma_e / (\delta x)_e$, le nombre de Péclet à la face est du volume s'écrit :

$$P_e = F_e / D_e = [(\rho u)_e \cdot (\delta x)_e] / \Gamma_e \quad (\text{III-10})$$

Le schéma de puissance proposé par PATANKAR est le suivant :

$$\begin{aligned} \text{Si } P_e < -10 & \quad \text{alors } a_E / D_e = -P_e \\ \text{Si } -10 \leq P_e < 0 & \quad \text{alors } a_E / D_e = (1 + 0,1 P_e)^5 - P_e \\ \text{Si } 0 < P_e \leq 10 & \quad \text{alors } a_E / D_e = (1 - 0,1 P_e)^5 \\ \text{Si } P_e < 10 & \quad \text{alors } a_E / D_e = 0 \end{aligned} \quad (\text{III-11})$$

Ce schéma permet de retrouver les deux asymptotes de la solution exacte exponentielle et de retrouver le cas simple de diffusion pure quand le nombre de Péclet est nul. Il se met plus succinctement sous la forme :

$$a_E = D_e A[\text{abs}(P_e)] + \text{Max}[-F_e, 0] \quad (\text{III-12})$$

$$\text{avec } A[\text{abs}(P_e)] = \text{Max}[0, (1 - 0,1 \text{abs}(P_e))^5] \quad (\text{III-13})$$

L'intégration de l'équation (III-1) sur un volume de contrôle et le calcul des coefficients de la discrétisation figurent en annexe 3 et est par ailleurs largement détaillée par PATANKAR [41].

Notons que la prise en compte de la géométrie axiale se réalise très simplement : la variable discrétisée suivant le rayon n'est pas ϕ_r mais le produit $r.\phi_r$.

3.2.3 Application spécifique à l'équation de l'énergie

Ainsi que nous l'avons remarqué dans la deuxième partie de ce travail, l'équation de transfert de chaleur telle qu'elle est écrite (équation (II-14)) met en jeu deux variables, la température et l'enthalpie. Cette particularité nécessite donc à cette étape un traitement spécifique.

L'intégration de l'équation (II-14) sur un volume de contrôle dans le cas simple de diffusion pure monodimensionnelle s'écrit :

$$\int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \rho \frac{\partial h}{\partial t} dx dt = \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) dx dt \quad (\text{III-14})$$

L'expression discrétisée prend la forme :

$$a_p^0 h_p + (a_E + a_W) T_P = a_E T_E + a_W T_W + a_p^0 h_p^0 \quad (\text{III-15})$$

avec $a_p^0 = \rho \Delta x / \Delta t$, $a_E = \lambda_e / (\delta x)_e$, $a_W = \lambda_w / (\delta x)_w$

La dérivée dT/dh au pas de temps n peut être approchée par la formule (RAPPAZ [43]) :

$$T_P = T_P^* + \left(\frac{dT}{dh} \right)_P^* (h_P - h_P^*) \quad (\text{III-16})$$

h_P^* et T_P^* étant les dernières valeurs calculées de l'enthalpie et de la température au point P. La dérivée de la température par rapport à l'enthalpie se calcule simplement à l'aide des relations (II-18) et (II-31) déjà explicitées.

En substituant cette expression dans l'équation (III-15) on obtient :

$$\begin{aligned} a_p^0 h_p + (a_E + a_W) \left[T_P^* + \left(\frac{dT}{dh} \right)_P^* (h_P - h_P^*) \right] &= a_E \left[T_E^* + \left(\frac{dT}{dh} \right)_E^* (h_E - h_E^*) \right] \\ &+ a_W \left[T_W^* + \left(\frac{dT}{dh} \right)_W^* (h_W - h_W^*) \right] \end{aligned} \quad (\text{III-17})$$

Cette équation peut se mettre sous la forme :

$$a_P' \phi_P = a_E' \phi_E + a_W' \phi_W + b' \quad (\text{III-18})$$

avec :

$$a_E' = a_E \left(\frac{dT}{dh} \right)_E^*, a_W' = a_W \left(\frac{dT}{dh} \right)_W^*, a_P^0 = \frac{\rho \Delta x}{\Delta t}$$

$$b = a_E' T_E^* + a_W' T_W^* + (a_E + a_W) [T_P^* + \left(\frac{dT}{dh} \right)_P^* h_P] + a_P^0 h_P^0$$

$$a_P' = a_P^0 \left(\frac{dT}{dh} \right)_P^* (a_E + a_W)$$

L'équation III-18 ne comporte alors que l'enthalpie comme inconnue.

3.3 Algorithme de résolution

Après avoir détaillé la discrétisation des équations de transfert, l'étape suivante consiste à présenter l'algorithme permettant leur résolution séquentielle. En effet la résolution numérique d'un problème transitoire s'effectue par pas de temps successifs. De plus, à chaque pas de temps, l'existence de couplages schématisés figure II-5 nécessite une procédure particulière de résolution des transferts de chaleur et de quantité de mouvement ; ceci se réalise à l'aide d'un processus itératif appelé boucle de couplage utilisant le concept de "dernière valeur calculée". Les itérations issues de cette boucle sont appelées "micro-itérations". Enfin, la résolution de chaque système d'équations algébriques constitué de l'assemblage de tous des coefficients du type ϕ_P et ϕ_{nb} (nb signifiant "voisin" - neighbour en anglais) s'effectue également à l'aide d'un processus itératif. Le logiciel comporte donc trois boucles itératives imbriquées l'une dans l'autre, qui vont maintenant être détaillées en allant de la plus fondamentale à la plus élémentaire.

3.3.1 Boucle sur les pas de temps

Cette boucle enchaîne les calculs d'un pas de temps à un autre. Elle gère également le stockage des solutions en incrémentant à chaque pas de temps un temps de stockage, et en ordonnant la sauvegarde lorsqu'il dépasse le pas de stockage choisi.

3.3.2 Enchaînement des calculs au cours d'un pas de temps

Il existe plusieurs possibilités mises à la disposition de l'utilisateur. Il est tout d'abord possible de choisir entre un calcul en thermique seule et un calcul en couplage

avec la mécanique des fluides. Le fait de choisir le couplage introduit la boucle sur les micro-itérations qui sont nécessaires pour le traiter, car les valeurs calculées dépendent des deux équations. Pour chaque équation le logiciel utilise un coefficient de relaxation (PATANKAR [41]) pour améliorer la convergence et calcule un propre critère de convergence.

Si l'utilisateur ne choisit que la thermique pure il obtiendra aussi une boucle de micro-itération, qui résulte de l'emploi d'un coefficient de relaxation et d'un critère de convergence propre au calcul de la thermique.

Ensuite l'utilisateur peut choisir entre calculer et ne pas calculer les ségrégations. Le calcul des ségrégations est traité différemment du calcul de la thermique et de la mécanique des fluides, car il n'utilise pas la relaxation et n'a pas de critère de convergence.

Enfin il est également possible de choisir entre le calcul automatique en chaque point de la distance interdendritique, ou l'application à tous ces points d'une distance interdendritique par défaut.

La figure III-3 résume toutes ces possibilités. Elle illustre aussi les dépendances qui existent entre les équations par le choix des variables de calcul.

Le traitement du couplage, détaillé figure III-4, nécessite quelques précisions. La résolution se fait par enchaînement des calculs sur les dernières valeurs calculées. Cette méthode est particulièrement indiquée car pour résoudre une équation donnant les valeurs à l'instant $t + \Delta t$ il nous faut les valeurs à l'instant $t + \Delta t$ des autres équations ; il est donc bien nécessaire d'utiliser les dernières valeurs calculées.

Il convient enfin de dire quelques mots sur la résolution des champs couplés de vitesse et de pression. La connaissance du champ de pression est en effet nécessaire à la détermination du champ de vitesse, mais il n'existe pas de relation simple permettant de calculer la pression. Le champ de pression correct est celui qui permet de calculer le champ de vitesse vérifiant l'équation de conservation de la masse. Dans cet esprit, PATANKAR [41] propose la démarche suivante :

- résolution des équations discrétisées avec un champ de pression estimé, ce qui donne une estimation de la vitesse,
- modification des champs de pression et de vitesse pour que l'équation de conservation de la masse soit vérifiée,
- retour à la première étape si le champ de vitesse a été modifié.

Cet algorithme mis au point par PATANKAR est connu sous le nom de SIMPLE (Semi - Implicit Method for Pressure - Linked Equations). Il est par ailleurs décrit en détail par H. COMBEAU et A. JARDY [44].

3.3.3 Boucle de résolution des systèmes

Il existe trois types de méthodes numériques permettant de résoudre un système linéaire de n équations à n inconnues :

- les méthodes directes, mettant en oeuvre un nombre connu à l'avance d'opérations arithmétiques conduisant à la solution exacte,
- les méthodes indirectes, mettant en oeuvre un nombre inconnu à l'avance d'opérations arithmétiques,
- une méthode mixte, appelée ligne par ligne, combinaison des deux méthodes précédentes.

C'est cette troisième technique qui a été mise en oeuvre dans le cadre du présent travail, elle va donc maintenant être décrite succinctement.

Si la matrice constituée des coefficients du système linéaire est tri-diagonale, c'est-à-dire si seule les termes $a_{i,i-1}$, $a_{i,i}$, et $a_{i,i+1}$ sont non nuls, sa résolution directe est alors immédiate. Mais ce cas ne se présente que pour un problème à une dimension où un noeud a au plus deux voisins. L'idée de base de la méthode ligne par ligne est de ramener un problème multidimensionnel à une succession de problèmes monodimensionnels. Pour ce faire, le maillage est parcouru ligne après ligne (respectivement colonne après colonne), et pour chaque ligne seuls les coefficients des voisins appartenant aux lignes adjacentes sont calculés, donc pour chaque ligne une matrice tridiagonale est construite puis inversée. Le maillage est ainsi parcouru jusqu'à convergence. Cette méthode est donc directe dans la mesure où les matrices tridiagonales sont résolues directement, mais est également indirecte dans la mesure où le nombre d'opérations arithmétiques nécessaires n'est pas connu à l'avance. La méthode ligne par ligne présente l'avantage de nécessiter moins de temps de calcul que les méthodes directes utilisées en éléments finis. Une telle méthode n'est en fait utilisable que pour des maillages en quadrangles pour lesquels les voisins est, ouest, nord et sud de chaque point peuvent être clairement distingués.

3.4 *Validation*

L'utilisation d'un modèle informatique est fiable si l'outil numérique en question a été confronté à un problème classique dont la solution analytique est connue, ou encore à un cas-test employé par les spécialistes du domaine pour valider leurs propres développements. En effet la résolution de "cas d'école" est une aide précieuse pour la mise en évidence d'éventuelles erreurs de programmation, pour l'amélioration de l'algorithme ou encore pour l'évaluation des coefficients de relaxation. Il existe un cas-test classique employé pour la validation des logiciels à même de résoudre un problème

de convection naturelle sans changement de phase. Il a été mis au point par DE VAHL DAVIS [45, 46] et porte sur la convection naturelle de l'air.

3.4.1 Présentation du problème

Il s'agit de modéliser le couplage des transferts de chaleur et de quantité de mouvement dans une cavité fermée carrée contenant de l'air ; les parois verticales sont portées respectivement à une température froide T_c et à une température chaude T_h . Le calcul s'effectue en instationnaire, la température de l'air étant prise initialement à $(T_c+T_h)/2$, et est arrêté quand les champs n'évoluent plus. Enfin, la simulation est effectuée pour quatre nombres de Rayleigh différents (10^3 , 10^4 , 10^5 , 10^6).

Les paramètres du calcul sont les suivants :

$$\rho = 1 \text{ kg/m}^3$$

$$c_p = 1000 \text{ J/kg/K}$$

$$\alpha \text{ diffusivité thermique} = 2,5 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$$

$$\nu \text{ viscosité cinématique} = 1,775 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$$

$$L \text{ dimension du carré} = 0,1 \text{ m}$$

$$T_c - T_h = \Delta T = 1,37 \cdot 10^{-2} \text{ }^\circ\text{C pour Ra} = 10^3$$

$$= 1,37 \cdot 10^{-1} \text{ }^\circ\text{C pour Ra} = 10^4$$

$$= 1,37 \cdot 10^0 \text{ }^\circ\text{C pour Ra} = 10^5$$

$$= 1,37 \cdot 10^1 \text{ }^\circ\text{C pour Ra} = 10^6$$

3.4.2 Résultats

Les calculs pour les trois premiers nombres de Rayleigh ont été réalisés sur une grille 21X21 irrégulière (Figure III-5-a). Par contre cette discrétisation s'est avérée trop grossière pour le nombre de Rayleigh le plus élevé, probablement à cause du caractère "couche limite" de l'écoulement, une grille 37X37 irrégulière a donc été utilisée (Figure III-5-b).

Pour les trois premiers nombres de Rayleigh, les champs de vitesse et de température sont donnés à trois instants, 2 s, 10 s et 100 s (Figures III-6-a à f, III-7-a à f, III-8-a à f), pour le dernier nombre de Rayleigh à 2 s, 10 s et 25 s. (Figures III-9-a à f) ; en effet dans ce dernier cas l'état stationnaire est obtenu plus rapidement.

D'autre part, pour chaque solution stationnaire, différentes caractéristiques de l'écoulement sont calculées:

- vitesse horizontale maximum $V_{x\max}$ sur la droite verticale passant par le centre du système
- ordonnée de $V_{x\max}$

- vitesse verticale maximum $V_{y\max}$ sur la droite horizontale passant par le centre du système
- abscisse de $V_{y\max}$
- nombre de Nusselt minimum, maximum et moyen sur une des faces verticales.

Le nombre de Nusselt $Nu = hL/\lambda$ (h coefficient de transfert et λ conductivité) est ici calculé suivant la formule $Nu = \phi L/\lambda\Delta T$ avec $\phi = -\lambda dT/dx$ à une des parois verticales, dérivée estimée par un développement en série de Taylor sur trois points.

Toutes ces données sont rassemblées dans le tableau suivant avec les valeurs proposées par DE VAHL DAVIS.

Les résultats obtenus sont en très bon accord avec la littérature.

Enfin, l'évolution du nombre de Nusselt en fonction de l'ordonnée pour les deux faces verticales est donnée pour les Rayleigh de 10^5 et 10^6 (Figures III-10-a et b). La valeur du nombre de Nusselt est symétrique par rapport au centre du système, ce qui montre qualitativement que le modèle calcule les champs de vitesse et de température de manière correcte.

Les résultats numériques présentés et regroupés dans le tableau suivant sont donc en très bon accord avec ceux compilés par DE VAHL DAVIS et permettent d'utiliser avec confiance le code de calcul. Tel est l'objet de la quatrième partie de ce travail.

Ra		10^3	10^4	10^5	10^6
U max	D.V.D.	9,11 10^{-4} 8,86 10^{-4}	4 10^{-3} 4,00 10^{-3}	8,68 10^{-3} 9,12 10^{-3}	1,6 10^{-2} 1,62 10^{-2}
z	D.V.D.	8,13 10^{-2} 8,36 10^{-2}	8,23 10^{-2} 8,36 10^{-2}	8,55 10^{-2} 8,36 10^{-2}	8,5 10^{-2} 8,6 10^{-2}
V max	D.V.D.	9,24 10^{-4} 8,97 10^{-4}	4,9 10^{-3} 5,00 10^{-3}	1,7 10^{-2} 1,73 10^{-2}	5,484 10^{-2} 5,52 10^{-2}
x	D.V.D.	1,78 10^{-2} 1,64 10^{-2}	1,19 10^{-2} 1,17 10^{-2}	6,6 10^{-3} 7,99 10^{-3}	3,79 10^{-3} e : 3,33 10^{-3}
Nu min	D.V.D.	0,69 0,79	0,59 0,64	0,73 0,79	0,99 e : 1,21 ; w : 1,21
Nu max	D.V.D.	1,5 1,42	3,53 3,53	7,72 7,72	17,9 e : 17,2 ; w : 17,2
$\overline{\text{Nu}}$	D.V.D.	1,12 1,09	2,24 2,26	4,52 4,53	8,8 8,95

Comparaison entre les valeurs présentées par DE VAHL DAVIS (notées D. V. D.) et les résultats obtenus par le modèle.

Umax vitesse horizontale maximum

z ordonnée de la vitesse horizontale maximum

Vmax vitesse verticale maximum

x abscisse de la vitesse verticale maximum

Nu min nombre de Nusselt minimum

Nu max nombre de Nusselt maximum

$\overline{\text{Nu}}$ nombre de Nusselt moyen

4 Exploitation du modèle

Le modèle présenté s'est avéré fiable sur un cas-test relatif à la simulation des transferts de quantité de mouvement et d'énergie. Sa validité n'a cependant pas été démontrée en ce qui concerne le transfert de soluté, car il n'existe pas de cas d'école simple permettant de mesurer la fiabilité de cette partie du modèle. Les nombreux résultats de Creusot-Loire Industrie sur les macroségrégations dans les lingots vont donc maintenant être exploités de manière d'une part à évaluer la valeur du travail effectué, ceci à travers une étude de sensibilité aux différents paramètres, et d'autre part à prendre la mesure des efforts encore à réaliser pour atteindre l'objectif défini au début de ce travail.

4.1 Confrontation avec l'expérience de Creusot-Loire Industrie

4.1.1 Coulée expérimentale

La collaboration entre Creusot-Loire Industrie et le LSG2M ne comprend pas uniquement le développement d'un outil numérique à même de simuler la solidification d'un lingot de forge. L'instrumentation, la coulée et l'étude métallurgique d'un lingot expérimental était également au programme de cette étude. Ainsi, après une concertation sur la mise en oeuvre de cette expérience, les aciéristes de Creusot-Loire Industrie ont coulé un lingot instrumenté de 65 tonnes dont la géométrie est présentée Figure IV-1 ; le Centre de Recherche des Matériaux du Creusot (CRMC) a ensuite réalisé sur cette pièce une étude métallurgique et métallographique de grande ampleur ; enfin une analyse thermique différentielle (ATD) et une étude de trempe en cours de solidification dirigée (TSD) ont été menées au LSG2M sur des échantillons prélevés en cours de solidification (MAZET [47]). L'ensemble du programme d'étude dépasse largement le cadre du présent travail, mais y est cependant étroitement associé, de par sa nature même et de par la nécessité de disposer de résultats expérimentaux pour faire progresser la modélisation.

- Description de la coulée

65,6 tonnes d'acier ont été coulées en source dans une lingotière type 1800, ceci en 32 minutes. La température de coulée mesurée à l'Affinage en Poche Chauffante était de 1587 °C, et celle mesurée en cours de coulée était comprise entre 1550 et 1555 °C. La température de liquidus étant proche de 1507°C, la surchauffe était d'environ 50°C. La composition de l'acier (en % massique) était la suivante :

C	S	P	Si	Mn	Ni	Cr	Mo
0,223	0,007	0,0085	0,185	0,247	1,144	0,616	0,194

Dans le but de visualiser le front de solidification par empreinte Baumann à deux instants donnés, des introductions de soufre ont été réalisées :

- la première - de 10 kg environ - après que 50 tonnes d'acier aient été coulées dans la lingotière,
- la seconde - de 20 kg environ - 20 minutes après la coulée.

La teneur nominale en soufre après ces deux introductions est donc passée à 0,04% (teneur très élevée).

- Présentation des champs de vitesse et de température calculés

La simulation de la solidification a été réalisée sur le maillage présenté Figure IV-2, sur un peu plus de douze heures (733 minutes exactement). La solidification n'est pas totalement achevée dans la masselotte mais le calcul est tout de même interrompu, car le corps du lingot - partie qui nous intéresse - est totalement solide. Le temps de calcul sur une Vax station 3100 dépasse 80 heures.

Au début du calcul le pas de temps est de 5 secondes, puis il est progressivement augmenté pour atteindre 50 secondes.

Etant donné que la face supérieure du lingot est recouverte de poudres réfractaires, la condition aux limites idéale y serait l'adiabaticité, mais dans la pratique l'isolation n'est pas parfaite, un coefficient d'échange faible est donc imposé. Sur la face verticale de la lingotière le coefficient d'échange prend en compte le rayonnement. Enfin le contact lingotière-sol est décrit par un coefficient d'échange constant.

La solution initiale en température est prise un degré au dessus de la température de liquidus ($T_{liq} = 1508,08 \text{ °C}$), la température de la lingotière est égale à la température ambiante (20 °C), l'interface acier liquide-fonte est initialisée à 800 °C et le contact est supposé parfait (pas de décollement). La surchauffe est donc très faible (1 °C), ce qui se justifie par le fait qu'elle s'évanouit extrêmement rapidement dans la réalité, comme nous le montrerons plus loin ; il apparaît alors inutile de décrire finement ce qui se passe dans l'acier liquide durant les premières minutes d'un processus qui s'étale sur plus de 10 heures, ceci d'autant plus qu'une surchauffe élevée pose des problèmes numériques de convergence, augmentant considérablement un temps de calcul déjà élevé. Une étude de l'influence de la solution initiale sera par ailleurs présentée plus loin.

Les figures IV-3a à g représentent les champs de vitesse et de fractions liquides au fur et à mesure de la solidification. Nous avons choisi de présenter des iso-fractions liquides plutôt que des isothermes car les premières nous apparaissent plus représentatives de la progression de la zone pâteuse.

Au début de la solidification le champ de vitesse est du type couche limite au voisinage du front de solidification, puis ce caractère devient moins net au fur et à mesure de la progression de la solidification. Le champ de vitesse présente en outre une particularité très intéressante : au début le mouvement est descendant le long du front de solidification et ascendant sur l'axe, le liquide froid est donc plus dense que le liquide chaud, mais au fur et à mesure que la solidification progresse un mouvement ascendant prend naissance et se développe dans la zone pâteuse, alors que l'autre mouvement s'atténue, ceci une heure environ après le début de la solidification (figure IV-3c) ; finalement le mouvement s'inverse et devient ascendant le long de la "paroi froide" environ 3 heures après le début de la solidification (figure IV-3d). Ce phénomène tire son origine du comportement de la masse volumique du liquide une fois la température de liquidus franchie. Au début, les gradients

thermiques sont beaucoup plus importants que les gradients solutaux, le moteur de la convection naturelle est donc essentiellement thermique. Mais la progression de la solidification provoque un enrichissement du liquide en éléments d'alliage, des gradients solutaux se développent donc tandis que le moteur thermique s'atténue, le liquide devenant pratiquement isotherme. Le moteur de la convection naturelle devient par conséquent progressivement solutal. Or, cet acier étant relativement riche en éléments "légers" (carbone et silicium), et pauvre en élément "lourd" (molybdène), la microségrégation a pour effet de l'enrichir en éléments d'alliage qui diminuent sa densité. Le liquide résiduel s'allège donc au cours du refroidissement du métal, phénomène inverse à celui qui se produit au début de la solidification. Ceci est encore renforcé par le fait que le temps local de solidification augmente au fur et à mesure du processus, par conséquent la taille de la microstructure également ; ceci provoque une augmentation de la perméabilité, et favorise donc le mouvement dans la zone pâteuse qui finit par contrôler le mouvement du liquide dans l'ensemble de la pièce. Ce mouvement est d'ailleurs conforme à celui décrit qualitativement par Flemings (Figure I-5).

L'évolution des iso-fractions liquides est moins spectaculaire. Il faut noter que durant un temps très long il se maintient une zone centrale à très forte fraction liquide (supérieure à 0,99), ce qui n'est probablement pas le cas dans la réalité du fait de la solidification équiaxe.

- Présentation du champ calculé de concentration en carbone

Les figures IV-4a et b représentent les macroségrégations positives et négatives calculées.

On observe deux très fortes macroségrégations positives, une en masselotte, ce qui était prévisible étant donné qu'il s'agit de la dernière zone à se solidifier, et une à environ mi-hauteur du lingot et sur l'axe de symétrie. D'autre part, le calcul présente également deux macroségrégations négatives importantes, une contre le réfractaire dans la masselotte, et une autre au premier tiers de la hauteur du lingot.

La ségrégation négative en masselotte n'a jamais été mise en évidence par Creusot-Loire Industrie ; cependant cette ségrégation est similaire à celle présentée par SAKUDA, OOI et MATSUNO [26] et reproduite figure I-10. Il apparaît donc nécessaire de réaliser dans l'avenir une cartographie du carbone dans la masselotte du lingot expérimental de manière à élucider ce point important. En effet si ce lingot présente cette macroségrégation négative le code aura alors démontré une partie de ses potentialités. Concernant la ségrégation négative en pied, celle-ci est couramment observée dans la pratique. Ainsi que l'a remarqué FREDRIKSSON [21], la sédimentation de cristaux équiaxes en pied de lingot n'est donc pas le seul phénomène à l'origine de cette ségrégation ; en effet le modèle la prédit sans décrire la solidification équiaxe.

- Transfert de chaleur

Une partie des résultats tirés de l'expérimentation se rapporte à l'évolution de la température dans l'acier liquide et dans la lingotière.

- Evolution de la température dans le liquide et dans la zone pâteuse

Il était initialement prévu qu'un thermocouple soit présent dans le liquide, de manière à disposer d'un enregistrement en continu. Cependant ce capteur n'a pas fonctionné, des mesures ont donc été réalisées ponctuellement au fur et à mesure de la solidification. La figure IV-5 représente l'évolution au cours du temps de la température du liquide mesurée et calculée. Quatre constatations s'imposent :

- la surchauffe d'environ 50 °C disparaît très rapidement. En effet, au bout de quelques minutes les mesures donnent une température du liquide inférieure à la température de liquidus (environ 1507°C). Notons qu'il était jusqu'à présent classiquement admis que la surchauffe mettait beaucoup plus longtemps à se dissiper.
- la température mesurée semble osciller, tout en présentant une tendance générale à la décroissance. Ces oscillations peuvent être attribuées aux incertitudes de mesure.
- la température calculée n'évolue pratiquement pas durant le temps étudié, et reste à la température de liquidus théorique donnée par la formule (II-29).
- il existe un écart important entre mesure et calcul, ceci s'explique de deux manières. D'une part le modèle ne traduit pas l'enrichissement progressif du puits liquide en éléments d'alliage, la température de liquidus calculée est donc constante et une fois la surchauffe évacuée le puits liquide reste à cette température ; d'autre part la solidification équiaxe n'étant pas prise en compte les éventuels phénomènes de recalescence ne peuvent être traduits par le modèle.

Il est également intéressant d'étudier l'évolution calculée de la température au coeur du lingot ; la figure IV-6 représente les courbes de refroidissement à mi-hauteur et sur l'axe, ainsi qu'à 10 cm, 20 cm et 30 cm de l'axe. La température sur l'axe reste pratiquement constante pendant environ 10 heures, puis diminue rapidement ; la vitesse de refroidissement au centre du lingot devient alors plus importante que celle assez loin de l'axe. Ce phénomène très particulier a été mis en évidence en coulée continue, où il a pour conséquence de générer des déformations mécaniques en fin de solidification au coeur du produit ; ces déformations, en agissant sur la zone pâteuse centrale, mettent le liquide interdendritique en mouvement (comportement spongieux de la zone pâteuse), et sont à l'origine d'une macroségrégation [22]. Il est probable, comme nous l'avons déjà signalé dans la partie introductive de cette étude, que ce phénomène a des conséquences analogues sur la macroségrégation axiale du lingot. Prendre en compte un tel comportement dans le calcul du transfert de soluté est évidemment hors de propos, puisqu'il faudrait alors ajouter un calcul de mécanique du solide au modèle existant.

- Evolution de la température dans la lingotière

La figure IV-7 représente les emplacements où ont été placés des thermocouples dans le moule. Pour une hauteur donnée, deux sondes ont été disposées dans l'épaisseur de la lingotière, une près de la surface interne et une près de la surface externe. Seules les séries 15-16, 17-18 (corps du

lingot), et 23-24 (masselotte) ont fonctionné jusqu'au bout, leurs enregistrements seront donc exploités.

Les figures IV-8a à c représentent les températures mesurées et calculées pour chacune de ces séries. Les calculs ont été réalisés sur un maillage grossier en ce qui concerne le moule, ce qui est un facteur d'imprécision sur les résultats. Ce maillage a été rendu nécessaire par le fait que la discrétisation est très poussée dans l'acier, de manière à décrire le moins grossièrement possible les transferts s'y produisant, d'où l'impossibilité de mailler finement la lingotière pour des raisons de temps de calcul.

On constate un assez bon accord entre calcul et mesure pour la série 17-18, mais les résultats sont moins bons pour la série 13-14. Enfin, concernant les thermocouples placés dans la masselotte (série 23-24), l'évolution calculée est correcte, mais les valeurs expérimentales sont plus élevées que celles calculées ; dans le cas présent le maillage est trop grossier pour que le modèle donne des résultats très satisfaisants, car il n'y a que trois volumes de contrôle à ce niveau.

Finalement, compte tenu de l'imprécision relative de plusieurs facteurs, en particulier les caractéristiques thermophysiques respectives de la fonte et de l'acier supposées indépendantes de la température, et compte tenu de la discrétisation choisie, les résultats présentés apparaissent sinon satisfaisants tout au moins corrects, sous réserve d'une étude de sensibilité ultérieure.

- Transfert de soluté

Le suivi du transfert de soluté est le point le plus important de la partie expérimentale du programme de recherche. Il se divise en deux volets :

- mesure de l'évolution de la composition du liquide au fur et à mesure de la solidification, ceci par l'analyse chimique d'échantillons prélevés à différentes hauteurs sur l'axe du lingot et à intervalles de temps réguliers. La figure IV-9 donne la position approximative des lieux où ont été prélevés les échantillons.

- mesure sur une coupe du lingot de la composition chimique, de manière à établir des profils de composition sur l'axe (ségrégation axiale) et à proximité de l'axe.

- Evolution de la composition durant la solidification

Il existe une grande incertitude sur la position des points où ont été effectués les prélèvements, car il est très difficile de prendre du liquide à une position fixe et invariable. En effet, la technique même de prélèvement nécessite un tour de main spécial : suivant une chronologie invariable et jusqu'à ce que la solidification soit trop avancée pour prélever du métal, un petit creuset, luté hermétiquement par une capsule plus ou moins épaisse sensée se dissoudre au bout d'un temps connu, est introduit, par l'intermédiaire d'une verge d'acier, dans le coeur du lingot. On conçoit sans peine que cette technique - par ailleurs la seule possible - ne permette pas un contrôle précis de la position du prélèvement.

Les figures IV-10a à c représentent l'évolution de la teneur en carbone du prélèvement au cours du temps, à 0,5m, 1m et 1,5 m de profondeur, ainsi que l'évolution calculée de la composition moyenne

(moyenne pondérée par les fractions de phases liquide et solide) aux mêmes points. Nous avons choisi de montrer l'évolution moyenne calculée et non l'évolution du liquide calculée, car certains prélèvements contiennent des cristaux équiaxes, et la composition mesurée est alors plutôt la composition moyenne que la composition du liquide.

On constate un bon accord entre calcul et mesure, quelle que soit la profondeur du prélèvement. Ce résultat, qui surprend par sa concordance avec l'expérience, est extrêmement encourageant car il permet d'affirmer, malgré toutes les hypothèses simplificatrices émaillant le modèle, que le transfert de soluté est bien décrit au moins tant que la fraction liquide reste forte, c'est à dire tant que des prélèvements ont pu être réalisés. Les trois courbes calculées ont la caractéristique de ne pas présenter d'écart à la composition initiale pendant environ les deux premières heures de solidification. Ceci correspond probablement au fait que, durant cette période, les mouvements dans la zone pâteuse sont très faibles, le puits liquide ne s'enrichit donc pas. Une étude de sensibilité à la perméabilité de la zone pâteuse présentée plus bas montre que le calcul de la perméabilité tel qu'il est réalisé pour cet exemple conduit à des compositions calculées les plus proches des compositions mesurées.

Nous avons déjà eu l'occasion de mettre en relief le rôle supposé de la perméabilité sur les transferts de soluté et de quantité de mouvement dans un lingot se solidifiant. Le modèle numérique va maintenant nous permettre d'approfondir cette question. Dans le calcul présenté précédemment, la perméabilité de la zone pâteuse était calculée suivant la formule (II-39), en estimant la taille moyenne de la microstructure à partir du temps local de solidification grâce à la relation (II-40). L'espacement interdendritique moyen était de l'ordre du millimètre. Un autre calcul a été réalisé en prenant une taille moyenne de microstructure 10 fois plus faible. Enfin, un troisième calcul a été effectué, cette fois en gardant l'espacement interdendritique initial mais en divisant arbitrairement par 20 la valeur de la perméabilité dans la direction axiale, de manière à simuler grossièrement l'anisotropie de la zone pâteuse basaltique. Cette approximation est discutable dans la mesure où, dans la réalité, l'ensemble du lingot n'est pas à texture colonnaire, puisqu'il existe une zone centrale équiaxe isotrope, et dans la mesure où le facteur 20 est arbitraire. Cependant le résultat donnera tout de même une idée de l'influence de l'anisotropie de perméabilité.

Les figures IV-11a à c représentent les champs de vitesse ainsi que la position de la zone pâteuse au temps 3 heures 53 minutes (14000 secondes). La zone pâteuse est peu affectée par les modifications de perméabilité. L'allure du champ de vitesse n'est pas modifiée, mais la vitesse maximum est divisée par 10 dans le cas de la perméabilité anisotrope. Enfin, les mouvements dans la zone pâteuse sont fortement atténués par une faible perméabilité.

Les figures IV-12a à c représentent l'influence de la perméabilité sur le calcul de l'évolution de la teneur en carbone. Les compositions obtenues suivant une perméabilité calculée avec un faible espacement interdendritique sont très éloignées de l'expérience ; ceci montre à l'évidence que cette perméabilité est trop faible, car en inhibant à l'excès le mouvement dans la zone pâteuse, la partie centrale n'est plus à même de s'enrichir en éléments d'alliage. De même, le calcul suivant une

perméabilité anisotrope conduit à une estimation de l'enrichissement du liquide trop faible, comparativement à la mesure. Ce résultat n'a d'ailleurs rien de surprenant car, dans la réalité, la perméabilité est anisotrope uniquement dans la partie colonnaire du lingot, alors que le calcul présenté l'a imposé anisotrope dans l'ensemble, bloquant ainsi excessivement le mouvement dans le milieu poreux.

La valeur du coefficient de partage du carbone est un paramètre important. En particulier, cette valeur change suivant la phase solide qui se forme (dépôt de ferrite ou dépôt d'austénite), et pour chacune de ces phases il est fonction de la température. Le premier calcul présenté a été effectué avec un coefficient de partage de 0,11. Un autre calcul a été réalisé avec une valeur de 0,32. Les figures IV-13a à c permettent de comparer les évolutions de compositions expérimentales avec celle obtenues dans ce cas. On constate un moins bon accord qu'avec une valeur de 0,11 (figures IV-8a à c). Par ailleurs, l'enrichissement du liquide est plus faible par rapport aux résultats issus de l'autre calcul, ce qui était prévisible, car augmenter le coefficient de partage revient à diminuer l'enrichissement du liquide résiduel.

Un calcul identique à celui présenté en 4.1.1 a été réalisé sur un maillage plus grossier représenté Figure IV-14. Le nombre de volumes de contrôle dans l'acier y est deux fois plus faible. Les évolutions de composition sont représentées sur les figures IV-15a à c. Dans l'ensemble ces résultats restent assez proches de l'expérience, avec cependant une tendance à surévaluer la composition. Ceci semble mettre en évidence le fait qu'un maillage particulièrement fin tel que celui de la figure IV-2 ne tend pas à fournir des résultats considérablement plus précis que ceux obtenus à partir du présent maillage. Pour s'en assurer, il serait utile de réaliser un nouveau calcul sur un maillage encore plus fin que celui de la figure IV-2, mais le temps de calcul nécessaire à une telle simulation est trop important.

Les calculs présentés jusqu'à présent ne prenaient pas en compte de décollement du lingot. En vue de mettre en évidence l'éventuelle incidence de ce phénomène sur le transport de soluté, un calcul a été réalisé en supposant que la lame d'air entre l'acier et le moule apparaît sur la face verticale du cylindre au temps $t=2000$ s. Les figures IV-16a à c représentent le calcul de l'évolution de la teneur en carbone, avec et sans prise en compte du décollement. On constate que ce phénomène n'a pas d'influence sur la composition du liquide.

- Ségrégation axiale

La composition en carbone sur l'axe du lingot est un critère couramment employé par les métallurgistes pour mesurer l'étendue de la ségrégation d'un lingot. On la représente sous forme d'une courbe avec en abscisse l'écart normalisé en composition $(^0w_c - w_c)/^0w_c$ noté $\Delta C/C$, et en ordonnée la hauteur normalisée du lingot H/H_{max} .

La figure IV-17 représente d'une part la ségrégation sur l'axe du lingot expérimental, et d'autre part cette même ségrégation mais moyennée sur un rayon de 20 cm ; ces deux mesures sont pratiquement confondues. Cette figure illustre le fait que la ségrégation axiale expérimentale varie peu de part et d'autre de l'axe, à condition bien sûr de ne pas s'en éloigner trop.

La figure IV-18 représente les mêmes courbes, mais cette fois calculées par le modèle. Il est constaté un écart important entre la ségrégation calculée sur l'axe et la ségrégation moyennée. Ce résultat n'est pas évident à interpréter ; il est difficile de faire la part entre une discrétisation trop grossière au voisinage de l'axe, et des imperfections dans le modèle physique.

La figure IV-19 nous permet de comparer les ségrégations axiales calculées et mesurées sans prise de moyenne. On constate globalement un écart très important entre expérience et calcul. De plus, deux remarques s'imposent :

- le lingot expérimental présente une ségrégation négative jusqu'à environ 50% de sa hauteur. Il est à noter que la ségrégation axiale d'un lingot de 30 tonnes présenté par COMON [1] est beaucoup moins étendue. Le calcul montre également une ségrégation négative en pied, mais plus localisée ; ce résultat est a priori surprenant car il est communément admis que cette ségrégation est due à l'accumulation de cristaux équiaxes, phénomène qui n'est pas pris en compte dans le modèle. Cependant nous avons déjà signalé que FREDRIKSSON [21] a observé des macroségrégations négatives en pied sur de petits lingots en alliage plomb-étain sans structure équiaxe.

- le calcul prévoit le développement d'une ségrégation fortement positive à mi-hauteur, qui disparaît presque au niveau du joint de masselotte, pour finalement reprendre de l'ampleur dans la masselotte. Ce résultat est très différent de l'expérience en ce qui concerne la ségrégation dans le corps du lingot, par contre la ségrégation positive en masselotte est en accord avec la mesure.

La figure IV-20 présente les mêmes résultats, mais cette fois suivant une prise de moyenne. On constate que la ségrégation positive calculée a fortement régressée, ce qui fait que l'écart entre calcul et mesure est moins important.

La figure IV-21 permet de mesurer l'influence de la perméabilité de la zone pâteuse sur la ségrégation axiale. La ségrégation correspondant au faible espacement interdendritique est pratiquement nulle, et celle correspondant à un milieu poreux anisotrope est également très faible ; ceci est l'illustration de l'importance de ce paramètre sur la carte de composition dans le lingot en fin de solidification, et justifie l'attention particulière portée au calcul de la perméabilité.

Le coefficient de partage du carbone a également une influence sur le calcul de la ségrégation axiale, comme le montre la figure IV-22. En effet, augmenter le coefficient de partage du carbone limite l'étendue des ségrégations positive et négative ; ce résultat va d'ailleurs de paire avec celui présenté précédemment concernant l'enrichissement du liquide résiduel. Il est donc très important de disposer de données physiques les plus précises possibles quant à la distribution des éléments d'alliage entre liquide et solide.

De même que pour l'enrichissement du puits liquide, le calcul effectué sur le maillage plus grossier ne donne pas une ségrégation axiale très différente de celle obtenue grâce au maillage fin. Toutefois, ainsi que le montre la figure IV-23, la tendance est encore à la surestimation de la ségrégation.

La figure IV-24 illustre l'incidence du décollement du lingot sur le calcul de la ségrégation axiale. On constate une légère diminution de l'intensité de la ségrégation, cependant cette influence demeure très faible. Il n'apparaît donc pas nécessaire de prendre en considération ce phénomène, comme nous le suggéraient d'ailleurs les figures IV-16a à c mettant en évidence l'absence d'influence du décollement sur l'évolution de la teneur du liquide en carbone.

- Veines sombres

Il n'est actuellement pas possible de simuler la formation de canaux ségrévés, car la physique du phénomène n'est pas encore totalement élucidée. Cependant nous proposons une approche simplificatrice pour tenter de délimiter les parties du lingot où ces veines sont susceptibles de se développer.

Nous avons déjà signalé dans la partie introductive de ce travail que la formation de canaux ségrévés était attribuée à un phénomène de refusion locale du réseau dendritique. Cette refusion est possible si le fluide se déplace dans le même sens que les isothermes [13]. Il est également indispensable que cette condition nécessaire soit vérifiée durant un temps minimum dont la valeur n'est pas connue. Connaissant l'écart entre la composition du liquide calculée par le modèle et la composition donnée par la loi de Scheil ou la règle du bras de levier, il est alors possible de déterminer à chaque pas de temps les zones ségrévées positivement ; par conséquent le temps total pendant lequel se développe cette tendance à la ségrégation positive est également déterminable. Il est alors possible de délimiter les zones où une ségrégation positive s'est développée pendant un temps donné, ce que représente la figure IV-25. La partie centrale du lingot est évidemment incluse dans ce domaine, mais également une partie relativement excentrée. Or l'empreinte Baumann présentée figure I-4 montre que les veines sombres sont localisées dans une enveloppe analogue. La position de la limite interne de cette enveloppe a donc été relevée sur la coupe axiale du lingot expérimental, et est comparée figure IV-26 à la position relevée sur la figure précédente. La position calculée est proche de la position mesurée ; ce résultat est encourageant dans la mesure où l'outil numérique semble à même de prévoir, avec une certaine précision, la position des défauts les plus rédhibitoires d'un lingot de forge.

4.1.2 Profils de ségrégation d'un lingot de 110 tonnes

Il a également été possible de comparer résultats numériques et données expérimentales sur un lingot de 110 tonnes, étudié dans le passé par le CRMC.

La figure IV-27 représente la ségrégation axiale mesurée et calculée. Ce lingot de 110 tonnes montre une homogénéité interne excellente. Par contre, la ségrégation calculée a la même allure que celle obtenue pour le lingot expérimental. On constate donc un écart important entre mesure et calcul.

La figure IV-28 représente des profils mesurés et calculés, mais cette fois à 20 cm et à 30 cm de l'axe. Dans ce cas les calculs sont relativement proches de l'expérience ; en particulier, la ségrégation négative en pied, bien que surestimée dans son intensité, est évaluée précisément en son étendue.

Ces résultats tendent à montrer que le modèle simule correctement les phénomènes de transfert dans le corps du lingot, mais que la description physique ou numérique est imparfaite sur l'axe.

4.1.3 Relation de COMON

Le taux de ségrégation du lingot expérimental de 65 tonnes tel que le définit COMON, c'est à dire hors masselotte, est d'environ 100% et la formule de COMON prévoit 90%. Cette ségrégation très élevée s'explique partiellement par la forte concentration en soufre. Le modèle prévoit 200%, ce qui est éloigné de la réalité et montre que l'outil numérique surestime la ségrégation, probablement du fait du découplage du calcul de transfert de soluté. Malgré ce résultat peu convaincant, il est néanmoins intéressant de mettre en évidence l'influence de certains paramètres sur le calcul numérique du taux de ségrégation, de manière à vérifier si les tendances mises en évidence par COMON sont celles que permet de prévoir le modèle.

- Influence du molybdène

La formule de COMON (équation (I-2)) attribue à la concentration en molybdène un rôle bénéfique sur le taux de ségrégation, puisque celui-ci diminue quand cette teneur augmente. L'explication classique proposée par FUJII, POIRIER et FLEMINGS [48] repose sur l'influence du molybdène sur la masse volumique du liquide interdendritique. Les figures IV-3a à g montrent à l'évidence, tout au moins pour l'acier dont la composition a été donnée plus haut, que la densité du liquide interdendritique décroît quand la fraction liquide diminue, c'est-à-dire quand l'acier se refroidit. Or le molybdène inhibe cette tendance, ainsi que le montre la figure IV-29 représentant l'évolution de la masse volumique en fonction de la fraction liquide, pour des aciers dont la composition ne diffère de celle du lingot expérimentale que par le titre en molybdène. Ainsi, l'acier à 1% en molybdène présente une variation de masse volumique moins intense que celle de l'acier à 0% de molybdène, le moteur solutal de la convection naturelle sera par conséquent plus faible. Cependant, augmenter à l'excès la concentration en molybdène renverse la tendance : la densité augmente alors que la fraction liquide diminue, l'inversion du sens de l'écoulement observée en 4.1.1.2 ne se produira donc pas puisque cet alliage s'alourdira uniformément en se refroidissant. Il convient de remarquer qu'un acier ne présente jamais une teneur en molybdène aussi élevée et cette situation est plutôt un cas d'école, mais il est néanmoins intéressant d'étudier cette composition.

- Ségrégation axiale

La figure IV-30 représente les ségrégations axiales calculées de lingots de 65 tonnes, pour les teneurs en molybdène de 0%, 0,5% et 1%. L'augmentation de la concentration en molybdène limite l'intensité de la ségrégation. Cependant la figure IV-31 va à l'encontre de cette conclusion, puisqu'elle montre sans ambiguïté qu'une teneur élevée en molybdène (3%) aggrave fortement la ségrégation axiale. Il apparaît donc que l'évolution de la masse volumique du liquide interdendritique durant la solidification joue un rôle majeur, bénéfique ou négatif, sur la ségrégation axiale.

- Taux de ségrégation

Dans le but d'évaluer de manière quantitative le rôle de la teneur en molybdène sur l'intensité de la ségrégation, nous avons représenté figure IV-32 l'évolution du taux de ségrégation calculé par le modèle, en fonction du titre en molybdène de l'acier. La pente de la droite passant par ces cinq points est égale à $-23,5 (\%.\%^{-1}\text{Mo})$, soit en divisant par le diamètre (de manière à être cohérent avec COMON [1]) environ $-13 (\%.\%^{-1}\text{Mo.m}^{-1})$; or COMON propose $-9,2$. Ce résultat numérique montre à l'évidence que le modèle représente fidèlement l'influence bénéfique du molybdène sur le taux de ségrégation.

- Influence du diamètre du lingot

Trois calculs ont été réalisés sur des lingots de diamètre 0,5m, 1m et 1,5m. La ségrégation axiale de chacun d'eux est représentée figure IV-33. L'influence du diamètre s'avère indiscutable puisque sa diminution réduit nettement la ségrégation axiale ; ce résultat est conforme à ce qu'a mis en évidence COMON.

- Conclusion

Les résultats présentés dans cette partie, bien que le modèle numérique ne donne pas de résultats quantitativement correctes, montrent que les tendances dégagées par COMON au cours de son étude statistique sont celles du modèle numérique. Ceci est la meilleure démonstration de sa validité qualitative.

4.2 Extrapolations

Un modèle numérique ne doit pas être uniquement employé à la simulation plus ou moins fidèle de phénomènes physiques et de procédés industriels connus. Il devient réellement utile quand son emploi permet de prévoir les conséquences de la modification de tel ou tel paramètre, de telle ou telle opération unitaire du procédé, sur les propriétés finales du produit, sans passer systématiquement par une phase expérimentale extrêmement coûteuse. Dans cet esprit et considérant maintenant que la validité qualitative de notre outil était démontrée, nous avons tenté de mettre en évidence l'influence de quelques paramètres sur la santé interne d'un lingot de forge.

4.2.1 Surchauffe

La température initiale de l'acier à la coulée est une donnée que les aciéristes contrôlent à quelques degrés près. En d'autres termes, il est possible de modifier industriellement la surchauffe du liquide. Ceci nous a donc conduit à réaliser le calcul présenté précédemment avec une surchauffe significative (30°C), bien que la partie expérimentale de cette étude ait démontré que la surchauffe disparaît en quelques minutes. Il faut signaler que le temps de calcul a alors plus que doublé. La figure IV-34 permet de comparer les ségrégations axiales avec et sans surchauffe. La surchauffe tend à augmenter légèrement la ségrégation négative en pied, mais on constate cependant que les deux profils calculés sont très proches l'un de l'autre, une variation de 30 °C de la surchauffe ne semble donc avoir qu'une très faible incidence sur la santé interne du lingot. Ceci avait d'ailleurs déjà été mis en évidence par COMON. Le modèle dans son état actuel prévoit qu'il est donc illusoire de chercher à modifier la ségrégation du lingot en changeant la température initiale du liquide, sauf peut-être en coulant l'acier en dessous de sa température de liquidus (rheo-casting).

4.2.2 Masselottage

Nous avons déjà signalé dans la première partie de ce travail l'impact du masselottage sur le coût du lingot. En effet la masselotte, c'est-à-dire plus de 15% de l'acier introduit dans la lingotière, a pour fonction reconnue d'éviter la formation de porosités au coeur du lingot et n'entre donc pas dans la constitution de la partie ultérieurement forgée. Cette masselotte a probablement une influence sur les macroségrégations, dans la mesure où se concentrent en son sein les éléments d'alliage et où elle joue un rôle majeur sur les champs de température et de vitesse durant la solidification. Il apparaît donc intéressant de réaliser des calculs sur des lingots analogues au précédent mais avec une masselotte modifiée. La figure IV-35 représente les ségrégations axiales calculées pour le lingot de 65 tonnes déjà étudié et pour deux autres lingots, le premier avec une masselotte réduite de moitié, le second sans masselotte. On constate que la ségrégation axiale est fortement dépendante de la masselotte, car les deux derniers lingots, en particulier celui sans masselotte, sont nettement plus ségrégués que le premier, ce qui tend à montrer que la masselotte du lingot réel présente une dimension optimale. Conjointement à un calcul de ségrégation, un calcul simple d'estimation de la forme de la retassure, c'est-à-dire de la forme de la zone affectée par des porosités, a été effectué une fois connue les champs de température et de vitesse, car il n'est pas recommandé de modifier la masselotte sans s'assurer que la retassure correspondante n'est pas rédibitoire. Plus précisément, connaissant la quantité de solide formé à chaque pas de temps, le vide laissé par le retrait du métal à la solidification est facilement calculable ; il suffit alors de remplir le lingot, en commençant par la base, avec le liquide résiduel dont on connaît le volume, la masse de métal n'ayant évidemment pas changée ; cette opération nous donne alors la position du niveau du liquide, dont on peut déterminer l'intersection avec le front de solidification ; une série de points, significatifs de la position de la frontière libre à différents instants, est donc obtenue en répétant ce calcul à chaque pas de temps. La courbe passant par l'ensemble de ces points est une image de la zone affectée par des porosités. On trace également le

niveau du liquide quand l'ensemble du lingot est devenu pâteux, car ce qui se trouve au dessus de ce trait est exclusivement constitué de vide. La figure IV-36 montre la position calculée de la retassure pour les trois lingots précédents. La retassure du lingot du lingot sans masselotte descend jusqu'en son coeur, ce lingot est donc inutilisable, mais celle du lingot avec une demie masselotte reste acceptable.

4.2.3 Composition initiale

Nous avons déjà mis en évidence le rôle particulier que joue la teneur en molybdène sur la macroségrégation, par le biais de l'évolution de la masse volumique en fonction de la température. Dans cet esprit, un calcul a été réalisé avec une teneur en molybdène de 1,45%, en gardant les autres compositions inchangées. Cette composition est particulière, car la variation de la densité du liquide en fonction de la fraction liquide est pratiquement nulle dans l'intervalle de fraction liquide 0,7-1 (figure IV-37) ; le moteur du mouvement est donc extrêmement faible. Malgré ceci, la ségrégation axiale reste très proche de celle d'un lingot à 0,19% de molybdène (figure IV-38). Ce résultat est assez décevant car on pouvait s'attendre à un transfert de soluté moins intense dans ce cas particulier.

4.3 *Mise en évidence des limites du modèle*

Bien que l'ensemble des résultats présentés jusqu'à présent mette en relief des points positifs, il faut néanmoins admettre que le modèle dans son état actuel s'avère encore très incomplet ; il est donc nécessaire de mettre en évidence les points pour lesquels un effort important reste à faire.

4.3.1 Solidification équiaxe

Constamment au cours de cette étude, nous nous sommes heurté au fait que la croissance de cristaux libres au coeur du liquide n'est pas prise en compte. Ainsi, l'écart entre mesure et calcul concernant l'évolution de la température dans le liquide au cours du temps (figure IV-5) est, au moins en partie, imputable à cette simplification. De même, l'allure du puits liquide (figures IV-3a à g) serait fortement modifiée si la sédimentation de cristaux était modélisée. Enfin, la perméabilité au coeur du lingot, paramètre dont l'influence considérable a largement été mise en lumière, serait certainement modifiée en prenant en compte ce phénomène. Cependant, modéliser la solidification équiaxe demande un gros effort ; en effet, outre la description de la germination et de la croissance de cristaux au sein du liquide en surfusion, sujet donnant par ailleurs lieu à de nombreux travaux [43], il faudrait pour être complet simuler le mouvement de ces cristaux. Or l'ensemble du modèle tel qu'il est présenté dans la deuxième partie de ce travail postule l'immobilité de la phase solide, il faudrait donc reprendre l'étude dans ces fondements mêmes pour arriver à un tel résultat.

4.3.2 Couplage du transfert de soluté

La macroségrégation calculée, qu'il s'agisse du taux de ségrégation ou de la ségrégation axiale, est toujours trop forte comparée à celle mesurée ou évaluée par la relation de Comon. Cette constance dans la surestimation s'explique par le découplage du transfert de soluté des autres transferts. En effet, si les trois transferts étaient couplés, les gradients de concentration seraient atténués, alors qu'à présent le champ de vitesse ne modifie pas le champ de soluté à l'intérieur de la boucle d'itérations. En outre, la carte de composition en carbone présentée figures IV-4a et b est loin d'être en accord complet avec l'expérience des métallurgistes de Creusot-Loire Industrie ; en particulier une forte ségrégation négative en masselotte n'a jamais été notée jusqu'à présent au Creusot bien qu'elle soit décrite par des siderurgistes japonais (SAKUDA, OOI et MATSUNO [26]). D'importants efforts semblent donc encore nécessaires pour améliorer la description du transfert de soluté. En particulier le premier pas à faire serait de prendre en compte l'évolution de la concentration dans le puits liquide sur sa température de liquidus, qui jusqu'à présent est constante et égale à la température de liquidus initiale.

4.3.3 Veines sombres

Bien que la prévision de la position des veines sombres soit relativement correcte (figure IV-25), ce résultat encourageant ne doit cependant pas faire oublier que le phénomène de refusion locale n'est pas décrit par le modèle dans son état actuel. En fait cette lacune est une autre conséquence de la description incomplète du transfert de soluté, mais traduit également le fait que les phénomènes d'instabilité d'écoulement, à l'origine de ce genre de ségrégations, sont totalement passés sous silence. Si l'objectif est de simuler finement la formation de canaux ségrégés, il est probable qu'une étude complète reste à faire sur le thème des instabilités.

4.4 *Conclusion*

L'objet de cette partie était de confronter le modèle numérique à des résultats issus de la coulée expérimentale d'un lingot de 65 tonnes ainsi qu'à des observations réalisées dans le passé par les métallurgistes de C.L.I. Il s'avère que le modèle fournit des résultats prometteurs :

- Les résultats que COMON avaient obtenus suite à l'étude statistique portant sur la santé interne de 152 lingots ont été retrouvés par le calcul. En particulier l'influence bénéfique du molybdène sur le taux de ségrégation a été clairement mis en évidence et est en accord avec les observations de COMON.
- L'existence d'une macroségrégation positive dans la masselotte, toujours observée en pratique, est prédite par le modèle. Il en est de même de la macroségrégation négative en pied de lingot.
- L'évolution calculée de la teneur en carbone du liquide au fur et à mesure de l'avancement de la solidification est proche de celle mesurée suite aux prélèvements réalisés lors de la solidification du lingot expérimental de 65 tonnes.

- Le domaine calculé dans lequel le liquide interdendritique circule, pendant un temps donné, dans le sens des isothermes, correspond relativement bien dans la pratique à la partie du lingot renfermant des veines sombres.

Il apparaît néanmoins que le modèle présente dans sa forme actuelle des limitations, dont les principales sont la non-prise en compte de la solidification équiaxe et le couplage seulement partiel entre les différents transferts intervenant lors de la solidification d'un alliage métallique.

CONCLUSION GENERALE

CONTEXTE DE L'ETUDE

Les lingots de forge dont la masse peut atteindre plusieurs centaines de tonnes présentent dans leur partie axiale des macro et mesoségrégations qui nuisent aux caractéristiques des pièces forgées. Ces pièces, fabriquées à l'unité, présentent une très grande valeur ajoutée et leur utilisation touche fréquemment des industries sensibles telles que le nucléaire. Les spécifications techniques sont donc particulièrement sévères et une mise au rebut en fin de forgeage entraîne des pertes très importantes. Il est donc nécessaire de mieux connaître la genèse des défauts du type ségrégations. La simulation numérique de la solidification des alliages est un outil précieux pour l'aciériste car une fois le modèle mis au point et validé, il est alors possible d'estimer voire de mesurer l'influence de tel ou tel paramètre du process sur la santé interne des ébauches solidifiées sans passer systématiquement par une expérimentation très coûteuse. L'objectif de la collaboration entre CLI et le LSG2M était de développer un logiciel à même de simuler les phénomènes de transfert (chaleur, masse et quantité de mouvement) se déroulant à l'échelle macroscopique lors de la solidification d'un lingot de forge pour obtenir une carte de composition chimique en fin de solidification.

TRAVAIL REALISE

Ce programme ambitieux a donc nécessité la mise en équations de la solidification d'un lingot et l'écriture d'un outil informatique à même de résoudre les équations aux dérivées partielles correspondantes. Des hypothèses simplificatrices ont été formulées, dont les plus importantes sont la non prise en compte de la solidification équiaxe, du retrait à la solidification et du caractère initialement turbulent de l'écoulement du métal liquide dans la lingotière ; en outre l'évolution locale de la teneur en éléments d'alliage du liquide interdendritique au fur et à mesure de la solidification a été supposée suivre la règle du bras de levier ou la loi de Scheil suivant la nature du soluté. Cette dernière hypothèse signifie que le couplage entre les trois types de transfert n'est pas complètement réalisé puisqu'il existe une relation univoque simple entre la température du liquide interdendritique et sa composition chimique. Ceci ne nous a cependant pas empêché d'évaluer a posteriori l'impact du mouvement du fluide sur le transfert de soluté à l'échelle du lingot et sur le développement consécutif de macro et mesoségrégations, cependant ces résultats ne peuvent être que qualitatifs. La méthode numérique choisie a été les volumes finis car elle s'est avérée la plus simple à mettre en oeuvre et la plus communément utilisée pour résoudre ce genre de problème. Parallèlement au développement de cet outil numérique, une expérimentation grandeur nature a été réalisée par les aciéristes de CLI. Elle a consisté en la coulée d'un lingot de 65 tonnes dans une lingotière instrumentée à l'aide de thermocouples ainsi qu'en la mesure ponctuelle de la température dans l'acier liquide. De plus, du

métal liquide a été prélevé sur l'axe du lingot à trois profondeurs différentes au fur et à mesure de l'avancement de la solidification, de manière à suivre l'évolution de la teneur en éléments d'alliage du métal liquide. Cette expérimentation a été très importante car elle a permis de faire le lien entre les résultats théoriques fournis par le modèle et la réalité physique de la solidification d'un lingot.

SYNTHESE DES PRINCIPAUX RESULTATS

Le modèle numérique développé s'avère prometteur pour quatre raisons :

- Il a permis de retrouver par la théorie les résultats que COMON [1] avait établi en 1973 par une étude statistique portant sur la santé interne de 152 lingots ; le rôle très important de la composition initiale de l'acier sur le développement des macroségrégations a été démontré et corrélé à la convection naturelle du liquide dans la zone pâteuse ; en particulier l'influence bénéfique du molybdène sur le taux de ségrégation a été clairement mis en évidence et est en accord avec les observations de COMON.

- Concernant la carte de composition du lingot en fin de solidification, l'existence d'une macroségrégation positive dans la masselotte toujours observée en pratique est prédite par le modèle. Il en est de même de la macroségrégation négative en pied de lingot, ce résultat est plus surprenant car les aciéristes relient son existence à la sédimentation de cristaux équiaxes, phénomène non pris en compte par le modèle ; ceci démontre au moins que l'accumulation de cristaux équiaxes en pied de lingot n'est probablement pas le seul phénomène à mettre en cause. Le modèle prédit de plus une ségrégation négative dans la partie externe de la masselotte et des aciéristes japonais [26] présentent des observations qui semblent conforter ce résultat, ceci reste néanmoins à confirmer par CLI.

- L'évolution calculée de la teneur en éléments d'alliage du liquide au fur et à mesure de l'avancement de la solidification est très proche de celle mesurée suite aux prélèvements réalisés au cours de l'expérimentation. Ce résultat encourageant montre que le transfert de soluté est bien décrit au moins tant que la fraction liquide reste forte, c'est-à-dire tant que des prélèvements ont pu être faits.

- Le domaine calculé dans lequel le liquide interdendritique circule, pendant un temps donné, dans le sens de déplacement des isothermes, correspond relativement bien dans la pratique à la partie du lingot renfermant des ségrégations en A ou veines sombres ; l'outil numérique semble donc à même de prévoir avec une relative précision la positions des défauts les plus rédhibitoires d'un lingot de forge.

PERSPECTIVES

D'un point de vue pratique, le modèle numérique dans son état actuelle reste difficile d'emploi car le mailleur et le post traitement sont encore rudimentaires. D'un point de vue théorique certains résultats

donnés par le modèle montrent que la solidification équiaxe et le couplage complet des trois transferts doivent être pris en compte. En effet la ségrégation axiale prédite par le modèle est qualitativement et quantitativement éloignée de ce qui est observé dans la pratique. L'intégration de ces phénomènes dans le modèle nécessite un effort important, aussi bien concernant la physique de ces phénomènes encore mal éclaircie que concernant la mise au point d'un algorithme de résolution de toutes les équations couplées.

CONCLUSION

Les trois communications tirées de ce présent travail ([68], [69], [70]) permettent de mettre en évidence ses spécificités :

- couplage partiel des équations de transfert,
- prise en compte des phénomènes convectifs dans le puits liquide et dans la zone pâteuse à l'aide d'un modèle unique équivalent assez complet,
- confrontation réussie avec une expérimentation industrielle, montrant la capacité de ce modèle à résoudre un cas concret.

Ce modèle s'inscrit donc dans la continuité des travaux antérieurs et constitue un pas en avant dans la modélisation de la solidification des alliages.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] COMON (J.), DELORME (J.) et BASTIEN (P.). - *Hétérogénéité des gros lingots de forge. Etude de l'influence des impuretés et des éléments d'alliage sur la ségrégation.* Revue Métall. 70 (4) (1973) 251.
- [2] HULTGREN (A.). - *A and V segregations in killed steel ingots.* Scand. J. Metal. 2 (1973) 217.
- [3] FLEMINGS (M. C.). - *Principles of control of Soundness and Homogeneity of large ingots.* Scand. J. Metal. 5 (1976) 1.
- [4] OHNAKA (I.) and FUKUSAKO (T.). - *Solidification analysis of steel ingots with consideration on fluid flow.* Transactions ISIJ 21 (1981) 485.
- [5] OHNAKA (I.). - *Modelling of solidification structure of castings.* In «*State of the Art in Computer Simulation of Casting and Solidification Processes - 1986*» Proceedings of the E-MRS Conference held in Strasbourg, June 17-20 1986 Edited by H. Fredriksson - Les Editions de Physique (1986) 211.
- [6] PISSELOUP (J.), POITRAULT (I.), BADEAU (J. P.) et BOCQUET (P.). - *Adaptation du type et de la géométrie du lingot à la fabrication de grosses pièces forgées. Conséquences au niveau de la ségrégation.* Journées métallurgiques d'automne de la SFM, 22-24 octobre 1985
- [7] LESOULT (G.). - *Solidification : Cristallisation et microstructures.* Techniques de l'Ingénieur M 58 (1986) 1.
- [8] LESOULT (G.). *Elaboration et mise en forme des matériaux*, cours de deuxième année de l'Ecole des Mines de Nancy.
- [9] EDVARDSSON (T.), FREDRIKSSON (H.) et SVENSSON (I.). - *A study of the solidification process in low carbon manganese steels.* Metal Science (1976) 298.
- [10] JAKOBI (H.) et SCHWERDTFEGER (K.). - *Dendrite morphology of steady state unidirectionaly solidified steel.* Metal. Trans. A 7A (1976) 811.
- [11] POKORNY (A et J). - *Album de métallographie IRSID.* Les Cahiers du CESSID. Berger Levrault Ed. (1971)
- [12] COMON (J.) et BASTIEN (P.). *Etude expérimentale des relations entre la solidification et les hétérogénéités de lingots d'acier de 3 à 30 tonnes.* Revue métall. 1968.
- [13] LESOULT (G.). - *Solidification : macrostructures et qualité des produits.* Techniques de l'Ingénieur M 59 (1989) 1.
- [14] FLEMINGS (M. C.) and NEREO (G. E.). - *Macroseggregation : part 1.* Trans. of the Metal. Soc. of AIME 239 (1967) 1449.

- [15] ASAI and MUCHI. - *Theoretical analysis and model experiments on the formation mechanism of channel-type segregation*. Trans. ISIJ 18 (1978) 90.
- [16] SUZUKI (K.) and MIYAMOTO (T.). - *Study on the formation of "A" segregation in steel ingot*. Trans ISIJ 18 (1978) 80.
- [17] SUZUKI (K.) and MIYAMOTO (T.). - *Influence of alloying elements on the formation of "A" segregates in steel ingot*. Trans. ISIJ 20 (1980) 375.
- [18] SUZUKI (K.) and TANIGUSHI (K.). - *The mechanism of reducing "A" segregates in steel ingots*. Trans . ISIJ 21 (1981) 235.
- [19] SHAW (L. H.), BEECH (J.) and HICKLEY (R. H.). - *Channel segregates in cast steel rolls*. Ironmaking and Steelmaking 13 (1986) 154.
- [20] OLSSON (A.), WEST (R.) and FREDRIKSSON (H.). - *Macrosegregation in ingots*. Scand. J. Metal. 15 (1986) 104.
- [21] FREDRIKSSON (H.) and NILSSON (S. O.).- *On the formation of macrosegregation in ingots*. Metal. Trans. B 9B (1978) 111.
- [22] LESOULT (G.) and SELLA (S.). - *Spongy behaviour of alloys during solidification : flow of liquid metal and segregation in the mushy zone*. In *Non Linear Phenomena in Material Science*. Eds. G. Martin and L. P. Kubin, Trans. Tech. Publications (1988) 167. Proceedings of the Int. C.N.R.S. Meeting held in Aussois, France (Sept. 1987).
- [23] SUZUKI (K.) and MIYAMOTO (T.). - *On the formation mechanism of V segregation in steel ingot*. Trans. ISIJ 14 (1974) 296.
- [24] Commission des Communautés Européennes. Journées d'information *Couleé et Solidification de l'Acier*. Luxembourg, du 29 Novembre au 1^{er} Décembre 1977. Volume 1, Revue de Metallurgie, Paris.
- [25] MAIDORN (C.) and BLIND (D.). - *Solidification and segregation in heavy forging ingots*. Nuclear Eng. Design 84 (1985) 285.
- [26] SAKUDA, OOI et MATSUNO. - *Solidification characteristics of large ingots of low alloy steel*. CFT Paris 20-25 avril 1975.
- [27] NI (J.) and BECKERMANN (C.). - *A volume -averaged two - phase model for transport phenomena during solidification*. Metal. Trans. B vol. 22B (1991) 349.
- [28] HOUPEURT (A.).- *Mécanique des fluides dans les milieux poreux. Critiques et recherches*. Editions Technip - Paris.(1974).
- [29] DULLIEN (F. A. L.). - *Porous media. Fluid transport and pore structure*. Academic Press Inc. (London) Ltd. (1979).
- [30] BECKERMANN (C.) and VISKANTA (R.). - *Natural convection solid/liquid phase change in porous media*. Int. J. Heat Mass Transfer 31 (1988) 35.
- [31] BENNON (W. D.) and INCROPERA (F. P.). - *A continuum model for momentum, heat and species transport in binary solid-liquid phase change systems. -I. Model formulation*. Int. J. Heat Mass Transfer 30 (1987) 2161.

- [32] BENNON (W. D.) and INCROPERA (F. P.). - *The evolution of macrosegregation in statically cast binary ingots*. Metal. Trans. B 18B (1987) 611.
- [33] VOLLER (V. R.), BRENT (D.) and PRAKASH (C.). - *The modelling of heat, mass and solute transport in solidification systems*. Int. J. Heat Mass Transfer 32 (1989) 1719.
- [34] NANDAPURKAR (P.), POIRIER (D. R.), HEINRICH (J.C.) and FELICELLI (S.). - *Thermosolutal convection during dendritic solidification of alloys : Part I. Linear stability analysis*. Metal. Trans. B 20B (1989) 711.
- [35] DARCY (H.). - *Les fontaines publiques de la ville de Dijon*. Note D, Editeur Victor Dalmont, Paris (1856).
- [36] HIRSCH (C.). - *Numerical computation of internal and external flows. Volume 1 : Fundamentals of numerical discretization*. John Wiley and Sons (1989).
- [37] HIRT (C. W.), NICHOLS (B. D.) and ROMERO (C.). - *Sola-A, numerical solution algorithm for transient Fluid Flow*. Report LA-5852 and LA-5852 Add, Los Alamos Scientific Laboratory, University of California 1975.
- [38] JUN QING WANG. - *Mold filling and temperature fields*. Ph. D. Thesis, Laboratory of Thermal Processing of Materials, Technical University of Denmark, 31 May 1988.
- [39] VOLLER (V. R.). - *Modelling solidification processes*. In «*Mathematical Modelling of Materials Processing Operations* » Proceedings of a symposium sponsored by the Metallurgical Society, Inc. held in Palm Springs, California, U.S.A., November 29 through December 2, 1987, at the Fifth Extractive and Process Metallurgical Fall Meeting. Edited by J. Szekely, L. B. Hales, H. Heneim, N. Jarret, K. Rajamani and I. Samarsekera, a publication of the Metal Society, Inc.
- [40] VISKANTA (R.). - *Heat transfer during melting and solidification of metals*. ASME J. Heat Transfer 110 (1988) 1205.
- [41] PATANKAR (S. V.). - *Numerical heat transfer and fluid flow*. Hemisphere Publishing Corporation (1980).
- [42] BERNADOU. - . *Modulef, une bibliothèque modulaire d'éléments finis*. INRIA Paris 1985.
- [43] RAPPAZ (M.). - *Micro-macroscopic modelling of solidification*. International Material Review 34 (1989) 93.
- [44] COMBEAU (H.) et JARDY (A.). Cours de 3^{ème} année de l'Ecole des Mines de Nancy
- [45] DE VAHL DAVIS (G.). - *Natural convection of air in a square cavity : a bench mark numerical solution*. Int. J. Num. Meth. fluids 3 (1983) 249.
- [46] DE VAHL DAVIS (G.) and JONES (I. P.). - *Natural convection in a square cavity : a comparison exercise*. Int. J. Num. Meth. fluids 3 (1983) 227.

- [47] MAZET (T.). - Etude des macroségrégations dans les lingots de forge. Diplôme d'Etudes Approfondies, I. N. P. L., Nancy.
- [48] FUJII (T.), POIRIER (D. R.) and FLEMINGS (M. C.). - *Macrosegregation in a multicomponent low alloy steel*. Metal. Trans. B 10B (1979) 331.
- [49] VOLLER (V. R.) and PRAKASH (C.). - *A fixed grid numerical modelling methodology for convection-diffusion mushy region phase change problems*. Int. J. Heat Mass Transfer 30 (1987) 1709.
- [50] OUZIAUX (R.) et PERRIER (J.). - *Mécanique des fluides appliquée*. Dunot, Paris (1978).
- [51] BRINKMAN (H. C.). - *On the permeability of media consisting of closely packed porous particles*. Appl. Sc. Res. A1 (1947) 81.
- [52] PIWONKA (T. S.) and FLEMINGS (M. C.). - *Pore formation in solidification*. Trans. of the Metal. Soc. of AIME 236 (1966) 1157.
- [53] APELIAN (D.), FLEMINGS (M. C.) and MEHRABIAN (R.). - *Specific permeability of partially solidified dendritic networks of Al-Si alloys*. Metal. Trans. 5 (1974) 2533.
- [54] STREAT (N.) and WEINBERG (F.). - *Interdendritic fluid flow in a lead-tin alloy*. Metal. Trans. B 7B (1976) 417.
- [55] MURAKAMI (K.) and OKAMOTO (T.). - *Fluid flow in the mushy zone composed of granular grains*. Acta Metall. 32 (1984) 1741.
- [56] MURAKAMI (K.), SHIRAISHI (A.) and OKAMOTO (T.). - *Interdendritic fluid flow normal to primary dendrite-arms in cubic alloys*. Acta Metall. 31 (1983) 1417.
- [57] NASSER-RAFI (R.), DESHMUKH (R.) and POIRIER (D. R.). - *Flow of interdendritic liquid and permeability in Pb-20 wt Pct Sn alloys*. Metal. Trans. A 16A (1985) 2263.
- [58] POIRIER (D. R.). - *Permeability for flow of interdendritic liquid in columnar-dendritic alloys*. Metal. Trans. B 18B (1987) 245.
- [59] TAKAHASHI (T.), HAGIWARA (I.) and ICHIKAWA (K.). - *Significance of the solidifying zone on the ingot solidification*. Trans. ISIJ 12 (1972) 412.
- [60] TAKAHASHI (T.), ICHIKAWA (K.), KUDOU (M.) and SHIMAHARA (K.). - *The effect of fluid flow on the macrosegregation in steel ingot*. Trans. ISIJ 16 (1976) 283.
- [61] TAKAHASHI (T.), KUDOH (M.) and YODOSHI (K.). - *A study on the fluidity of the liquid in the solid-liquid coexisting zone*. J. Japan Inst. Metals 43 (1979) 1086.
- [62] WEST (R.). - *On the permeability of the two-phase zone during solidification of alloys*. Metal. Trans. A 16A (1985) 693.

- [63] KOBAYASHI (T.), KUDOU (M.) et YODOSHI (K.). - *Mathematical analysis of solidification process with consideration on solute segregation*. Trans. ISIJ 28 (1988) 214.
- [64] MEHRABIAN (R.), KEANE (M.) and FLEMINGS (M. C.). - *Interdendritic fluid flow and macrosegregation ; influence of gravity*. Metal. Trans. 1 (1970) 1209.
- [65] RIDDER (S. D.), KOU (S.) and MEHRABIAN (R.). - *Effect of fluid flow on macrosegregation in Axi-symmetric ingots*. Metal. Trans. B 12B (1981) 435.
- [66] BIRAT (J. P.), BOBADILLA (M.), JACQUOT (J. L.), MARTINOT (M.), RUER (J.), BACKER (L.) and BASTIAN. - *Continuous casting and electromagnetic stirring of steels with large solidification interval*. In *Continuous Casting*, The Metals Society, London, may 1985.
- [67] SZEKELY (J) et JASSAL (A). - *An experimental and analytical study of the solidification of a binary dendritic system*. Metal. Trans. B 9B (1978) 389.
- [68] MAPLES (AL) et POIRIER (DR). - *Convection in two-phase zone of solidifying alloys*. Metal. Trans. 15B (1984) 163.
- [68] COMBEAU (H), ROCH (F), POITRAULT (I), CHEVRIER (J. Ch.) et LESOULT (G) - *Numerical study of heat and mass transfer during solidification of steel ingots*. First International Conference Advanced Computational Methods in Heat Transfer, Southampton UK July 17-20 1990.
- [69] ROCH (F), COMBEAU (H), CHEVRIER (J. Ch.) et LESOULT (G) - *Numerical model for prediction of final composition, pipe formation and average dendrite arm spacing of heavy steel ingots*. Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes, Davos Switzerland September 16-20 1990.
- [70] ROCH (F), COMBEAU (H), POITRAULT (I), CHEVRIER (J. Ch.) et LESOULT (G) - *Numerical model for prediction of chemical-type segregation in heavy steel ingots*. The Sixth International Iron and Steel Congress, Nagoya Japan October 21-26 1990.

NOMENCLATURE

- a et b coefficients de l'équation discrétisée
- C coefficient d'inertie de l'extension de Forchheimer (=0,55)
- c_p capacité calorifique ($J/m^3/^\circ C$)
- $\Delta C/C$ taux de ségrégation du carbone
- ΔP différence de pression
- D diamètre du lingot (m)
- D_f coefficient de diffusion (m^2/s)
- D_h diamètre hydraulique d'un capillaire (m)
- f^α fraction massique de la phase α
- g^α fraction volumique de la phase α
- g** gravité ($10 m/s^2$)
- h^α enthalpie spécifique de la phase α (J/m^3)
- H hauteur du lingot (m)
- k coefficient de partage
- k_0 facteur de forme
- K perméabilité (m^2)
- k' constante de Kozeny (= 5)
- l longueur du massif poreux
- l_e longueur d'un canal du milieu poreux
- L chaleur latente (J/m^3)
- m pente de liquidus ($^\circ C/\%$)
- M et N constantes pour le calcul de l'espacement interdendritique moyen
- P pression (Pa)
- \hat{p} pression motrice (Pa)
- r rayon d'un capillaire cylindrique (m)
- R résistance thermique
- R_s rayon d'une sphère immergée (m)
- S_0 surface spécifique (m^2)
- t temps
- T température
- T_m température de fusion du fer pur ($1538^\circ C$)
- v vitesse de filtration, ou vitesse microscopique (m/s)
- V vitesse moyenne débitante, ou vitesse macroscopique (m/s)
- V_{sol} vitesse de solidification ($^\circ C/s$)
- x variable d'espace
- w titre massique (%)

W fonction de pondération

Lettres grecques

α diffusivité thermique (m^2/s)

β coefficient d'expansion ($^{\circ}C^{-1}$ ou $\%^{-1}$)

γ porosité

δ diamètre d'un capillaire (m)

ε émicivité

λ conductivité thermique ($w/m/^{\circ}C$)

Λ espacement interdendritique moyen (m)

μ viscosité dynamique ($kg/m^{-1}/s^{-1}$)

ν diffusivité de quantité de mouvement, ou viscosité cinématique (m^2/s)

ρ masse volumique (kg/m^3)

σ constante de Stefan ($5,67 \cdot 10^{-8} W.m^{-2}.K^{-4}$)

τ tortuosité

ϕ variable scalaire type

ω domaine élémentaire

Ω domaine de calcul

Indices et exposants

E, W, N, S voisins est, ouest, nord et sud du point P

e, w, n, s faces est, ouest, nord et sud du volume construit à partir du point P

i constituant i

s solide

l liquide

ref référence

0 état initial, ou pas de temps précédent

* dernière valeur calculée

nb voisins (neighbour en anglais)

ANNEXE 1

CALCUL DE LA PERMEABILITE D'UN MILIEU POREUX

La connaissance de la perméabilité du milieu pâteux est indispensable à la description précise du mouvement du fluide interdendritique. C'est ce que démontrent VOLLER et PRAKASH [49] qui ont réalisé des calculs d'écoulement en zone pâteuse et qui déterminent des champs de vitesse dépendant de la loi de perméabilité en fonction de la fraction liquide.

APPROCHE THEORIQUE.

La zone pâteuse d'un alliage en cours de solidification présente deux régions distinctes :

- une zone constituée d'un réseau solide cohérent et comprenant la partie colonnaire et le sous-domaine de la partie équiaxe à fraction solide suffisamment élevée pour que les cristaux se touchent,
- une zone constituée d'une suspension de cristaux au sein du métal liquide, comprenant la partie équiaxe à faible fraction solide.

La transition entre ces deux domaines ne repose pas sur le caractère orienté ou non de la croissance des dendrites (domaine basaltique-domaine équiaxe), mais sur la teneur en solide de la zone pâteuse.

Il semble donc a priori nécessaire de développer deux types de modèles pour représenter la zone mi-liquide mi-solide d'un acier en cours de solidification. Cependant la littérature est pauvre en description de modèles type écoulement autour de particules immergées, un de ces modèles sera donc présenté à titre d'exemple après une revue détaillée des modèles type faisceau de capillaires.

Modèles type faisceau de capillaires.

La modélisation consiste à supposer que le fluide circule dans des capillaires délimités par les axes dendritiques.

Cette notion de conduite d'écoulement permet d'utiliser les données de l'hydraulique appliquée aux conduites de section non circulaire (OUZIAUX et PERRIER [50]). Ainsi il est utile de définir deux grandeurs :

- d'une part le rayon hydraulique de la section d'écoulement

m = section d'écoulement / périmètre mouillé
(dans le cas d'une conduite cylindrique de rayon r , $m = r/2$)

- d'autre part le diamètre hydraulique de la section

$$D_h = 4 m$$

(dans le cas d'une conduite cylindrique de diamètre D , $D_h = D$)

L'équation de Poiseuille, obtenue par la résolution des équations de Navier-Stokes en régime stationnaire et en négligeant les forces d'inertie, peut s'écrire sous la forme [50] :

$$v = - \frac{\Delta P}{Le} \frac{1}{\mu} \frac{D_h^2}{16k_0} \quad (A1-1)$$

k_0 facteur de forme, ΔP différence de pression entre les deux extrémités de la conduite, Le longueur du canal.

D'autre part, la vitesse moyenne débitante V , ou vitesse macroscopique, est déterminée par la loi de Darcy :

$$V = - \frac{K}{\mu} \frac{\Delta P}{l} \quad (A1-2)$$

l longueur du massif.

Enfin, v et V sont reliées par la relation

$$v = \frac{V}{\gamma} \frac{le}{l} \quad (A1-3)$$

γ étant la porosité, égale à la fraction liquide.

La division de V par la porosité correspond à l'hypothèse de Dupuit-Forchheimer qui revient à supposer les vitesses moyennes égales dans chacun des canaux. La multiplication par le rapport le/L est due à Carman et permet de tenir compte de la différence entre la longueur L du massif et la longueur le du canal ($le \geq L$) [28].

La combinaison des trois formules précédentes permet d'écrire

$$K = \frac{Dh^2 fl}{16k_0 \left(\frac{le}{l}\right)^2} \quad (A1-4)$$

Cette équation est la relation de base pour tous les modèles type faisceau de capillaires, modèles différents suivant la méthode de calcul de Dh et de l'expression $k_0 (le/l)^2$ en fonction de la géométrie des pores.

Par sa définition même, le diamètre hydraulique calculé à l'échelle macroscopique s'écrit

$$Dh = \frac{4fl}{S_0 (1 - fl)} \quad (A1-5)$$

S_0 surface spécifique.

La combinaison de ces deux équations donne

$$K = \frac{fl^3}{k_0 \left(\frac{le}{l}\right)^2 (1 - fl)^2 S_0^2} \quad (A1-6)$$

Cette relation est l'équation de Kozeny-Carman. Kozeny l'avait établi en 1927 en reliant la perméabilité à des propriétés globales du milieu, et Carman l'a réétabli de manière formelle en 1939 [27].

Le rapport $(le/l)^2$ est appelé tortuosité τ . D'après Carman, l'expérience montre que la valeur à attribuer au facteur $k' = k.(le/l)^2$ est 5. k' est appelée constante de Kozeny.

La relation de Kozeny-Carman ne s'applique pas pour tout milieu poreux. En particulier, dans le cas de milieux constitués de particules très éloignées de la forme sphérique, ou de particules à large distribution granulométrique, ou enfin de milieux où le concept de capillaires n'est plus valable (très fortes fractions liquides), son emploi est sujet à caution [28].

D'autre part, elle suppose la connaissance de la surface spécifique S_0 du milieu, soit par mesure direct soit par calcul.

si λ est l'espacement interdendritique primaire de la structure, la surface spécifique peut s'écrire

$$S_0 = \frac{\pi \tau}{\lambda} \quad (A1-7)$$

d'où

$$K = \frac{f l^3 \lambda^2}{k' \pi^2 \tau^2 (1 - f l)^2} \quad (\text{A1-8})$$

Une approche simplificatrice consiste à considérer la zone pâteuse comme étant composé d'un réseau de n capillaires cylindriques par unité de surface perpendiculaire à la direction d'écoulement, et de rayon r . On obtient alors

$$K = \frac{r^2 f l}{8 \left(\frac{l_e}{l}\right)^2} \quad (\text{A1-9})$$

et

$$f l = n \pi r^2 \quad (\text{A1-10})$$

d'où

$$K = \frac{f l^2}{8 n \pi \left(\frac{l_e}{l}\right)^2} \quad (\text{A1-11})$$

Si λ est l'espacement interdendritique primaire, $n = 1/\lambda^2$

Finalement,

$$K = \frac{f l^2 \lambda^2}{8 \pi \left(\frac{l_e}{l}\right)^2} \quad (\text{A1-12})$$

Au même titre que la relation de Kozeny-Carman, cette relation ne s'applique pas à des milieux où le concept de capillaires n'est plus justifiable du fait d'une trop forte fraction liquide.

On comprend donc l'utilité d'un autre modèle basé sur la notion d'écoulement autour de particules immergées pour décrire la perméabilité d'une zone pâteuse à faible teneur en solide, tout en ayant à l'esprit que la fraction liquide de transition entre les deux modèles reste à déterminer.

modèle type écoulement autour d'objets immergés

BRINKMAN [51] est le premier à avoir développé un modèle reposant sur le concept d'écoulement d'un fluide autour de particules sphériques. La relation de Brinkman pour le calcul de la perméabilité est la suivante :

$$K = \frac{R^2}{18} \left(3 + \frac{4}{1 - fl} 3\sqrt{\frac{8}{1 - fl} - 3} \right) \quad (A1-13)$$

R rayon des sphères.

Cette formule est a priori séduisante car elle relie simplement la perméabilité à la fraction liquide. Cependant son emploi est délicat car d'une part la fraction liquide à partir de laquelle elle n'est plus utilisable n'est pas connue, et d'autre part R n'est pas relié simplement à la fraction liquide.

APPROCHE EXPERIMENTALE

La mesure de la perméabilité d'une zone pâteuse en cours de solidification a été effectuée par de nombreux chercheurs suivant plusieurs objectifs :

- validation des modèles théoriques décrits précédemment
- étude du caractère anisotrope d'une zone pâteuse colonnaire
- détermination des fractions liquides critiques délimitant le milieu consolidé et le milieu non consolidé

Validation des modèles

PIWONKA et FLEMINGS [52] ont mesuré la perméabilité de la zone pâteuse d'un alliage Al-4.5%Cu. Pour une fraction liquide inférieure à 0.3 la perméabilité est proportionnelle au carré de la fraction liquide. Par contre pour de plus grandes fractions liquides, la perméabilité est moins simplement corrélée à fl. Le facteur de tortuosité est pris égale à 2 quand fl est inférieure à 0.3, par contre cette valeur semble trop faible pour de plus fortes fractions liquides.

APELIAN, FLEMINGS et MEHRABIAN [53] ont étudié la perméabilité d'alliages Al-4%Si et Al-4%Si-0.25%Ti. Ils ont vérifiés expérimentalement d'une part la validité de la loi de Darcy et d'autre part la validité du modèle réseau de capillaires cylindriques pour des fractions liquides inférieurs à 0.35.

STREAT et WEINBERG [54] ont étudié l'influence de l'espacement interdendritique sur la perméabilité de la zone pâteuse d'un alliage Pb-20%Sn à une fraction liquide de 0.19. Ils ont observé une proportionnalité entre la perméabilité et le carré de l'espacement interdendritique primaire, en accord avec le modèle de capillaires

cylindriques. L'influence de l'espacement interdendritique secondaire est moins évident. Ils proposent une valeur de 4.6 pour le facteur de tortuosité.

MURAKAMI et OKAMOTO [55] ont étudié la perméabilité d'un milieu poreux composé de particules granulaires. La perméabilité est proportionnelle au cube de la fraction liquide pour des fractions comprises entre 0.27 et 0.48. D'autre part, grâce à des mesures de surfaces spécifiques, la valeur de la perméabilité a été estimée par la formule de Kozeny-Carman, ceci en bon accord avec les mesures.

Anisotropie

STREAT et WEINBERG [54] ont observé une différence de perméabilité suivant la nature colonnaire ou équiaxe de la zone pâteuse.

MURAKAMI, SHIRAIISHI et OKAMOTO [56] ont étudié le caractère anisotrope d'une zone pâteuse colonnaire sur un alliage organique transparent bornéol-paraffine. Pour un écoulement perpendiculaire aux bras primaires la perméabilité est proportionnelle au cube de la fraction liquide et au carré de l'espacement interdendritique primaire.

NASSER-RAFFI et al. [57] ont mesuré la perméabilité d'une zone pâteuse colonnaire, suivant la direction de l'écoulement interdendritique, pour un alliage Pb-20%Sn. Dans le cas d'écoulements parallèles aux axes dendritiques primaires la fraction liquide était de 0.19 et 0.29 et dans le cas d'un écoulement perpendiculaire 0.19. Les mesures ont mis en évidence une forte anisotropie; en effet la perméabilité dans le cas d'un écoulement normal aux axes est 5 à 20 fois plus faibles que dans le cas d'un écoulement parallèle aux axes primaires. En outre, dans le cas d'un écoulement parallèle aux axes primaires, la perméabilité est proportionnelle au carré de l'espacement interdendritique primaire et au carré de la fraction liquide, et est indépendante de l'espacement interdendritique secondaire; par contre dans le cas d'un écoulement normal aux axes primaires, la perméabilité dépend fortement de l'espacement interdendritique secondaire.

POIRIER [58] a réalisé des régressions multilinéaires sur des mesures de perméabilité en zone pâteuse colonnaire pour l'alliage Pb-20%Sn et pour l'alliage organique bornéol-paraffine, ceci pour des fractions liquides comprises entre 0.2 et 0.6. Dans le cas d'un écoulement parallèle aux axes primaires, les conclusions sont similaires à celles de NASSER-RAFFI et al. Dans le cas d'un écoulement

perpendiculaire aux axes primaires, la perméabilité dépend des axes primaires et secondaires, et est proportionnelle au cube de la fraction liquide. Des extrapolations pour des fractions liquides en dehors de l'intervalle 0.2-0.6 semblent montrer que la relation de Kozeny-Carman est la mieux adaptée.

Fractions liquides critiques

TAKAHASHI et al. ([59],[60],[61]) définissent trois sous-domaines au sein de la zone pâteuse :

- une zone dans laquelle le liquide ne peut pas circuler dans le réseau solide
- une zone dans laquelle le liquide est libre de circuler dans le réseau solide
- une zone sans réseau solide consolidé, où liquide et solide peuvent circuler.

Ils ont ensuite déterminé les valeurs des fractions liquides de transition entre ces différentes zones, sur un alliage Al-2.4%Si; les résultats sont respectivement 0.23 et 0.69. L'influence de la vitesse de solidification a également été étudiée sur une acier à 0.83%C; quand la vitesse de refroidissement varie de 0.033 à 0.15 °C/s, la première fraction liquide passe de 0.27 à 0.4, par contre la seconde ne change pas.

Cependant ces résultats sont actuellement fortement mis en doute car la technique de mesure de perméabilité employée par Takahashi n'est pas fiable.

WEST [62] propose un modèle de calcul de perméabilité dans le même esprit que le modèle de Takahashi : pour de faibles fractions liquides (typiquement inférieures à 0.3-0.4) la perméabilité est prise proportionnelle au carré de la fraction liquide; par contre pour des fractions liquides supérieures, un modèle décrivant le mouvement d'un fluide dans un milieu poreux composé de sphères est ajouté au précédent modèle.

DISCUSSION

La perméabilité d'une zone pâteuse colonnaire est anisotrope, phénomène a priori impossible à prendre en compte car la position de la frontière équiaxe-colonnaire n'est pas connue. cette limitation n'est cependant pas cruciale car, dans le cas d'un lingot, la zone équiaxe est plus étendue que la zone basaltique et renferme les ségrégations principales.

L'espacement interdendritique joue un rôle majeur sur la valeur de la perméabilité. L'observation de la coupe d'un lingot montre qu'il n'est pas toujours possible de distinguer nettement un espacement primaire d'un espacement secondaire; c'est plutôt une distance interdendritique moyenne qui caractérise le milieu.

D'autre part, cette valeur peut être déterminée grâce à la vitesse locale de solidification; cette vitesse est soit prise égale à la vitesse de refroidissement juste avant le début de la solidification [7], soit calculée à chaque pas de temps (KOBAYASHI, TOMONO et GUNJI [63]).

on obtient la formule

$$\lambda = M V_{\text{sol}}^N \quad (\text{A1-14})$$

M et n constantes propres à chaque alliage.

Certains auteurs, parmi eux MEHRABIAN, KEAN et FLEMINGS [64], RIDDER, KOU et MEHRABIAN [65] utilisent la formule issue d'un modèle type faisceau de capillaires cylindriques sans restriction sur la valeur de la fraction liquide. OHNAKA et FUKUSAKO [4] distinguent deux domaines de fractions liquides : pour fl inférieure à 0.33 la perméabilité est proportionnelle à fl au carré, et pour fl supérieure à 0.33 à fl à la puissance 6.

La formule de Kozeny-Carman est également couramment utilisée pour le calcul de la perméabilité. A titre d'exemple, la formule employée par VOLLER et PRAKASH [49], et par BENNON et INCROPERA [32] est celle de Kozeny-Carman sous la forme

$$K = C \frac{fl^3}{(1 - fl^2)} \quad (\text{A1-15})$$

C se voit affecter une valeur constante non précisée.

Une autre approche a été développée par l'IRSID (BIRAT et al.[66]) qui repose sur une mesure directe de la morphologie des pores suivant l'avancement de la solidification, puis sur le calcul de la surface spécifique et de la perméabilité du milieu. Cette approche conduit à des valeurs de perméabilité supérieures aux résultats présentés jusque ici. Ceci semblerait mettre en évidence que toutes les mesures de perméabilités in situ conduisent à une déformation du réseau dendritique, donc à une modification artificielle de la perméabilité, la mesure serait donc inférieure à la perméabilité réelle. La figure A1-1 rassemble les résultats présentés jusque ici et montre l'étendue de leur dispersion.

En conclusion, la démarche consistant à superposer deux modèles pour la description de la perméabilité de la zone pâteuse est peu suivie par les métallurgistes et les numériciens. En fait la relation de Kozeny-Carman avec estimation de la surface spécifique, couplée à une formule de calcul de l'espacement interdendritique moyen en fonction de la vitesse de solidification, apparaît la plus fiable. C'est donc cette technique de calcul de la perméabilité que nous implanterons dans le modèle.

ANNEXE 2.

ETUDE BIBLIOGRAPHIQUE DE LA MODELISATION DES TRANSFERTS
COUPLES LORS DE LA SOLIDIFICATION D'UN ALLIAGE, EN VUE DU
CALCUL DES MACROSEGREGATIONS.

La mise en équation et le traitement numérique des transferts couplés lors de la solidification d'un alliage sont des thèmes étudiés depuis de nombreuses années. L'évolution des travaux dans le domaine est en partie liée au développement des outils informatiques.

MEHRABIAN, KEAN et FLEMINGS [64] sont parmi les premiers à avoir présenté un modèle mathématique décrivant les phénomènes de transferts de chaleur, de masse et de quantité de mouvement lors de la solidification d'un alliage binaire (Aluminium-cuivre en l'occurrence). Les principales caractéristiques de leur mise en équations sont les suivantes :

- ils se sont limités aux transferts en régime stationnaire, dans la zone pâteuse colonnaire, d'un lingot solidifié unidirectionnellement (figure A2-1) ; Ils ont donc négligé l'existence éventuelle d'un puits liquide, ainsi que l'aspect transitoire du début et de la fin de la solidification.
- les transferts de quantité de mouvement ont été supposés suivre la loi de Darcy, avec comme moteur du mouvement le retrait à la solidification et les forces volumiques générées par la dépendance linéaire en fraction liquide de la masse volumique du liquide.
- le champ de température a été supposé unidirectionnel, linéaire et horizontal sans gradient de température vertical. Par conséquent, la pente de liquidus de l'alliage étant supposée constante, la composition du liquide varie également linéairement avec la dimension horizontale.
- le transfert de soluté a été décrit suivant l'équation de FLEMINGS [14] obtenue à l'aide d'un bilan de soluté dans le volume élémentaire traversé par du liquide, en supposant qu'il n'y a pas de diffusion de soluté dans la phase liquide. Cette équation est une relation entre la composition du liquide interdendritique et la fraction volumique liquide :

$$\frac{\partial g^l}{\partial t} = - \left(\frac{1-\beta}{1-k} \right) \left(1 + V \frac{\nabla T}{\varepsilon} \right) \frac{g^l}{w^l} \quad (\text{A2-1})$$

avec ε vitesse de refroidissement.

Grâce à ce modèle les auteurs démontrent l'importance de la convection naturelle sur le développement des macroségrégations. Dans la situation présentée figure A2-1 d'un lingot de 10 cm de hauteur avec une zone pâteuse de 5 cm de largeur, la macroségrégation

calculée est approximativement celle observée expérimentalement, à savoir une ségrégation positive en pied ($\Delta\text{Cu}/\text{Cu} = 5$ à 10%), une ségrégation négative en tête (de même intensité), et une teneur en cuivre égale à la teneur nominale de l'alliage dans le corps du lingot.

Malgré une description extrêmement sommaire des aspects thermiques et hydrodynamique du problème à résoudre, les résultats obtenus sont encourageants. Il est évident que le cas de figure choisi est éloigné de la solidification d'un lingot de forge, cependant cette approche, la première dans le genre, reste une référence dans le domaine. Neuf années plus tard, FUJII, POIRIER et FLEMINGS [48] présentent une modélisation des transferts couplés lors de la solidification d'un acier. Les améliorations apportées comparativement au modèle précédent sont les suivants :

- les transferts thermiques sont décrits suivant une équation de même nature que l'équation () du texte principal, exprimée avec la variable température et prenant en compte le retrait à la solidification :

$$(1 - \beta g^l) \frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \nabla^2 T - \frac{L}{c_p} \frac{\partial g^l}{\partial t} - (1 - \beta) g^l \mathbf{V} \cdot \nabla T \quad (\text{A2-2})$$

- plusieurs éléments d'alliage sont pris en compte dans l'écriture mathématique du transfert de soluté. Leur transfert est décrit avec l'équation de FLEMINGS, mais le cas particulier du carbone, élément qui diffuse dans la phase solide, est pris en compte en supposant qu'il diffuse instantanément.

- la masse volumique est supposée dépendre de la température et de la teneur du liquide en éléments d'alliage suivant la relation :

$$\rho^l = \rho_0^l + \sum_{i=1}^n \beta_i w_i^l + \beta_T T^l \quad (\text{A2-3})$$

Par contre ils se placent dans le même cas de figure que MEHARABIAN et al., à savoir un domaine uniquement pâteux et une solidification unidirectionnelle. Ils emploient également l'équation de Darcy pour décrire l'aspect hydrodynamique du problème.

Grâce à la prise en compte de la présence simultanée de plusieurs éléments d'alliage, ils montrent que le mouvement du fluide dépend largement de la composition initiale de l'acier ; d'après eux, le molybdène joue un rôle favorable sur les ségrégations car il limite les variations de masse volumique du liquide interdendritique durant la solidification.

SZEKELY et JASSAL [67] proposent une mise en équations des transferts couplés lors de la solidification d'une solution de chlorure d'ammonium avec 30 % d'eau dans une géométrie identique aux précédentes. Leur approche a ceci d'original par rapport à celles présentées précédemment qu'elle prend en compte l'existence du puits liquide. Ainsi le

transfert de quantité de mouvement dans cette partie est modélisé par l'équation de Navier-Stokes. En outre le mouvement du fluide dans le milieu poreux est décrit par une équation plus complète que celle de Darcy :

$$\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + \mathbf{V} \nabla \mathbf{V} = - \frac{1}{\rho} \nabla P - \frac{\nu}{K} \mathbf{V} - \mathbf{g} \quad (\text{A2-4})$$

Par contre le retrait à la solidification est négligé et le transfert de soluté n'est pas traité.

Ils ne semblent pas employer la notion de milieu unique équivalent car ils écrivent les équations de transfert dans chacun des milieux : solide, pâteux et liquide. Cependant ils utilisent des variables de mélange dans la zone pâteuse, au moins pour établir les équations fondamentales de leur modèle.

Ils montrent que le mouvement du liquide dans la zone pâteuse est inversé par rapport à celui dans le puits liquide (figures A2-2 a et b), mais ils ne semblent pas mettre en évidence l'interaction entre ces deux mouvements.

MAPLES et POIRIER [68] présentent également une modélisation mathématique de la solidification d'un alliage. Ils se placent eux aussi dans le cas décrit par la figure A-1. Leur approche est en tout point similaire à celle de MEHRABIAN et al., à ceci près qu'ils traitent le problème transitoire initial, stationnaire et transitoire final. Ils retrouvent par le calcul une ségrégation positive sur la face qui s'est solidifiée en premier (ségrégation dite "inverse") couramment observée dans la réalité. Par contre ils prédisent une ségrégation négative dans la dernière zone à se solidifier, alors qu'elle n'est pas observée dans la pratique.

OHNAKA et FUKUSAKO [4] sont les premiers à avoir présenté un modèle mathématique et numérique de la solidification d'un lingot de forge. Les principales caractéristiques de leur mise en équation sont les suivantes :

- la solution initiale en température est uniforme, ainsi que celle en vitesse qui en outre est nulle.
- la loi de Darcy est appliquée dans la zone pâteuse et également dans le puits liquide où la perméabilité est supposée très grande.
- les phénomènes hydrodynamiques dans le liquide surchauffé ne sont pas pris en considération.
- le transfert de soluté n'est pas traité, les auteurs estimant que la connaissance des champs de température et de vitesse permet une bonne estimation de la position des ségrégations en A et en V. L'influence de l'évolution de la composition du liquide sur la masse volumique est prise en compte à l'aide d'une dépendance linéaire de ρ^l avec la température qui est caractéristique de l'acier étudié.

Les auteurs montrent l'importance extrême de la perméabilité de la zone pâteuse sur les champs de vitesse et de pression dans le lingot en cours de solidification. Ils

reconnaissent que la prédiction de la position des ségrégations en A et en V sort du cadre d'un modèle uniquement thermique et hydrodynamique, et qu'elle nécessiterait une mise en équations plus complète des phénomènes de transfert.

L'originalité de leur travail repose sur leur approche différente de celles déjà décrites : ils ont concentré leurs efforts sur les transferts de chaleur et de quantité de mouvement, ainsi que sur le couplage des deux transferts, sans se focaliser sur le transfert de soluté durant la solidification

Cet accent sur la notion de couplage et sur la description fine des aspects thermiques et hydrodynamiques caractérise également les travaux sur la solidification des alliages réalisés par les

spécialistes en phénomènes de transfert.

Les travaux de BENNON et INCROPERA [31, 32], VOLLER, BRENT et PRAKASH [33] ont sur ce sujet plusieurs points communs :

- l'alliage considérée est uniquement binaire, la solidification d'un liquide tel que l'acier n'a pas été abordé.

- les trois transferts de chaleur, masse et quantité de mouvement sont pris en compte ainsi que tous leurs couplages respectifs, ce qui donne à leur approche un caractère très complet. Cependant ils n'est pas possible à partir de ces publications d'avoir une idée précise de la manière dont sont pris en compte tous ces couplages.

- le puits liquide, la zone pâteuse et le solide sont représentés à l'aide d'un milieu unique équivalent dont la perméabilité est l'une des principales caractéristiques, d'une manière analogue à ce qui est présenté dans la deuxième partie de notre travail.

BENNON et INCROPERA présentent une mise en équations des transferts qui ne postule pas l'immobilité du solide ni l'absence de retrait à la solidification. Cependant les applications numériques qu'ils présentent reprennent ces deux hypothèses particulières. VOLLER, BRENT et PRAKASH ont la même attitude vis à vis de ces deux phénomènes physiques. En fait, moyennant ces deux hypothèses, les deux mises en équations proposées sont en tout point similaires. L'équation de conservation de la quantité de mouvement diffère légèrement de celle présentée dans la deuxième partie de ce texte (elle même adaptée des travaux de BECKERMANN et VISKANTA [30]) ; en effet dans le cadre des deux hypothèses énoncées précédemment elle prend la forme :

$$\rho_{\text{ref}} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + \rho_{\text{ref}} (\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{V} = -\nabla P + \mu \nabla^2 \mathbf{V} - \frac{\mu}{K} \mathbf{V} - \rho_{\text{ref}} [\beta_T (T - T_{\text{ref}}) + \beta_i (w_i - w_{i\text{ref}})] \mathbf{g} \quad (\text{A2-5})$$

Concernant l'équation de transfert de chaleur, BENNON et INCROPERA ainsi que VOLLER et al. proposent une formule identique à celle présentée dans la deuxième partie de ce texte, si on se place encore une fois dans le cadre d'un solide immobile et d'un

retrait à la solidification négligeable. Cette remarque est également valable pour l'équation générale du transfert de soluté.

BENNON et INCROPERA présentent une application numérique simulant la solidification d'une solution $\text{H}_2\text{O}-\text{NH}_4\text{Cl}$ dans une cavité rectangulaire. La carte de composition calculée en fin de solidification évoque une empreinte Baumann avec des ségrégations en A (figures A2-3 et 4). Ils interprètent ce résultat comme un premier pas vers la modélisation de la formation des veines sombres. VOLLER et al. ont également réalisé une application numérique sur la solidification d'une solution $\text{H}_2\text{O}-\text{NH}_4\text{Cl}$, mais cette fois dans une cavité carrée. La carte de composition calculée en fin de solidification ne montre pas les mêmes caractéristiques que celle présentée précédemment par BENNON et INCROPERA (figures A2-5 et 6). En effet on constate simplement que les parties les dernières à se solidifier sont les plus riches en soluté, avec cependant l'avancée d'une ségrégation positive de la partie haute du système vers le coeur, rappelant vaguement la forme d'un canal ségrégué. Les différences entre les cartes présentées ne sont pas explicables simplement.

Cette revue bibliographique montre l'intérêt porté à la modélisation mathématique et numérique de la solidification des alliages depuis les années 1960, ainsi que la nécessité d'une approche pluridisciplinaire associant métallurgie et phénomènes de transfert.

ANNEXE 3

DESCRIPTION SOMMAIRE DE LA METHODE DES VOLUMES FINIS

PATANKAR [41] introduit les volumes finis par l'intermédiaire de la méthode des résidus pondérés ; écrivons une équation aux dérivées partielles sous la forme :

$$L(\phi) = 0 \quad (\text{A3-1})$$

Si Φ est une solution approchée de cette équation, alors la substitution de ϕ par Φ donne un résidu R :

$$R = L(\Phi) \quad (\text{A3-2})$$

L'objectif est de minimiser ce résidu. Dans cette optique, écrivons

$$\int_{\Omega} WR \, d\Omega = 0 \quad (\text{A3-3})$$

W est une fonction à choisir appelée fonction de pondération, et Ω domaine de calcul. Si le domaine de calcul est divisé en domaines élémentaire ω_j il y aura autant d'équations de résidus pondérés que de domaines élémentaires :

$$\int_{\omega_j} W_j R_j \, d\omega_j = 0 \quad (\text{A3-4})$$

La fonction de pondération W_j la plus simple est égale à l'unité sur le domaine ω_j et est nulle partout ailleurs. Dans ce cas la méthode des résidus pondérés prend le nom de formulation par volumes de contrôle, ou encore de méthode des volumes finis.

La technique consiste donc à diviser le domaine de calcul en domaines élémentaires. L'équation aux dérivées partielles prise comme modèle est ensuite intégrée sur chaque volume de contrôle. Pour ce faire, une relation simple est choisie entre la grandeur recherchée au point caractéristique du volume et la même grandeur recherchée au point caractéristique de chacun des volumes voisins.

ANNEXE 4

DISCRETISATION PAR LA METHODE DES VOLUMES FINIS DE L'EQUATION
DE DIFFUSION-CONVECTION

Une fois choisie le schéma implicite de discrétisation en temps, ainsi que le schéma de puissance d'interpolation, il est possible de déterminer la forme discrétisée de l'équation générale dont l'expression est la suivante :

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\nabla\phi) = \nabla \cdot (\Gamma\nabla\phi) + S \quad (\text{A4-1})$$

Notons J_x la somme des flux convectifs et diffusifs dans la direction x et J_y la même somme dans la direction y , soit :

$$J_x = \rho u \phi - \Gamma \frac{\partial\phi}{\partial x}$$

$$J_y = \rho v \phi - \Gamma \frac{\partial\phi}{\partial y}$$

L'équation générale prend alors l'expression :

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} = S \quad (\text{A4-2})$$

L'intégrale de cette équation sur l'espace et le temps s'écrit :

$$\int_w^c \int_s^n \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dx dy dt = \int_w^c \int_s^n \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial J_x}{\partial x} dx dy dt$$

$$+ \int_w^c \int_s^n \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial J_y}{\partial y} dx dy dt + \int_w^c \int_s^n \int_t^{t+\Delta t} S dx dy dt \quad (\text{A4-3})$$

L'expression (A4-3) se met facilement sous la forme :

$$\int_w^c \int_s^n \int_t^{t+\Delta t} \rho\phi dx dy = \int_w^c \int_s^n \int_t^{t+\Delta t} J_x dy dt$$

$$+ \int_w^c \int_s^n \int_t^{t+\Delta t} J_y dx dt + \int_w^c \int_s^n \int_t^{t+\Delta t} S dx dy dt \quad (\text{A4-4})$$

Notons ϕ_P^0 et ρ_P^0 la valeur de ϕ et de ρ au point P à l'instant t. Il vient alors :

$$(\rho_P \phi_P - \rho_P^0 \phi_P^0) \Delta x \Delta y + \Delta t (J_e - J_w + J_n - J_s) = (S_c + S_P \phi_P) \Delta x \Delta y \Delta t \quad (\text{A4-5})$$

(Une approximation commode permettant de passer des équations (A4-4) à (A4-5) consiste à linéariser le terme source S).

Par ailleurs l'équation de la conservation de la masse s'écrit de façon générale :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{V}) = 0 \quad (\text{A4-6})$$

Si nous l'intégrons sur le même volume de contrôle il vient :

$$(\rho_P \phi_P - \rho_P^0 \phi_P^0) \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} + F_e - F_w + F_n - F_s = 0 \quad (\text{A4-6})$$

avec :

$$F_e = (\rho u)_e \Delta y \quad (\text{A4-7a})$$

$$F_w = (\rho u)_w \Delta y \quad (\text{A4-7b})$$

$$F_n = (\rho v)_n \Delta x \quad (\text{A4-7c})$$

$$F_s = (\rho v)_s \Delta x \quad (\text{A4-7d})$$

Si nous multiplions l'équation (A4-6) par ϕ_P et que nous soustrayons cette équation à l'équation (A4-5) il vient :

$$\begin{aligned} (\phi_P - \phi_P^0) \rho_P^0 \frac{\Delta x \Delta x}{\Delta t} + (J_e - F_e \phi_P) - (J_w - F_w \phi_P) + (J_n - F_n \phi_P) - (J_s - F_s \phi_P) \\ = (S_c + S_P \phi_P) \Delta x \Delta x \end{aligned} \quad (\text{A4-8})$$

Cette transformation est utile car elle permet d'obtenir une forme discrétisée dont le coefficient a_P est égal à la somme des coefficients des voisins, dans le cas où le terme source est nul et où le problème est indépendant du temps (COMBEAU et JARDY [44]).

En utilisant un schéma puissance on obtient :

$$J_e - F_e \phi_P = a_E (\phi_P - \phi_E) \quad (\text{A4-9a})$$

$$J_w - F_w \phi_P = a_W (\phi_P - \phi_W) \quad (\text{A4-9b})$$

avec :

$$\begin{aligned} a_E &= D_e A(P_e) + \text{Max}(-F_e, 0) \\ a_W &= D_w A(P_w) + \text{Max}(F_w, 0) \end{aligned}$$

où :

$$D_e = \frac{\Gamma_e}{(\delta x)_e} \Delta y \quad \text{et} \quad D_w = \frac{\Gamma_w}{(\delta x)_w} \Delta y$$

Nous obtenons finalement l'équation discrétisée :

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b \quad (\text{A4-10})$$

avec :

$$\begin{aligned} a_E &= D_e A(P_e) + \text{Max}(-F_e, 0) \\ a_W &= D_w A(P_w) + \text{Max}(F_w, 0) \\ a_N &= D_n A(P_n) + \text{Max}(-F_n, 0) \\ a_S &= D_s A(P_s) + \text{Max}(F_s, 0) \\ a_P^0 &= \rho_P^0 \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} \\ b &= S_c \Delta x \Delta y + a_P^0 \phi_P^0 \\ a_P &= a_E + a_W + a_N + a_S + a_P^0 - S_p \Delta x \Delta y \end{aligned}$$

où :

$$\begin{aligned} D_e &= \frac{\Gamma_e}{(\delta x)_e} \Delta y \\ D_w &= \frac{\Gamma_w}{(\delta x)_w} \Delta y \\ D_n &= \frac{\Gamma_n}{(\delta y)_n} \Delta x \\ D_s &= \frac{\Gamma_s}{(\delta y)_s} \Delta x \end{aligned}$$

Les grandeurs F_e , F_w , F_n et F_s sont définies par les relations écrites plus haut. Les nombres de Péclet locaux sont les suivants : $P_e = F_e/D_e$, $P_w = F_w/D_w$, $P_n = F_n/D_n$, $P_s = F_s/D_s$.

ANNEXE 5
DONNEES NUMERIQUES EMPLOYEES DANS LE MODELE

Coefficients de partage

$$k_C = 0,11$$

$$k_{Si} = 0,77$$

$$k_{Mn} = 0,73$$

$$k_{Ni} = 0,9$$

$$k_{Cr} = 0,75$$

$$k_{Mo} = 0,6$$

Pentes de liquidus ($^{\circ}C / \%$)

$$m_C = - 80$$

$$m_{Si} = - 13$$

$$m_{Mn} = - 5$$

$$m_{Ni} = - 3,2$$

$$m_{Cr} = - 1,3$$

$$m_{Mo} = - 7,8$$

Coefficients d' expansion solutal ($kg/m^3/\%$)

$$\beta_C = - 100$$

$$\beta_{Si} = - 87$$

$$\beta_{Mn} = - 14$$

$$\beta_{Ni} = 10$$

$$\beta_{Cr} = - 7$$

$$\beta_{Mo} = - 14$$

Coefficient d' expansion thermique ($kg/m^3/^{\circ}C$)

$$\beta_0 = - 0,625$$

Données sur le fer pur

température de fusion $T_f = 1538 \text{ }^{\circ}C$

masse volumique du fer liquide à T_f : $\rho^0_{Fe} = 7060 \text{ kg/m}^3$

Données thermophysiques de l'acier

conductivité $\lambda = 30 \text{ w/m}^{\circ}C$

capacité calorifique $c_p = 715 \text{ J / kg / }^\circ\text{C}$

viscosité cinématique $\nu = 6.10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$

chaleur latente 309000 J / kg

**AUTORISATION DE SOUTENANCE DE THESE
DU DOCTORAT DE L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE
LORRAINE**

o0o

VU LES RAPPORTS ETABLIS PAR :

**Monsieur DURAND Francis, Professeur, MADYLAM St Martin d'Hères,
Monsieur GOBIN Dominique, Professeur, Université Paris-Sud Orsay.**

Le Président de l'Institut National Polytechnique de Lorraine, autorise :

Monsieur ROCH François

**à soutenir devant l'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE LORRAINE, une thèse
intitulée :**

"Modélisation de la solidification d'un lingot de forge"

en vue de l'obtention du titre de :

DOCTEUR DE L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE LORRAINE

Spécialité : "SCIENCES & GENIE DES MATERIAUX"

Fait à Vandoeuvre le, 24 Novembre 1992

Le Président de l'I.N.P.L.,

M. LUCIUS

**Pour le Président
Le Vice-Président**



J. Ch. CHEVRIER

INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE LORRAINE

[M] 1992 ROCH, F.2

MODELISATION DE LA SOLIDIFICATION

D'UN LINGOT DE FORGE

THESE

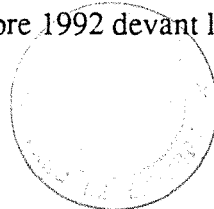
présenté devant l'Institut National Polytechnique de Lorraine
pour obtenir le titre de

Docteur de l'I.N.P.L.
(Science et Génie des Matériaux)

par

François ROCH

soutenu le 9 Décembre 1992 devant la Commission d'Examen



<u>Jury</u> :	Monsieur	Jean-Charles CHEVRIER	Président
	Messieurs	Francis DURAND Dominique GOBIN	Rapporteur Rapporteur
	Madame	Isabelle POITRAULT	Examineur
	Messieurs	Hervé COMBEAU Gérard LESOULT Jean SALEIL	Examineur Examineur Examineur

LISTE DES FIGURES

- Figure I-1 : schéma d'un lingot de forge
Figure I-2 : mode d'introduction du liquide dans la lingotière
Figure I-3 : représentation des zones colonnaires et équiaxes dans un lingot se solidifiant
Figure I-4 : croissance dendritique colonnaire (d'après [7])
Figure I-5 : croissance équiaxe (d'après [7])
Figure I-6 : empreinte Baumann d'un lingot de 35 tonnes en acier au carbone mi-dur masselotté coulé en chute sous vide (d'après [11])
Figure I-7 : mouvement schématisé du liquide interdendritique dans un lingot en cours de solidification (d'après [3])
Figure I-8 : influence du mouvement du liquide interdendritique sur le déroulement de la solidification, effet de la composition du liquide entrant
Figure I-9 : Schématisation du diagramme de phase et effet de la composition du liquide entrant dans un élément de volume pâteux
Figure I-10 : distribution du carbone dans des lingots de 40 tonnes (d'après [26])

- Figure II-1 : schématisation des différentes zones dans un lingot se solidifiant (d'après [3])
Figure II-2 : représentation des différentes échelles d'observation de la zone pâteuse
Figure II-3 : schématisation d'un volume élémentaire représentatif
Figure II-4 : interactions mutuelles entre les trois transferts
Figure II-5 : couplages intégrés dans le modèle
Figure II-6 : schéma du système lingot-lingotière, conditions aux limites et solutions initiales

- Figure III-1 : volume de contrôle pour une variable scalaire
Figure III-2 : volumes de contrôle pour le calcul des vitesses verticale et horizontale
Figure III-3 : organigramme du déroulement du calcul d'un pas de temps suivant l'option de calcul choisi
Figure III-4 : organisation des calculs au cours d'une micro-itération
Figure III-5a : maillage 21X21 irrégulier
Figure III-5b : maillage 37X37 irrégulier
Figures III-6a à f : résultats pour $Ra = 1000$
Figures III-7a à f : résultats pour $Ra = 10000$
Figures III-8a à f : résultats pour $Ra = 100000$
Figures III-9a à f : résultats pour $Ra = 1000000$

Figures III-10a et b : nombre de Nusselt sur les parois verticales pour $Ra = 1000000$

Figure IV-1 : système lingot-lingotière de la coulée expérimentale

Figure IV-2 : maillage

Figure IV-3a à g : Champs calculés de vitesse et de fraction liquide aux temps 17 min, 50 min, 1 h 23 min, 2 h 47 min, 5 h 33 min, 8 h 20 min, 12 h 13 min.

Figure IV-4a : macroségrégations positives calculées

Figure IV-4b : macroségrégations négatives calculées

Figure IV-5 : température dans le liquide mesurée et calculée à 1 m de profondeur

Figure IV-6 : évolution calculée de la température au coeur du lingot

Figure IV-7 : position des thermocouples dans la lingotière

Figure IV-8a : comparaison calcul-expérience (thermocouples 13-14)

Figure IV-8b : comparaison calcul-expérience (thermocouples 19-20)

Figure IV-8c : comparaison calcul-expérience (thermocouples 23-24)

Figure IV-9 : position des points de prélèvement de l'acier

Figure IV-10a : évolution de la composition moyenne en carbone à 0,5 m

Figure IV-10b : évolution de la composition moyenne en carbone à 1 m

Figure IV-10c : évolution de la composition moyenne en carbone à 1,5 m

Figure IV-11a à c : influence de l'estimation de la perméabilité sur le calcul du champ de vitesse au temps 14000 s (environ 4 h)

Figure IV-12a : influence théorique de la perméabilité sur la teneur en carbone à 0,5 m

Figure IV-12b : influence théorique de la perméabilité sur la teneur en carbone à 1 m

Figure IV-12c : influence théorique de la perméabilité sur la teneur en carbone à 1,5 m

Figure IV-13a : influence théorique du coefficient de partage sur la teneur en carbone à 0,5 m

Figure IV-13b : influence théorique du coefficient de partage sur la teneur en carbone à 1 m

Figure IV-13c : influence théorique du coefficient de partage sur la teneur en carbone à 1,5 m

Figure IV-14 : maillage simplifié

Figure IV-15a : influence du maillage sur la teneur en carbone à 0,5 m

Figure IV-15b : influence du maillage sur la teneur en carbone à 1 m

Figure IV-15c : influence du maillage sur la teneur en carbone à 1,5 m

Figure IV-16a : influence théorique de la résistance thermique sur la teneur en carbone à 0,5 m

Figure IV-16b : influence théorique de la résistance thermique sur la teneur en carbone à 1 m

Figure IV-16c : influence théorique de la résistance thermique sur la teneur en carbone à 1,5 m
Figure IV-17 : influence d'une prise de moyenne sur la ségrégation axiale expérimentale
Figure IV-18 : influence d'une prise de moyenne sur la ségrégation axiale calculée
Figure IV-19 : ségrégation axiale expérimentale et calculée
Figure IV-20 : ségrégation axiale moyennée expérimentale et calculée
Figure IV-21 : influence de la perméabilité sur la ségrégation axiale
Figure IV-22 : influence du coefficient de partage du carbone sur la ségrégation axiale
Figure IV-23 : influence du maillage sur la ségrégation axiale
Figure IV-24 : influence de la résistance thermique sur la ségrégation axiale
Figure IV-25 : enveloppe des zones du lingot supposées renfermer des veines sombres
Figure IV-26 : position des veines sombres mesurée et calculée
Figure IV-27 : ségrégation axiale d'un lingot de 110 tonnes
Figure IV-28 : ségrégation calculée et expérimentale à 20 et 30 cm de l'axe du lingot de 110 tonnes
Figure IV-29 : masse volumique de l'acier liquide pour plusieurs teneurs en molybdène
Figure IV-30 : influence du molybdène sur la ségrégation axiale
Figure IV-31 : conséquence d'une trop forte concentration en molybdène sur la ségrégation axiale
Figure IV-32 : taux de ségrégation en fonction de la teneur en molybdène
Figure IV-33 : influence du diamètre sur la ségrégation axiale
Figure IV-34 : influence de la surchauffe sur la ségrégation axiale
Figure IV-35 : influence du masselottage sur la ségrégation axiale
Figure IV-36 : influence de la masselotte sur la forme de la retassure
Figure IV-37 : masse volumique du liquide à 1,45 % de molybdène
Figure IV-38 : ségrégation axiale pour un acier à 1,45 % de molybdène

Figure A1 : évolution de la perméabilité en fonction de la fraction liquide (courbes établies par différents auteurs)

Figure A2-1 : schématisation de l'alliage pâteux modélisé par [64]

Figure A2-2 : mouvement du liquide dans la zone pâteuse calculés par [67]

Figure A2-3 : maillage utilisé par [32]

Figure A2-4 : macroségrégations calculées par [32]

Figure A2-5 : système modélisé par [33]

Figure A2-6 : macroségrégations calculées par [33]

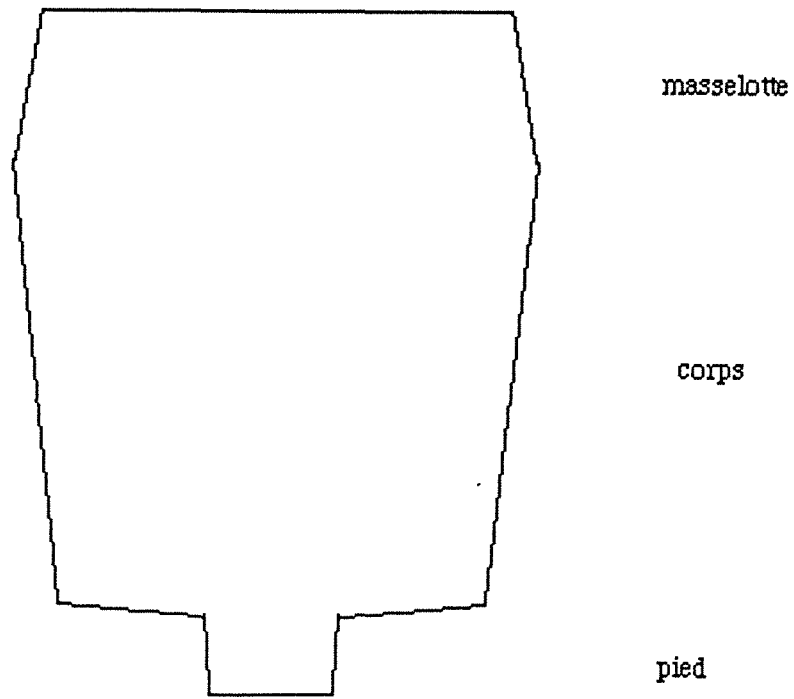


Figure I-1 - Schéma d'un lingot de forge

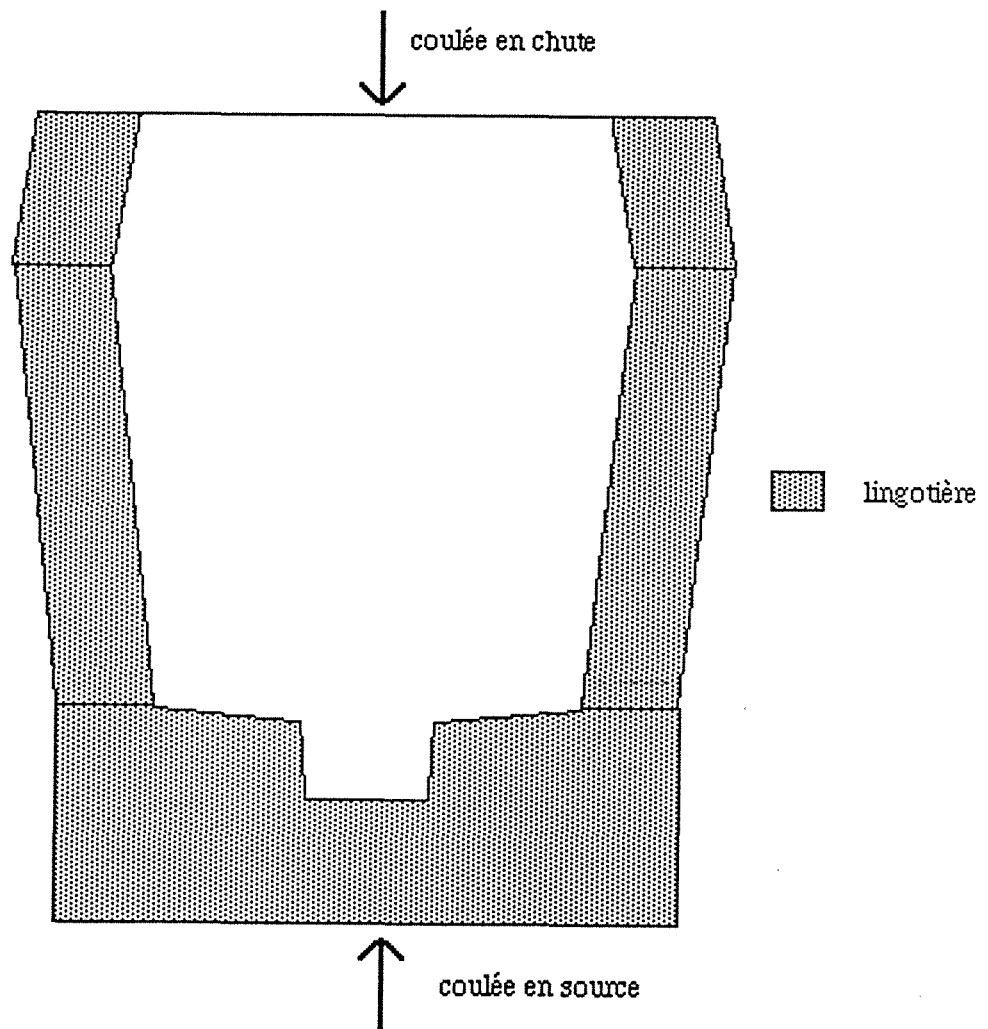


Figure I-2 - Mode d'introduction du liquide dans la lingotière

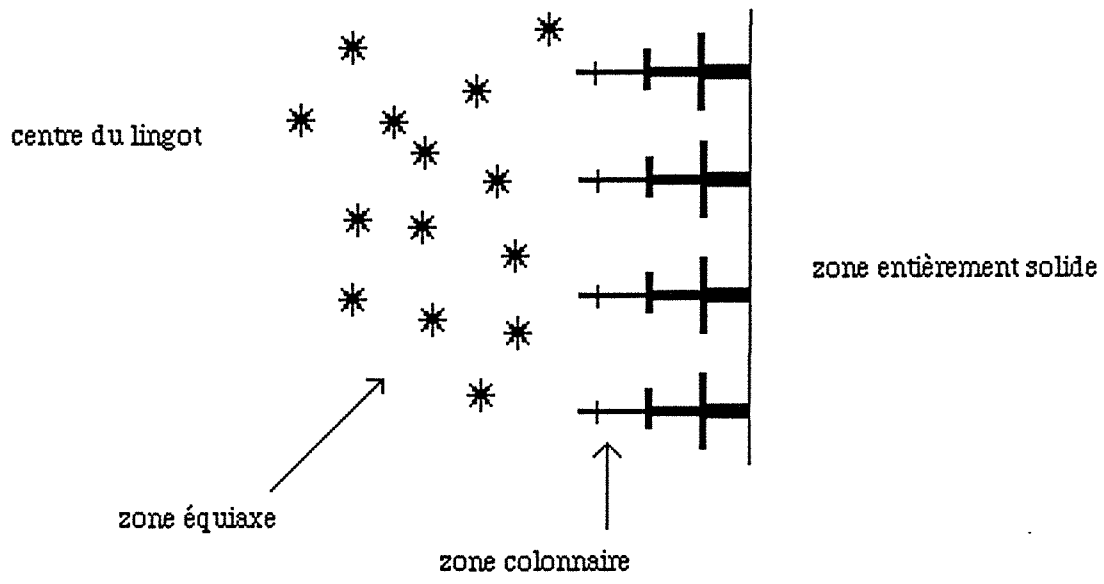


Figure I-3 - Représentation des zones colonnaires et équiaxes dans un lingot se solidifiant

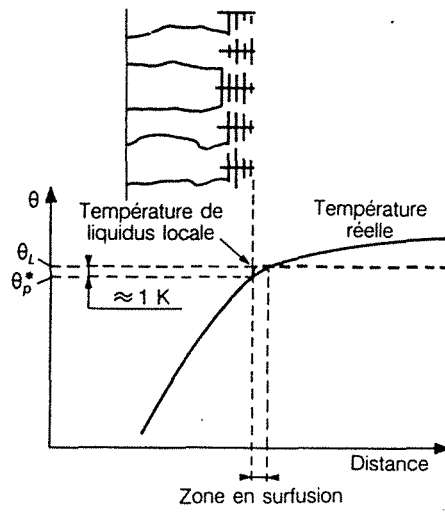


Figure I-4 - Croissance dendritique colonnaire
(D'après [7])

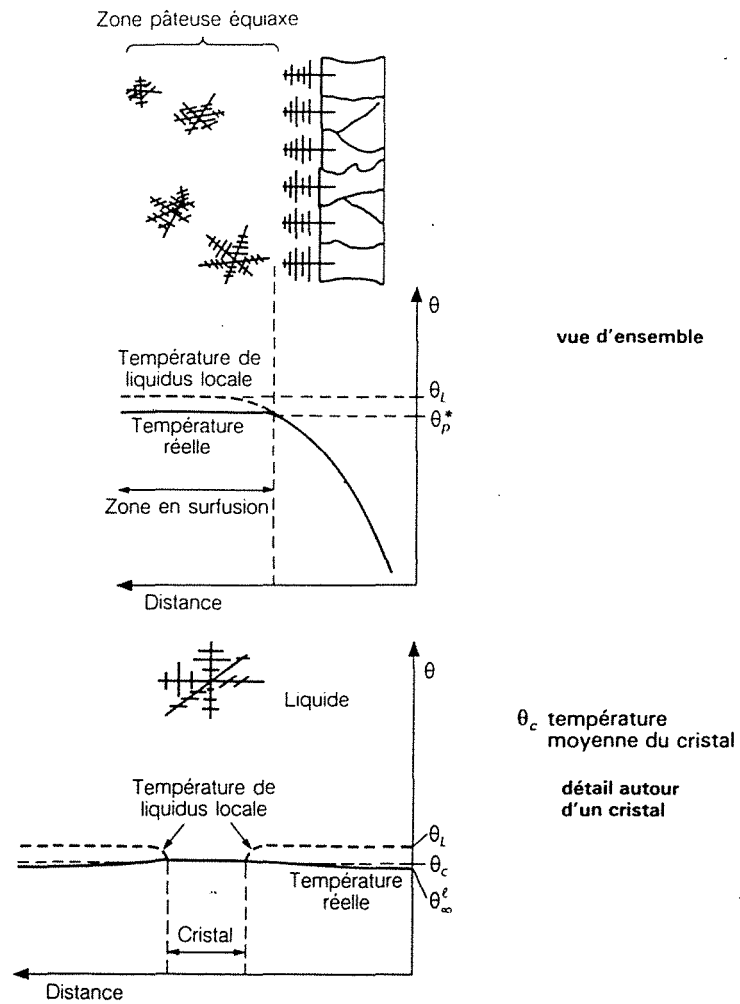


Figure I-5 - Croissance équiaxe
(D'après [7])



Figure I-6
empreinte Baumann d'un lingot de 35 tonnes en acier au carbone mi-dur masselotté
coulé en chute sous vide
(d'après [11])

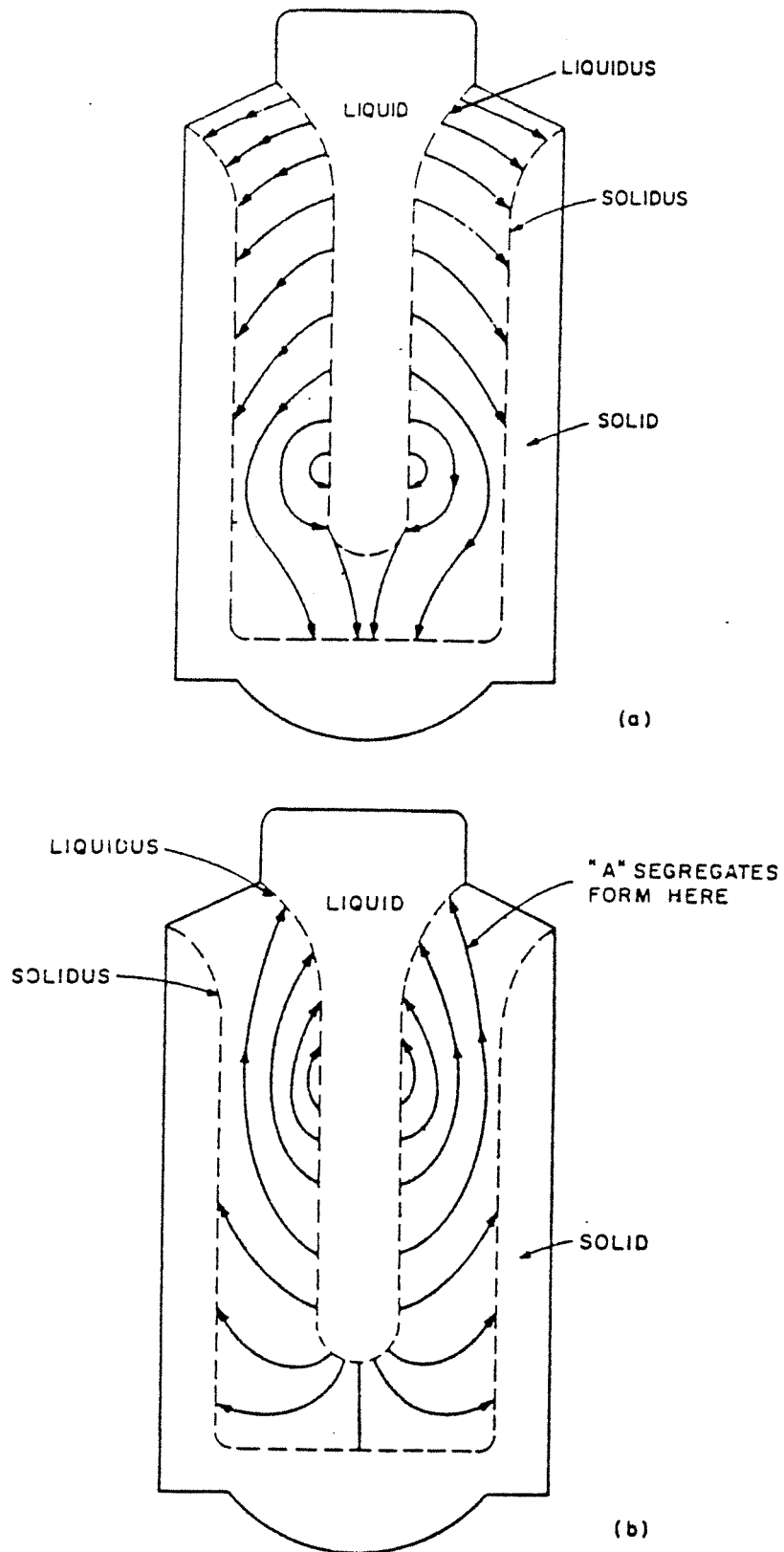
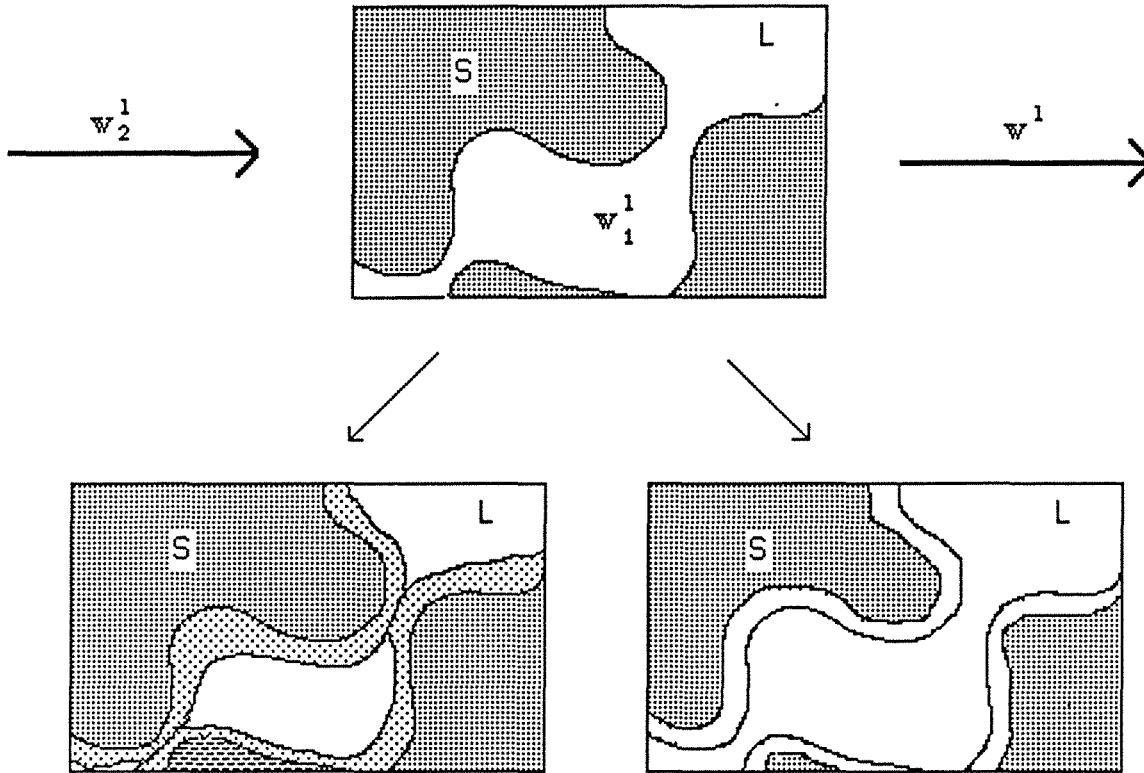


Figure I-7
 mouvement schématique du liquide interdendritique dans un lingot en cours de solidification
 (a) : la masse volumique du liquide augmente durant la solidification
 (b) : la masse volumique du liquide diminue durant la solidification
 (d'après [3])



premier cas

$$w_2^1 < w_1^1$$

accélération de la solidification

second cas

$$w_2^1 > w_1^1$$

ralentissement de la solidification
éventuellement refusion

Figure I-8 - Influence du mouvement du liquide interdendritique sur le déroulement de la solidification, effet de la composition du liquide entrant.

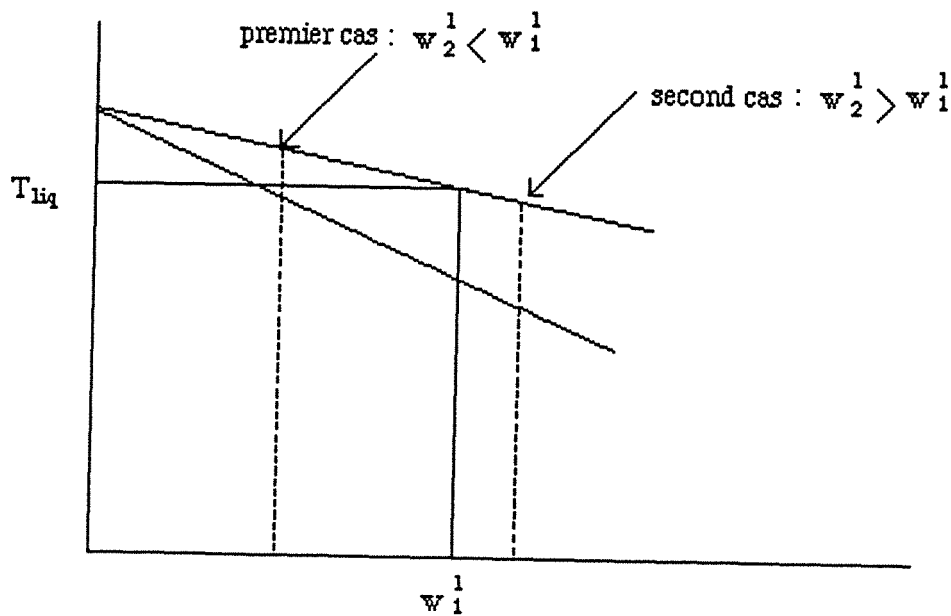


Figure I-9 - Schématisation du diagramme de phase et effet de la composition du liquide entrant dans un élément de volume pâteux.

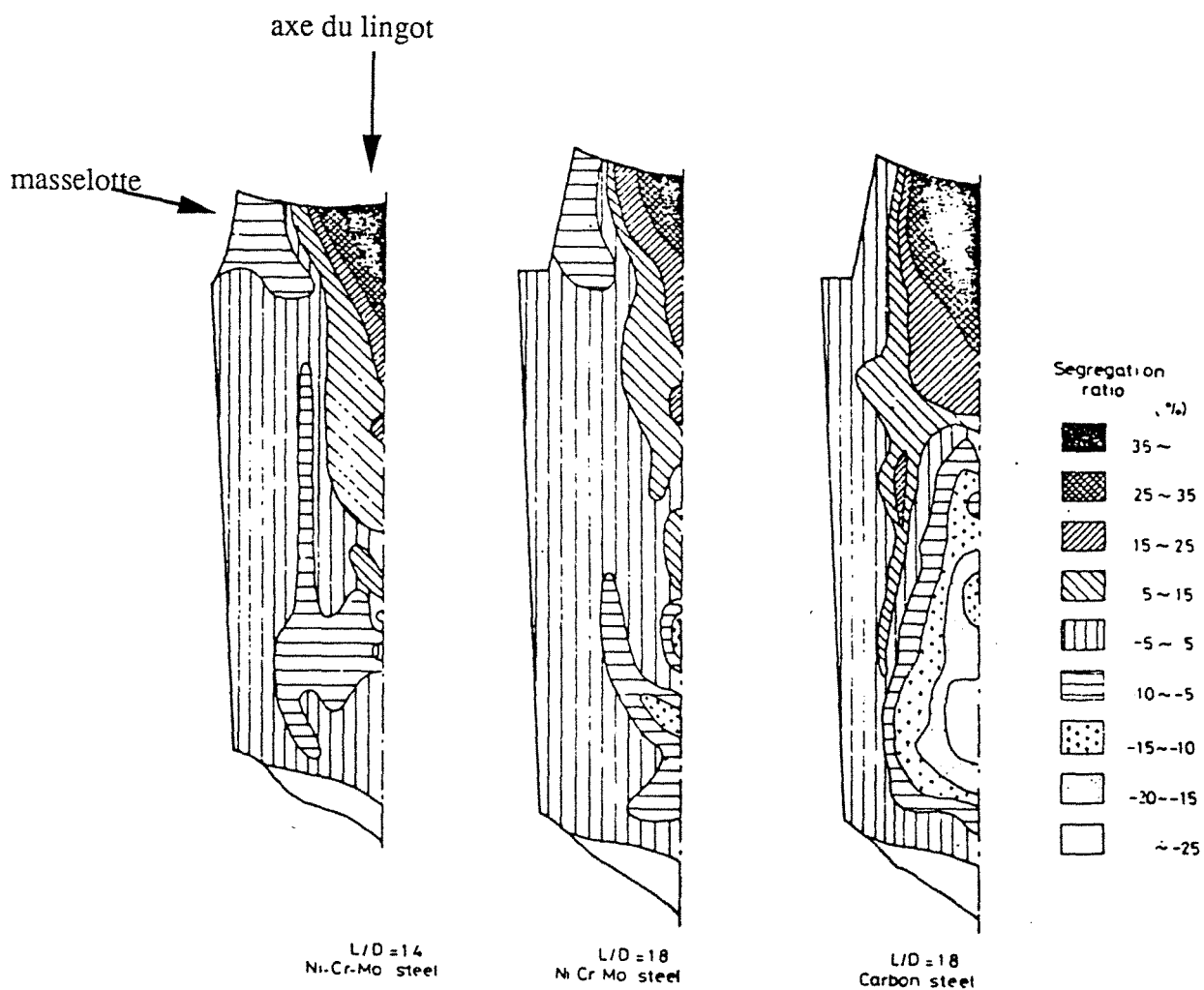


Figure I-10 - Distribution du carbone dans des lingots de 40 tonnes (d'après [26])

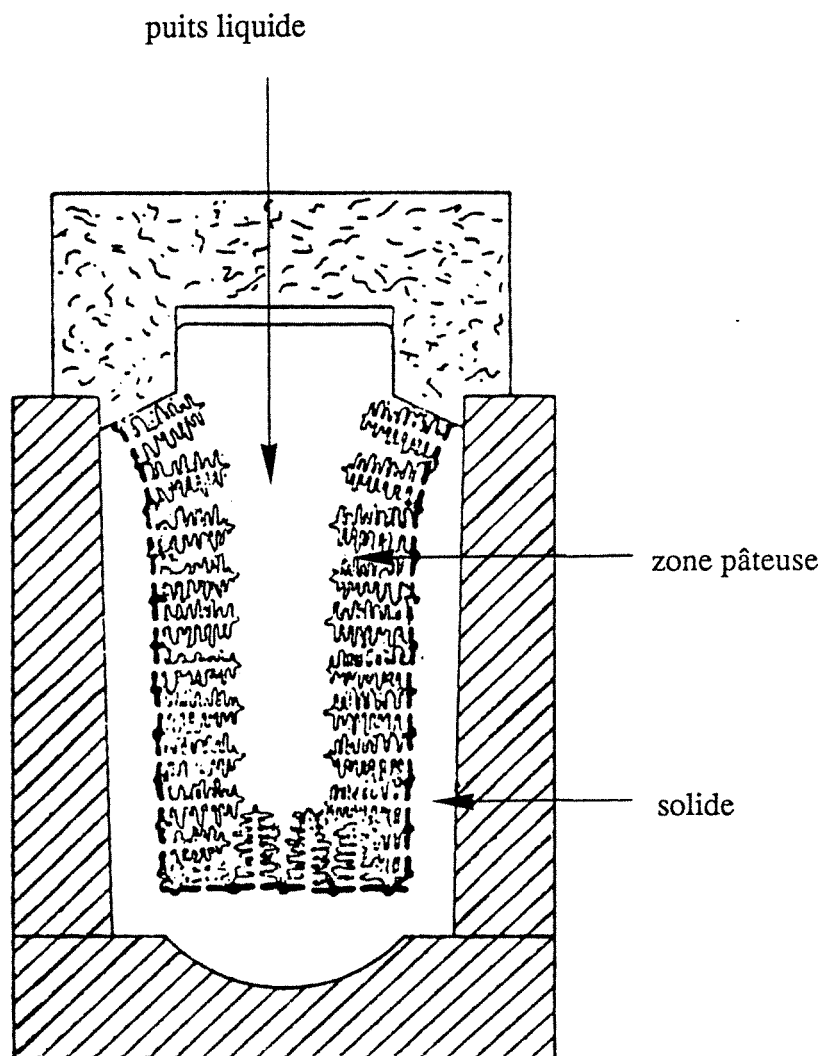


Figure II-1 - Schématisation des différentes zones dans un lingot se solidifiant (d'après [3])

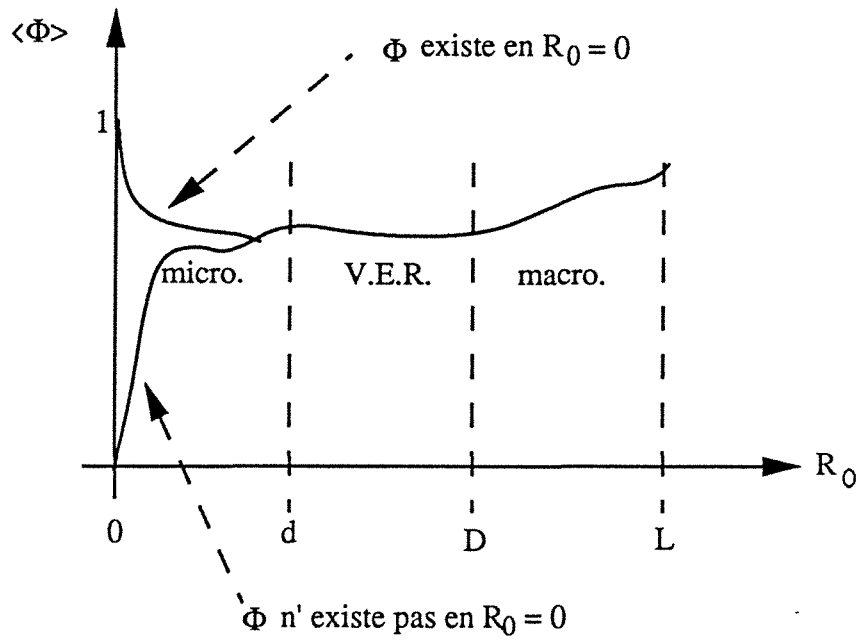


Figure II-2 - Représentation des différentes échelles d'observation de la zone pâteuse

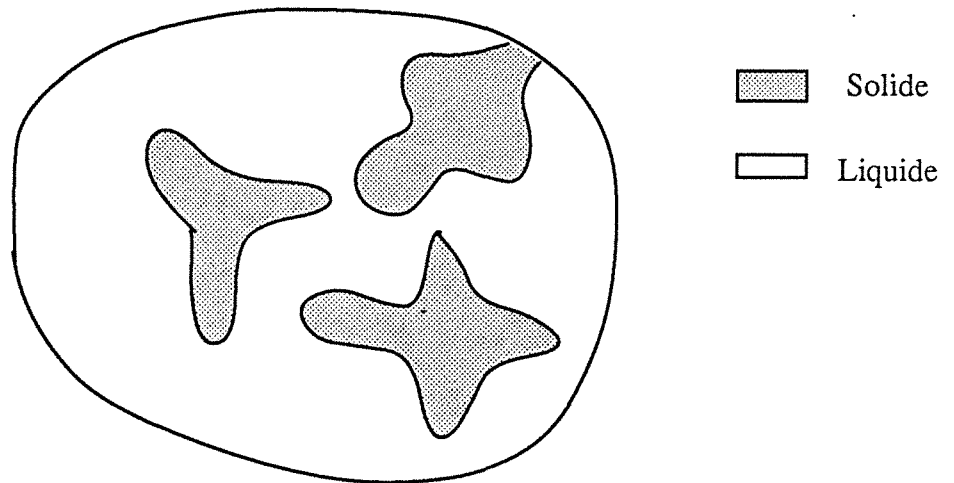


Figure II-3 - Schématisation d'un volume élémentaire représentatif (V.E.R.)

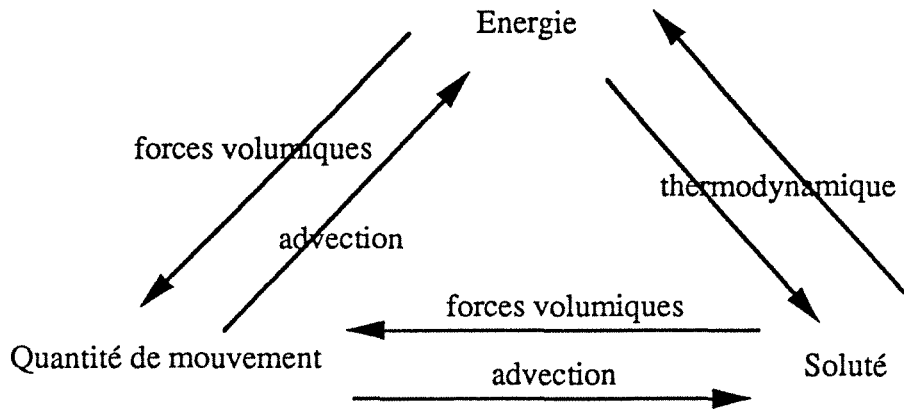


Figure II-4 - Interactions mutuelles entre les trois transferts

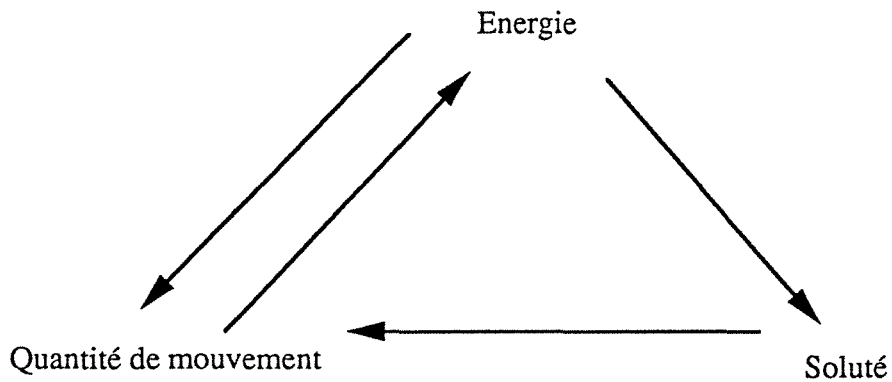


Figure II-5 - Couplages intégrés dans le modèle

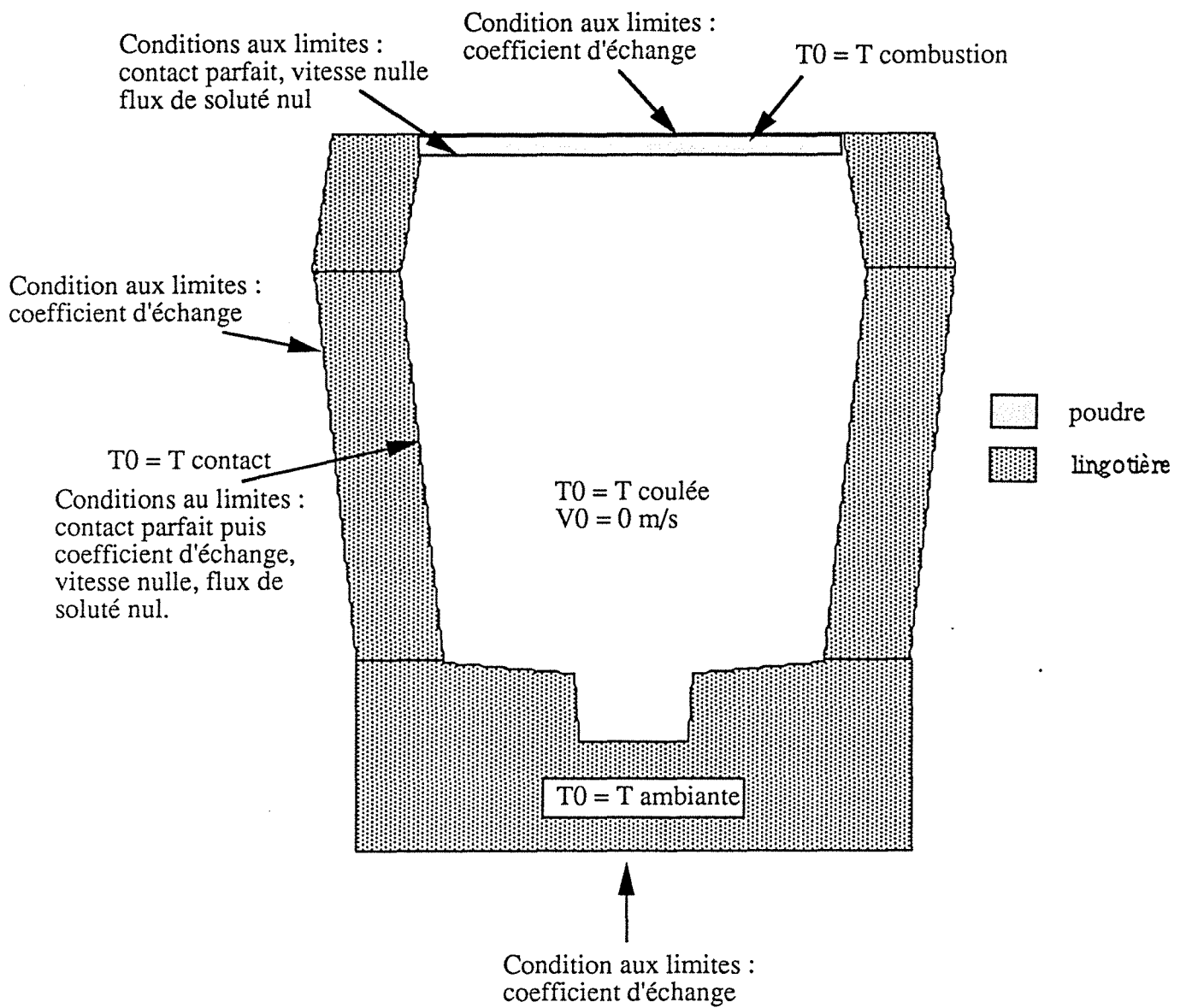


Figure II-6 - Schéma du système lingot-lingotière, conditions aux limites et solutions initiales

Figure III-1
 Volume de contrôle pour
 une variable scalaire

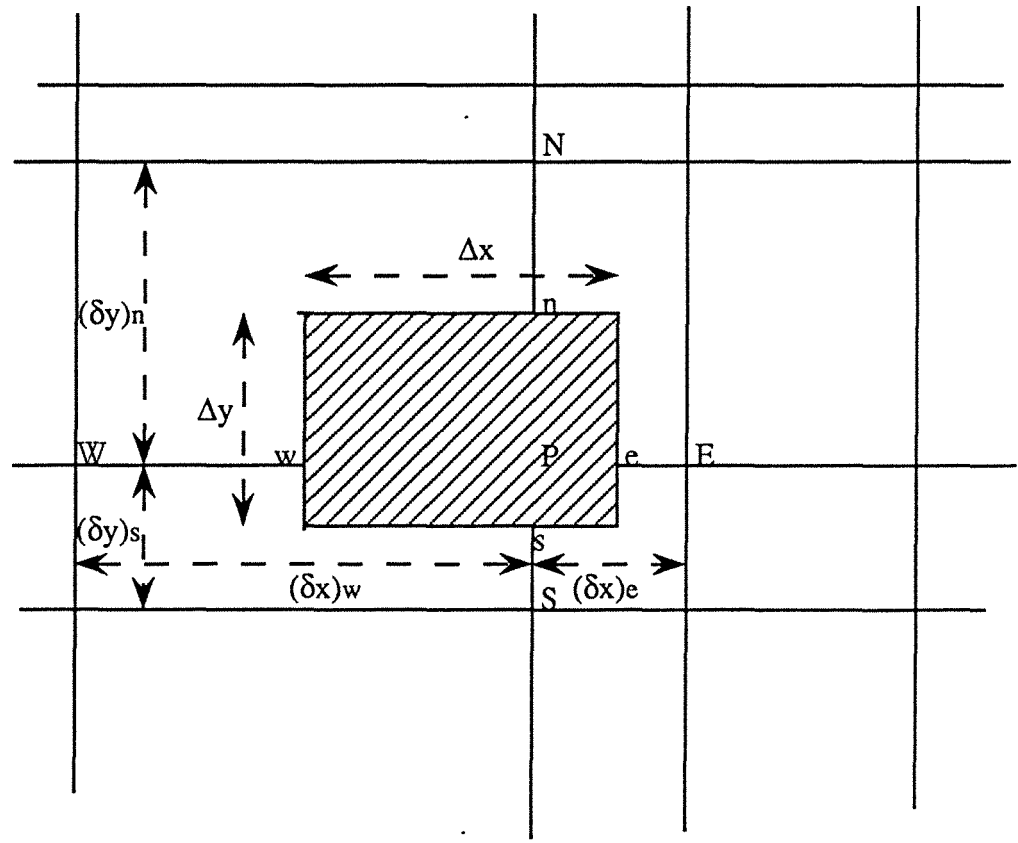


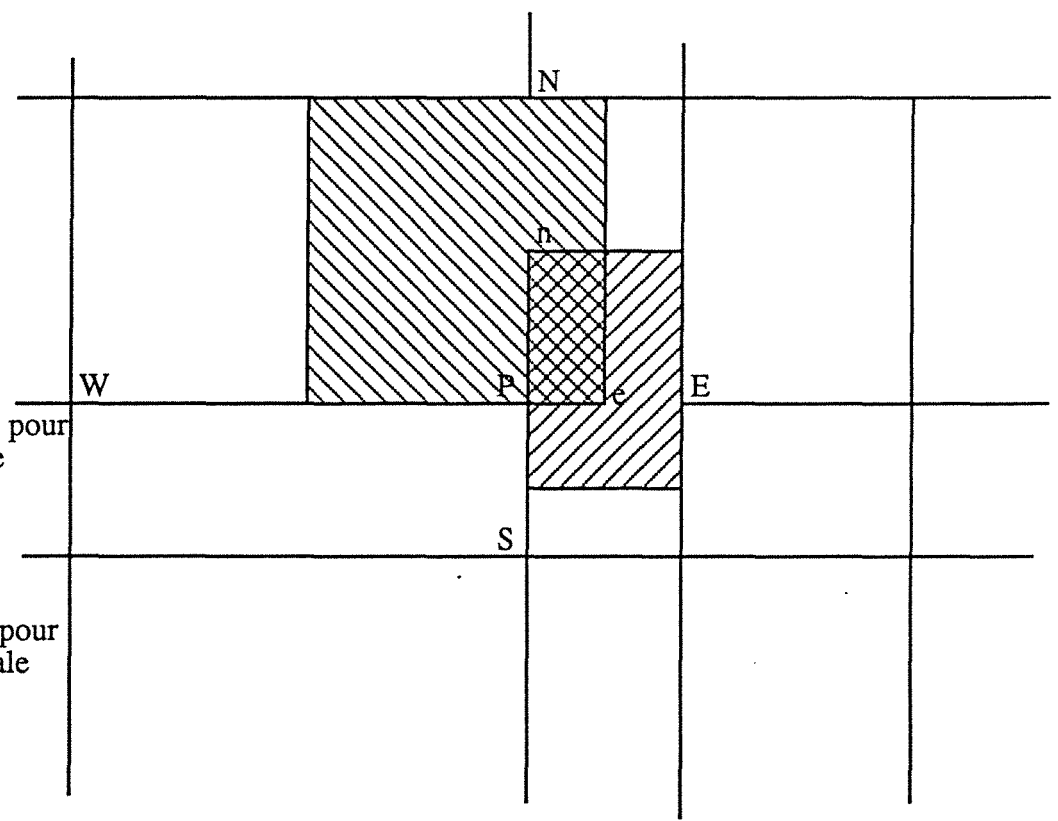


Figure III-2

-  Volume de contrôle pour
une vitesse verticale
-  Volume de contrôle pour
une vitesse horizontale



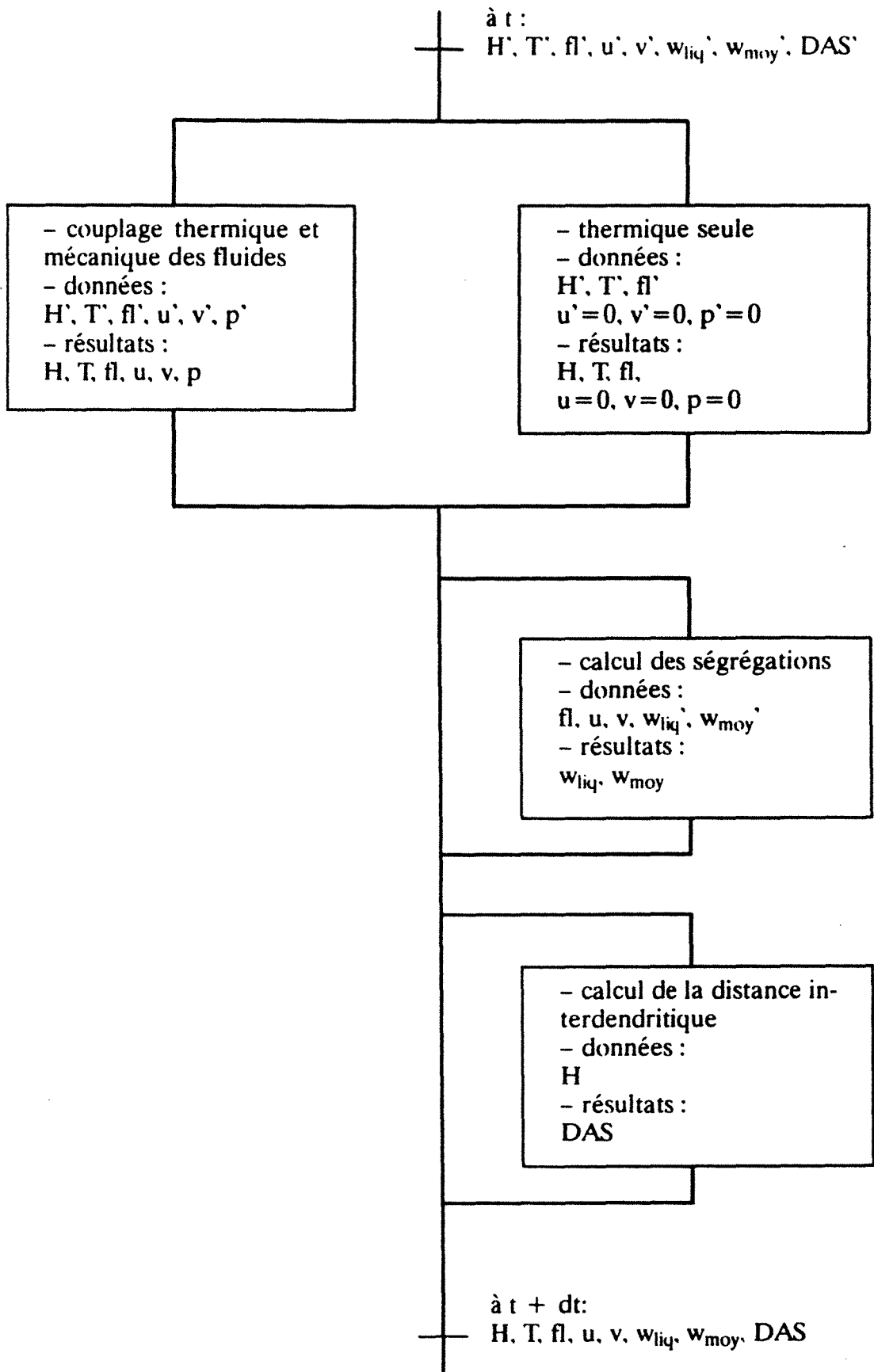


Figure III-3 - Organigramme du déroulement du calcul d'un pas de temps suivant l'option de calcul choisi

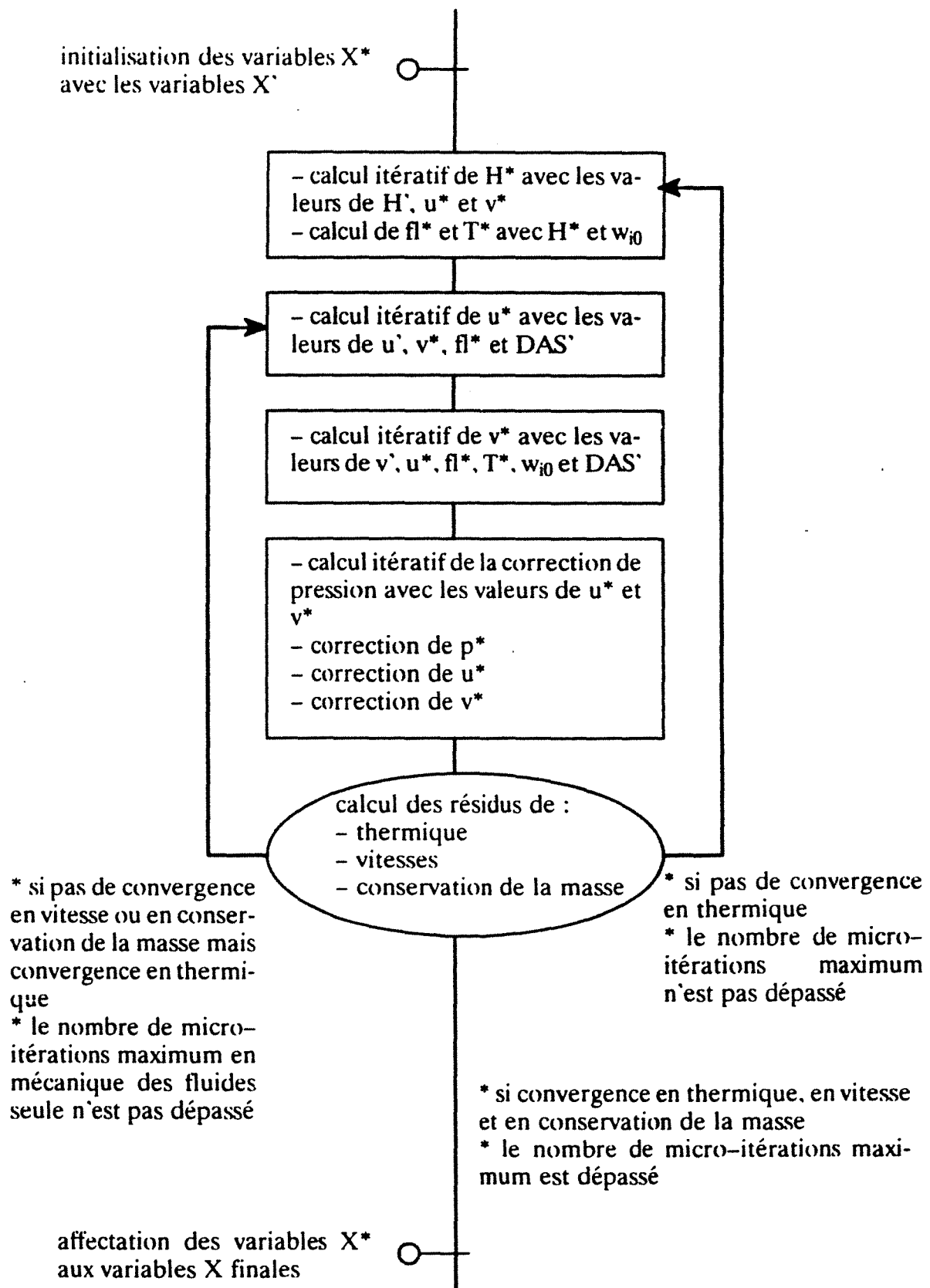


Figure III-4 - Organisation des calculs au cours d'une micro-itération

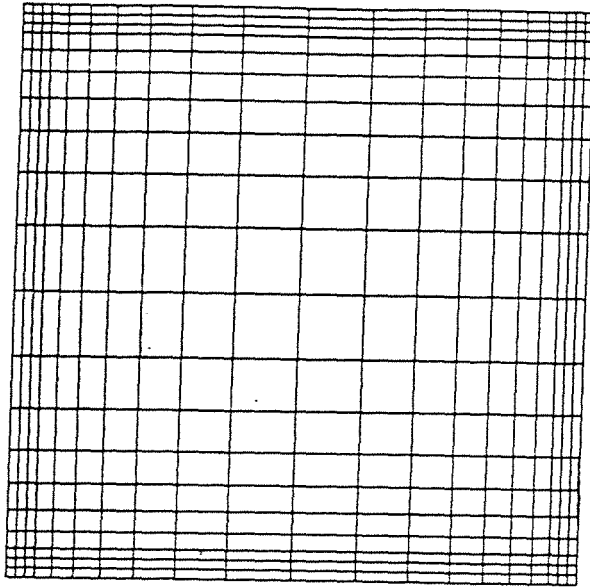


Figure III-5a - Maillage 21X21 irrégulier

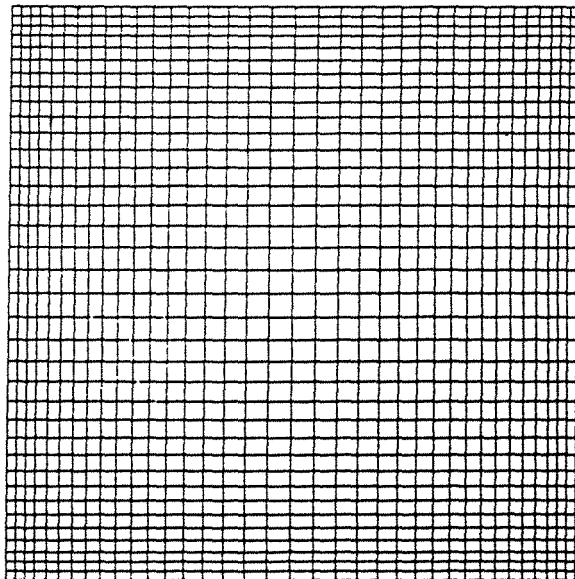
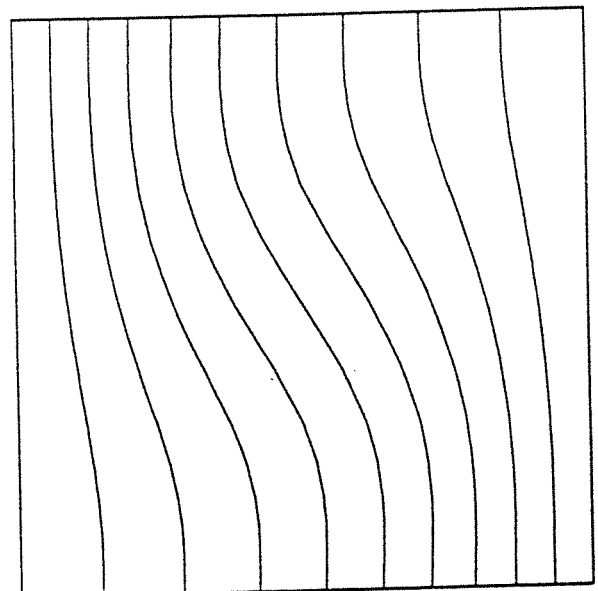
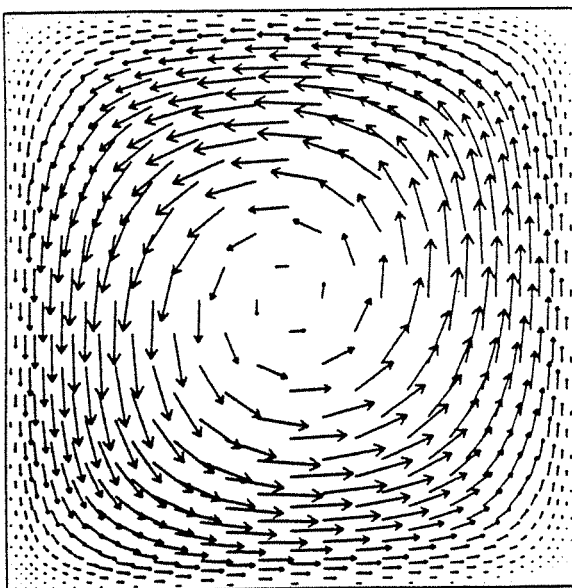
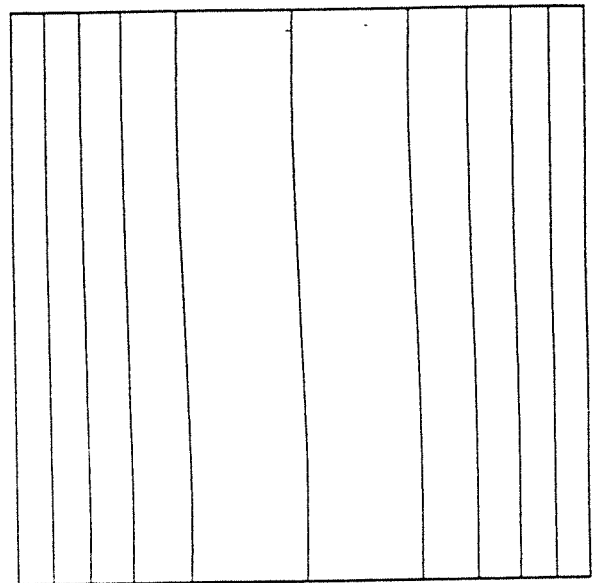
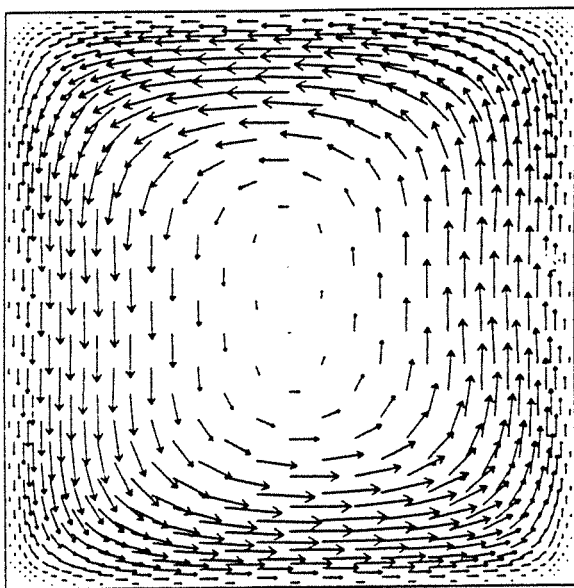
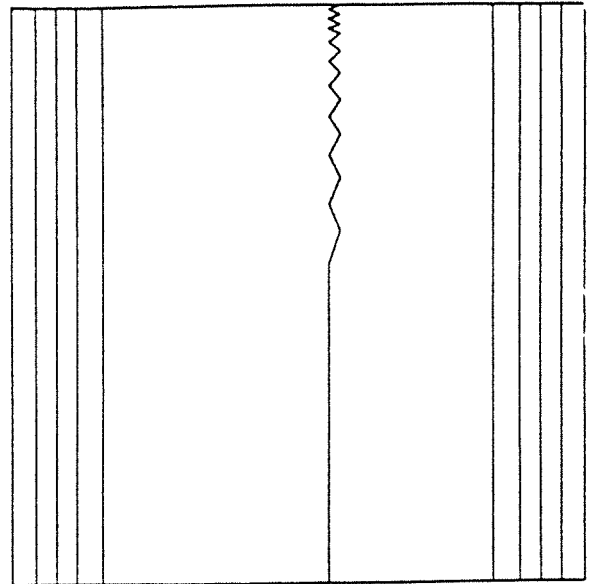
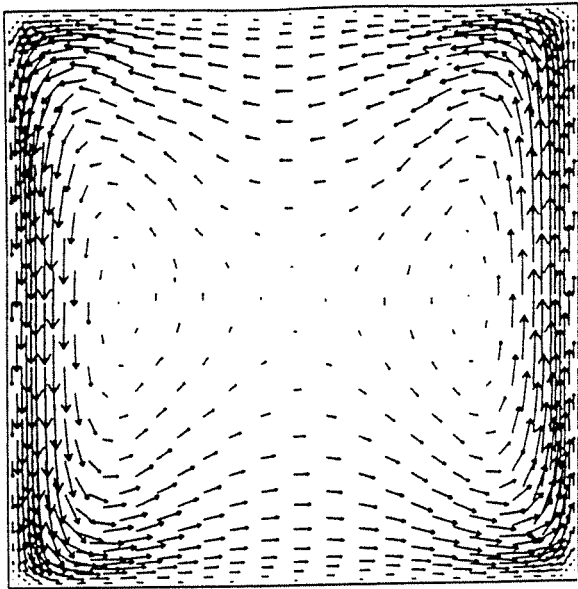
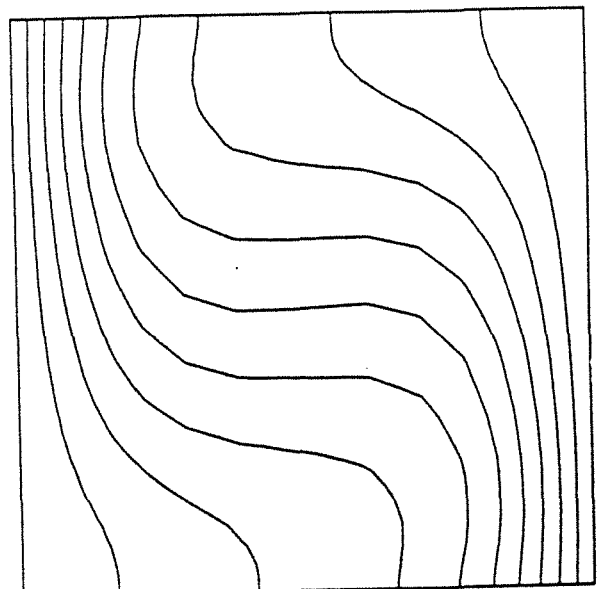
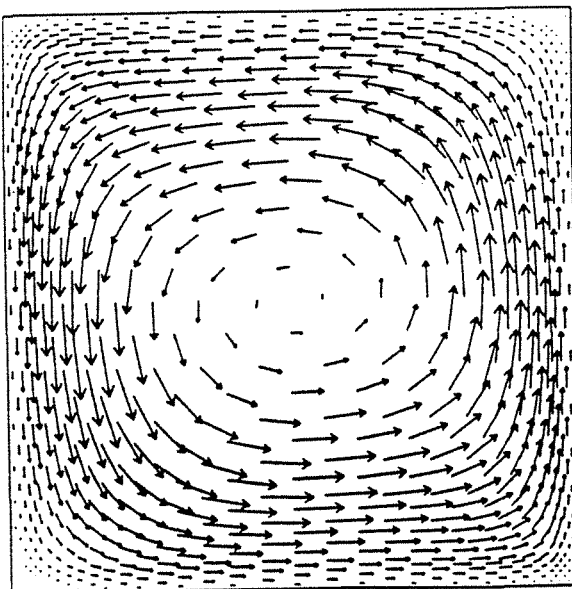
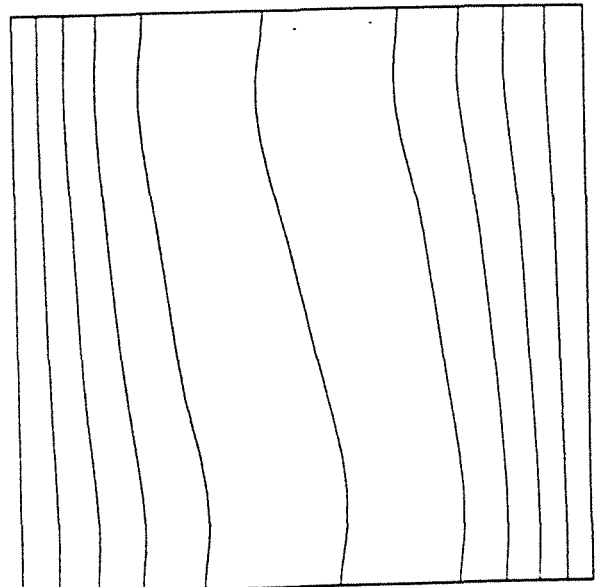
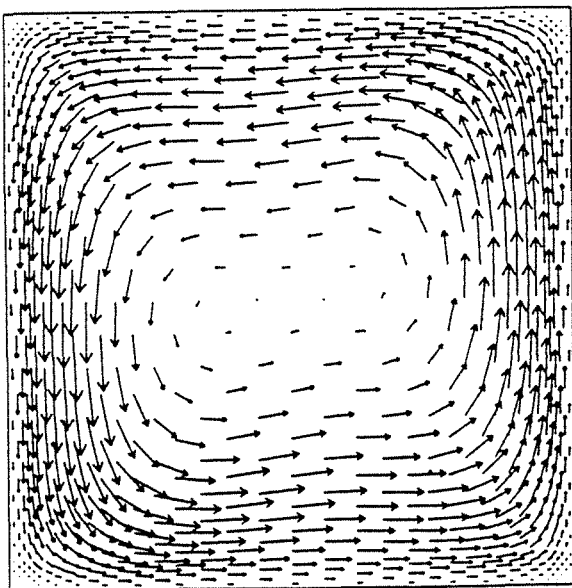
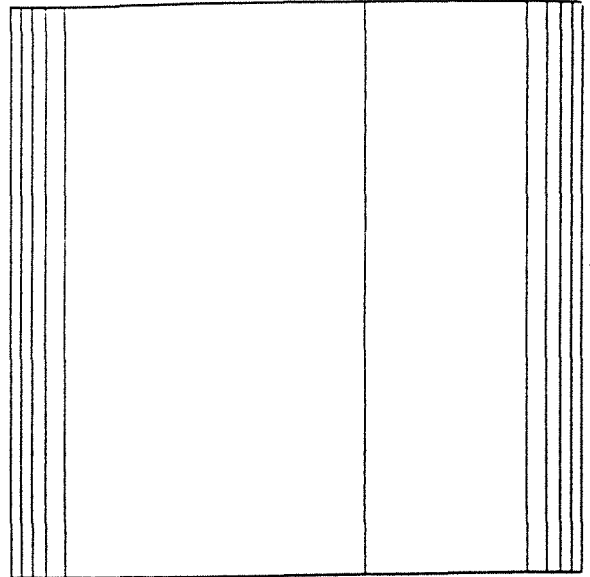
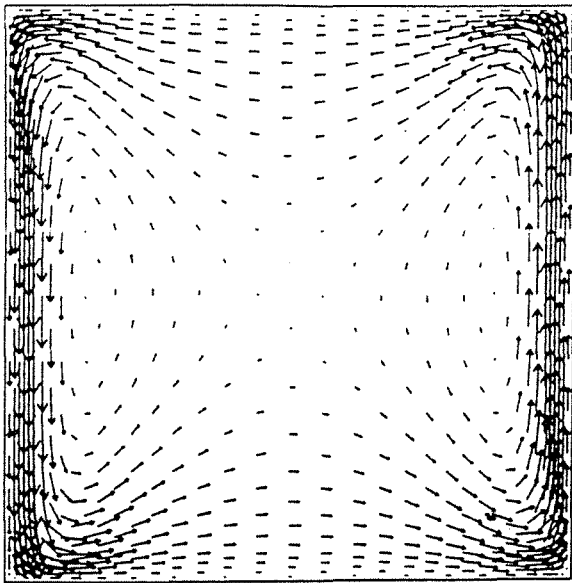


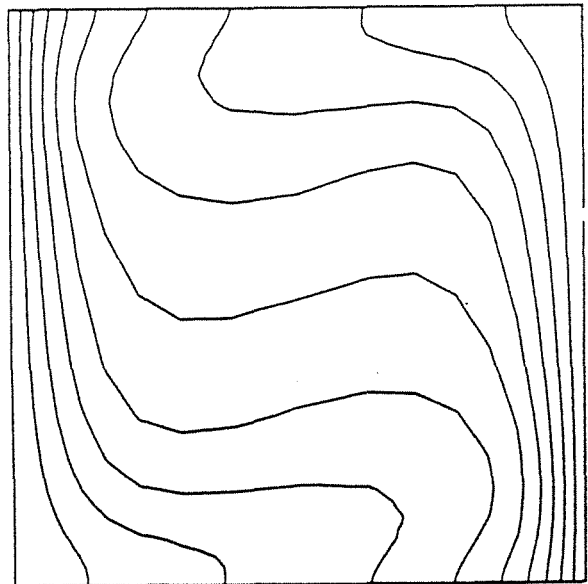
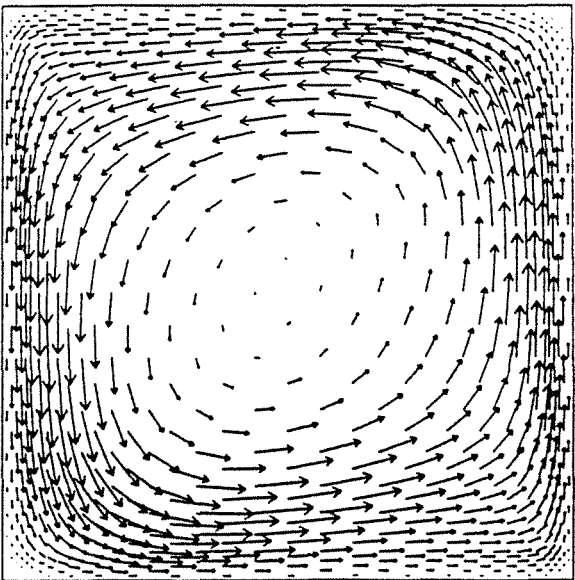
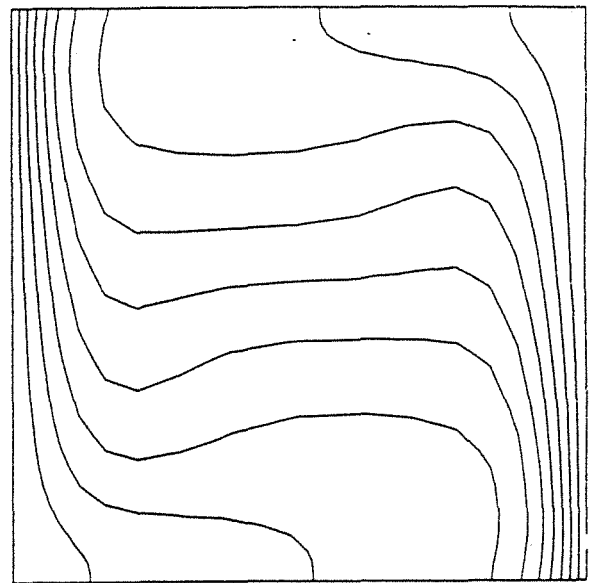
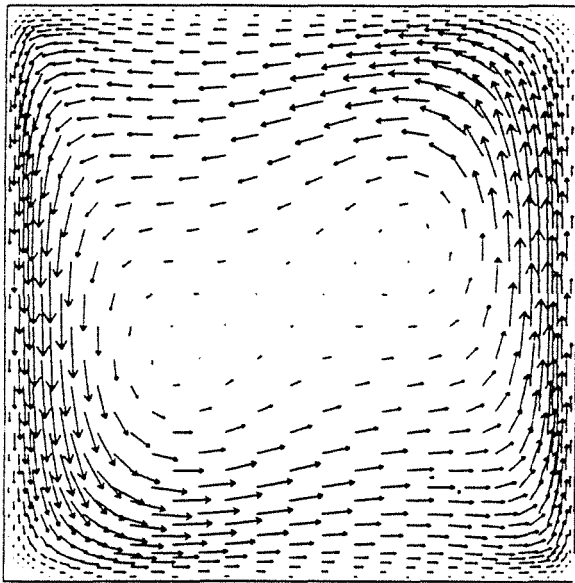
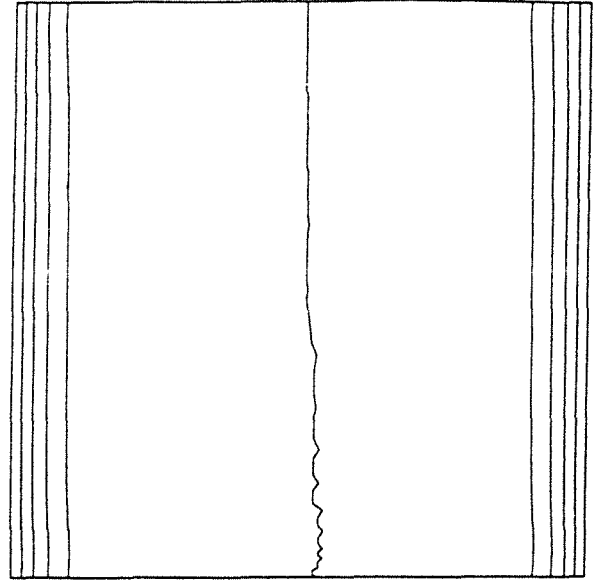
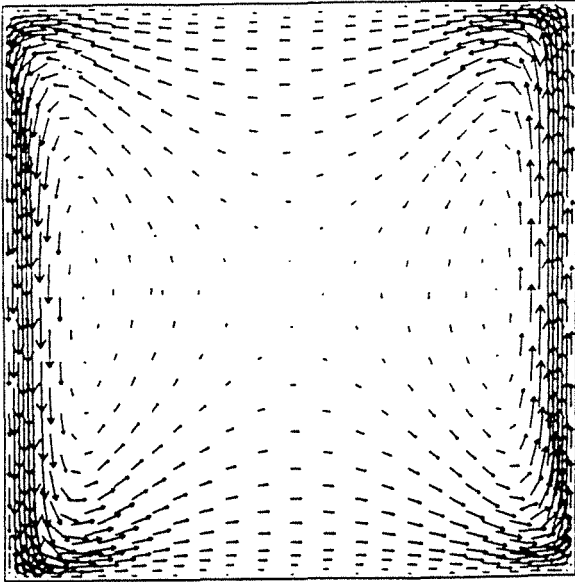
Figure III-5b - Maillage 37X37 irrégulier



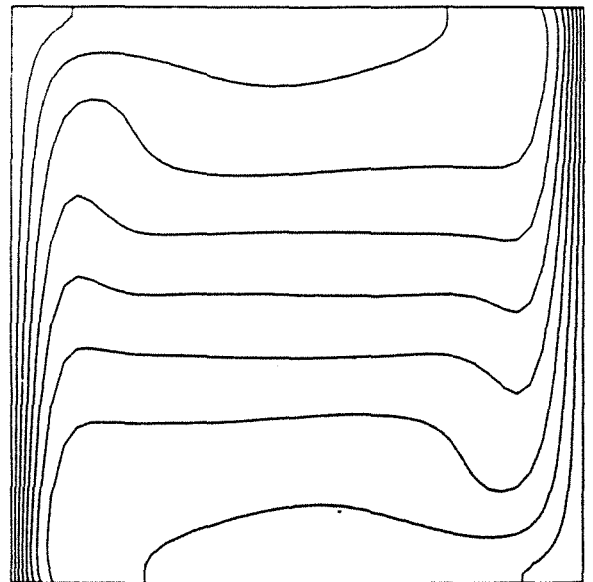
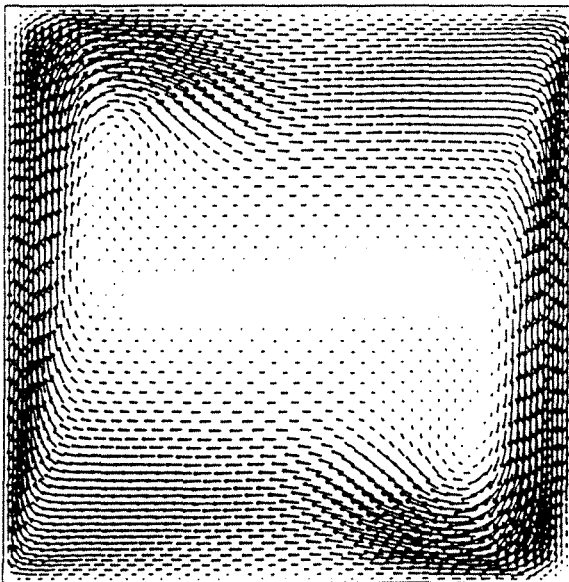
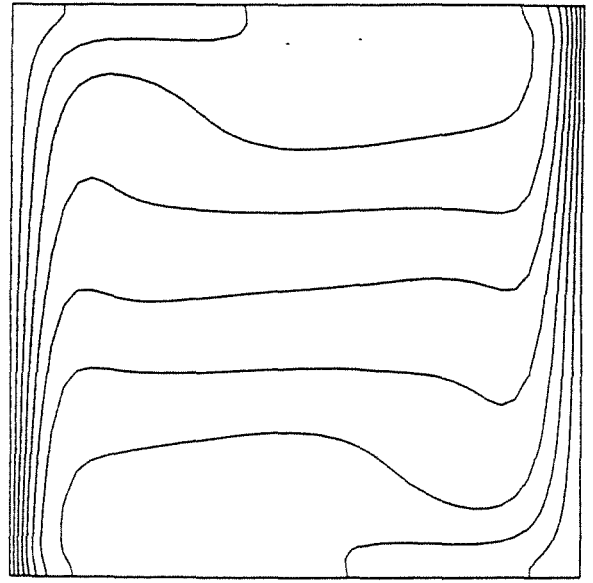
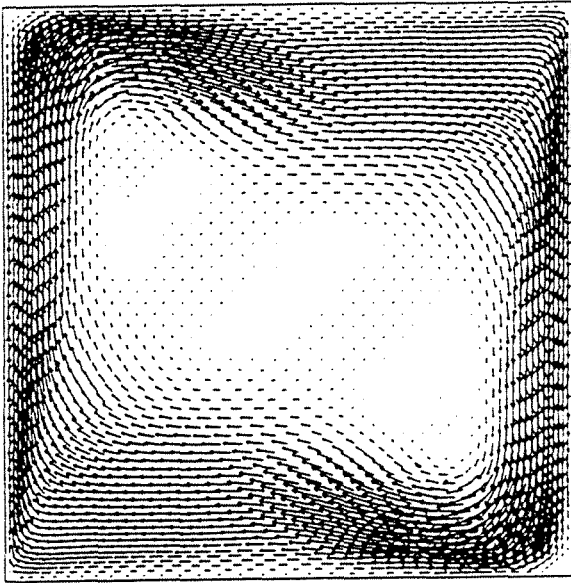
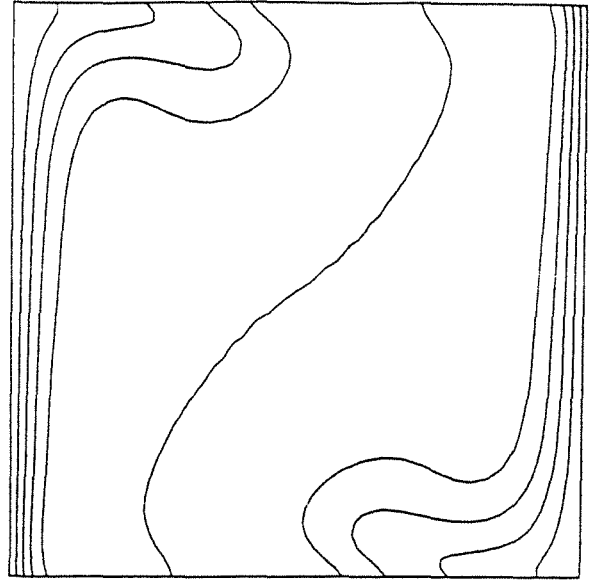
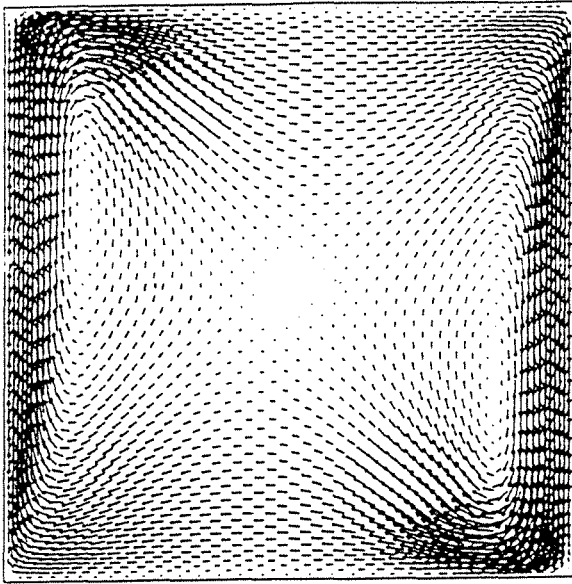
Figures III-6a à f - Résultats pour $Ra = 1000$



Figures III-7a à f - Résultats pour $Ra = 10000$



Figures III-8a à f - Résultats pour $Ra = 100000$



Figures III-9a à f - Résultats pour $Ra = 1000000$

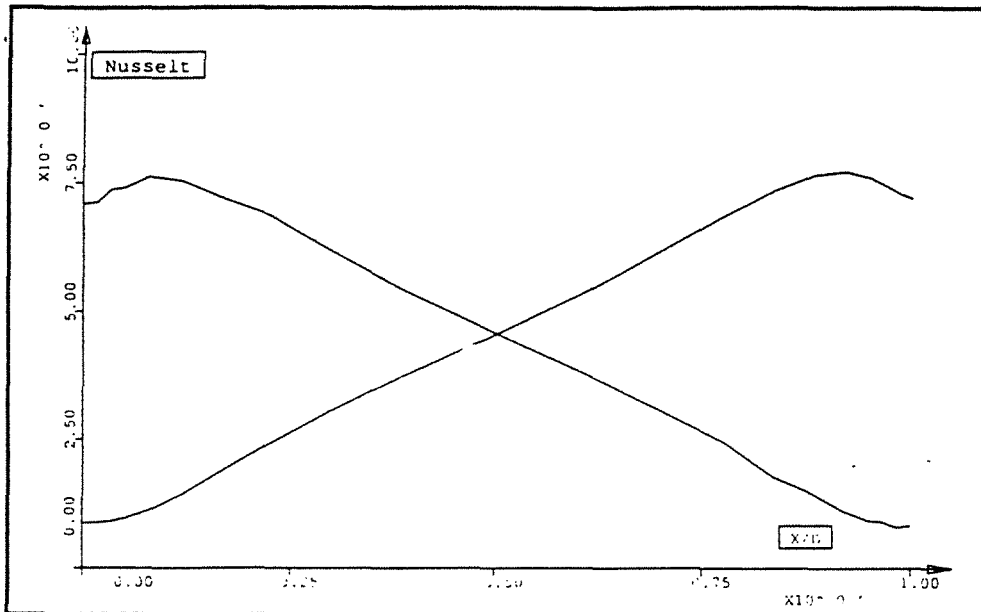


Figure III-10a - Nusselt sur les parois verticales pour $Ra = 100000$

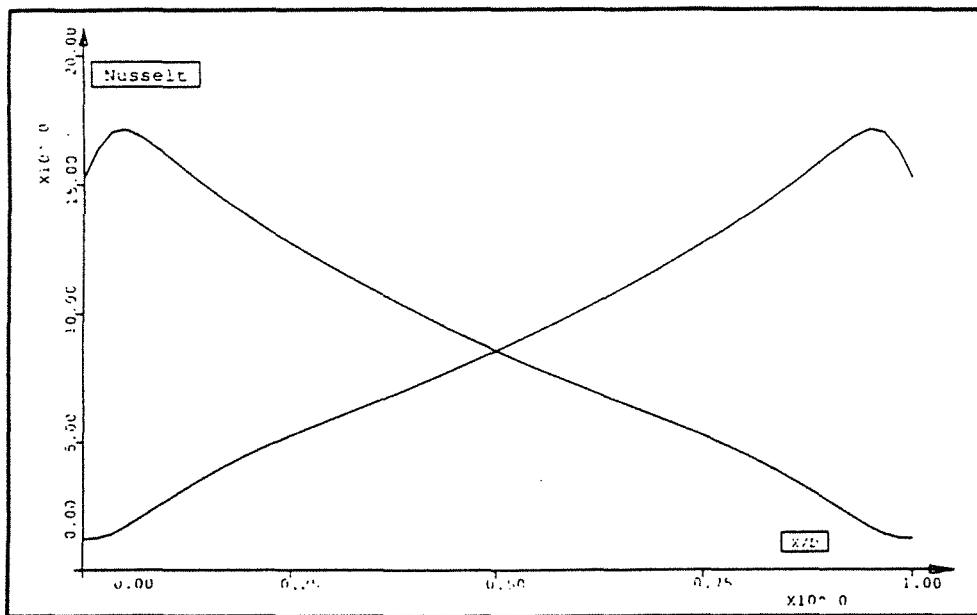


Figure III-10b - Nusselt sur les parois verticales pour $Ra = 1000000$

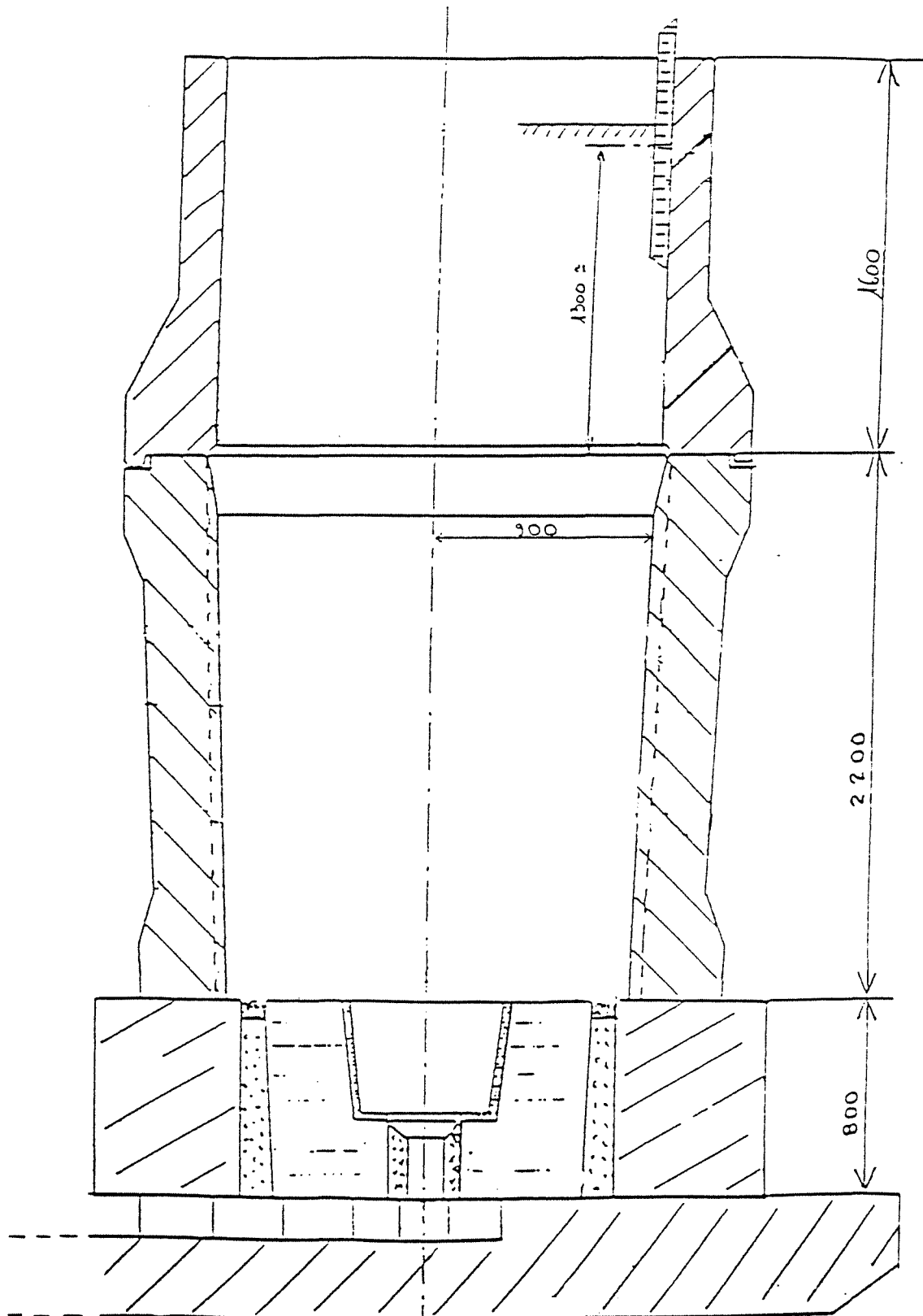


Figure IV-1 : Système lingot-lingotière de la coulée expérimentale

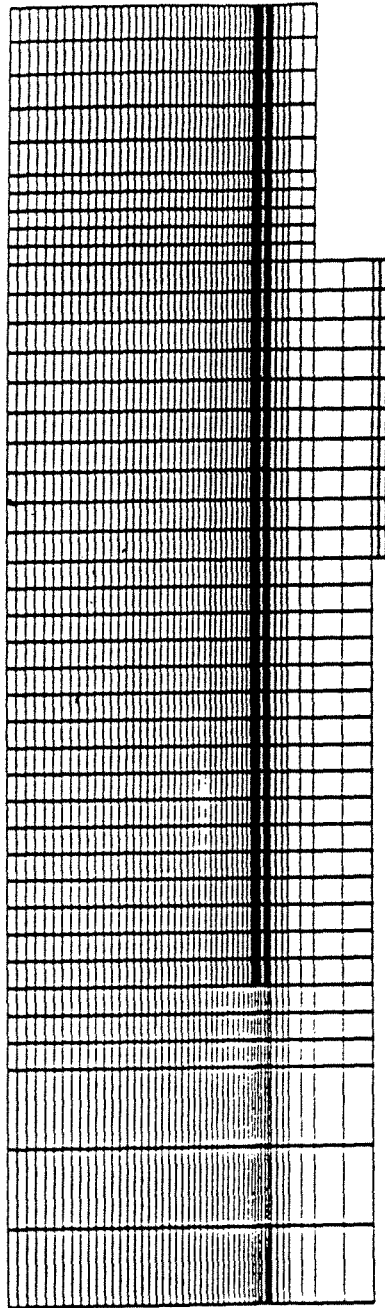
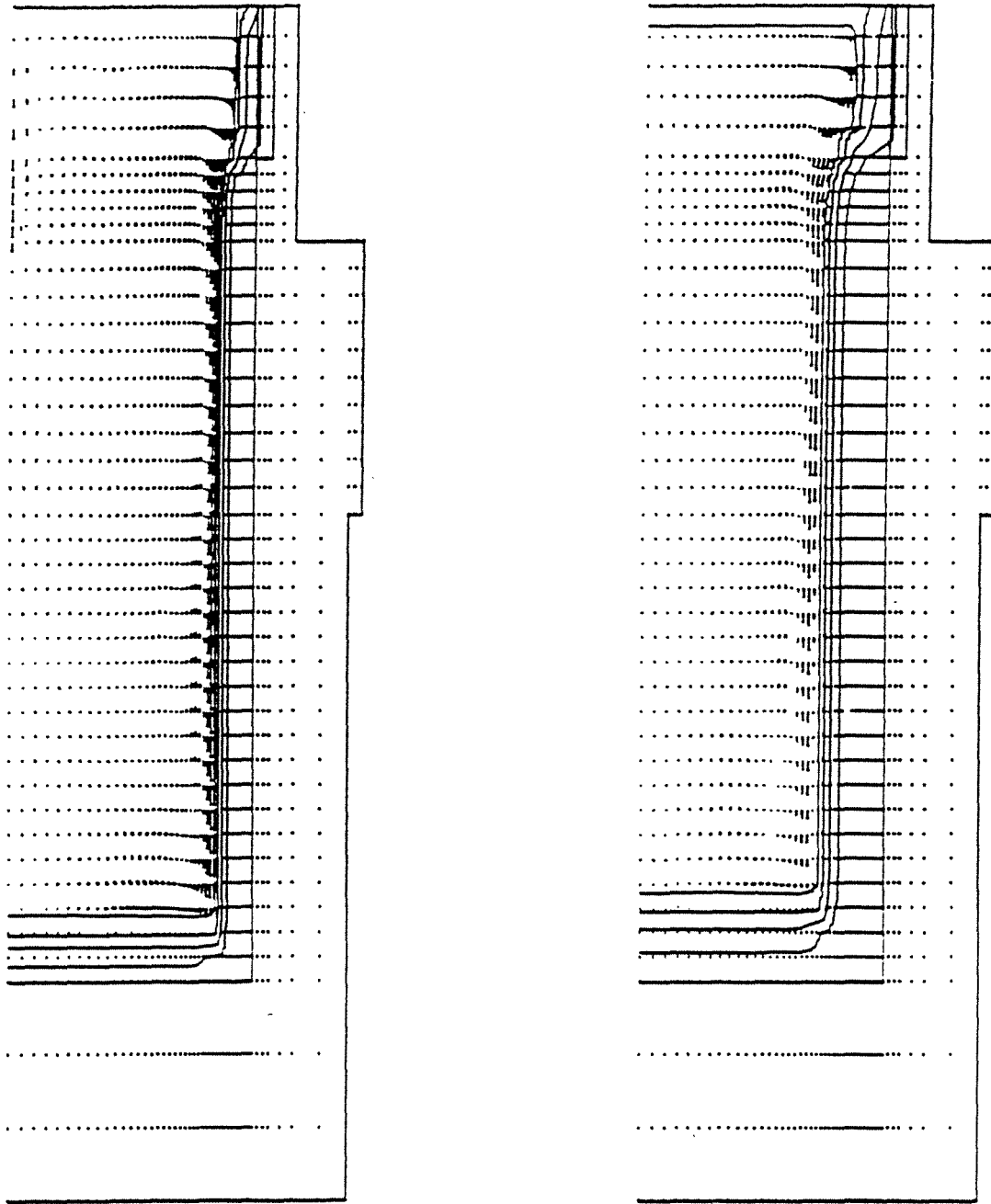


Figure IV-2 : Maillage

2109 points de pression-température, dont 1680 dans l'acier

4124 points de vitesse



Figures IV-3 : Champs calculés de vitesse et de fraction liquide

Figure IV-3a : $t = 1000 \text{ s}$ ($\approx 17 \text{ min}$)

$v_{\text{max}} = 2,6 \text{ cm/s}$

Figure IV-3b : $t = 3000 \text{ s}$ (50 min)

$v_{\text{max}} = 6,8 \text{ mm/s}$

iso-fractions liquides 0,99 ; 0,9 ; 0,5 ; 0,1

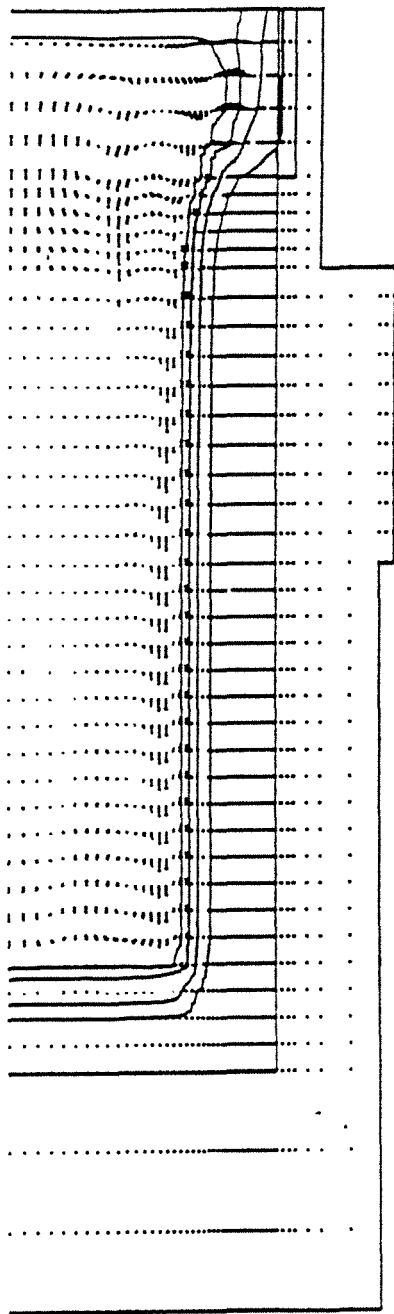


Figure IV-3c : $t = 5000 \text{ s}$ ($\approx 1 \text{ h } 23 \text{ min}$)

$v_{\text{max}} = 2,6 \text{ mm/s}$

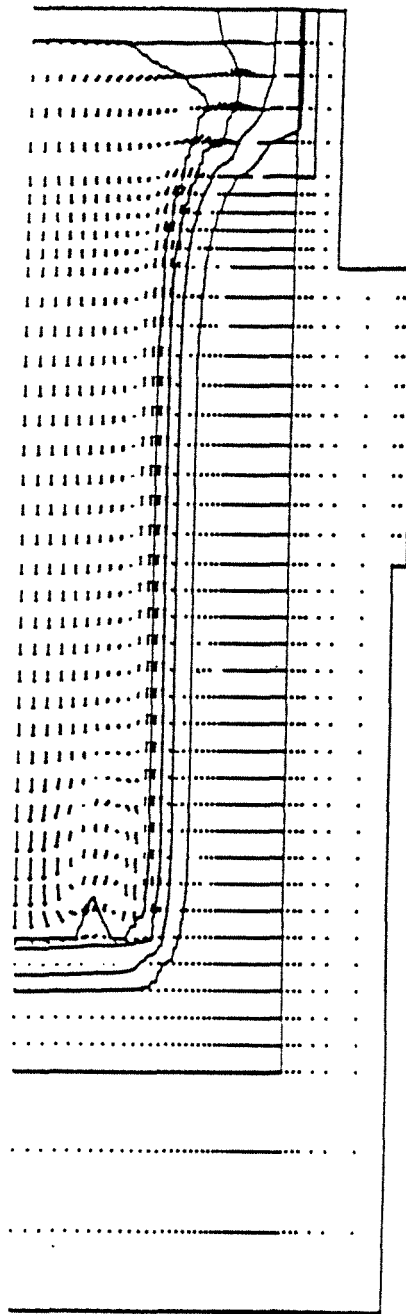


Figure IV-3d : $t = 10000 \text{ s}$ ($\approx 2 \text{ h } 47 \text{ min}$)

$v_{\text{max}} = 3,1 \text{ mm/s}$

iso-fractions liquides 0,99 ; 0,9 ; 0,5 ; 0,1

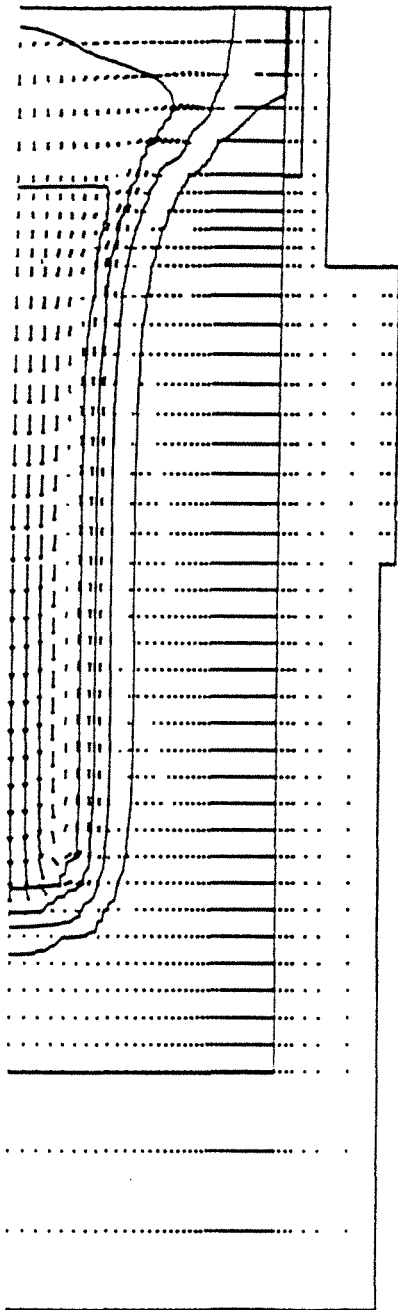


Figure IV-3e : $t = 20000 \text{ s}$ ($\approx 5 \text{ h } 33 \text{ min}$)

$v_{\text{max}} = 5,2 \text{ mm/s}$

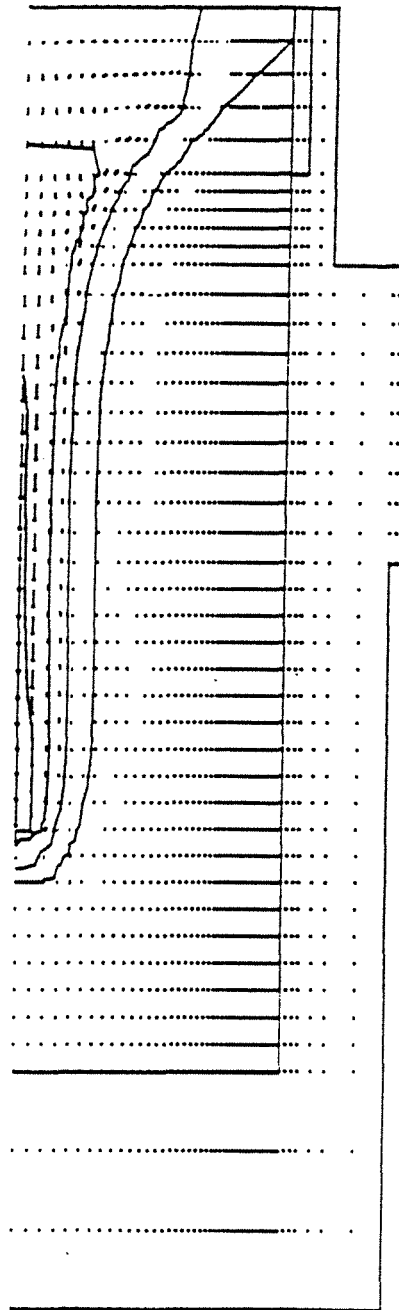


Figure IV-3f : $t = 30000 \text{ s}$ ($8 \text{ h } 20 \text{ min}$)

$v_{\text{max}} = 4 \text{ mm/s}$

iso-fractions liquides 0,99 ; 0,9 ; 0,5 ; 0,1

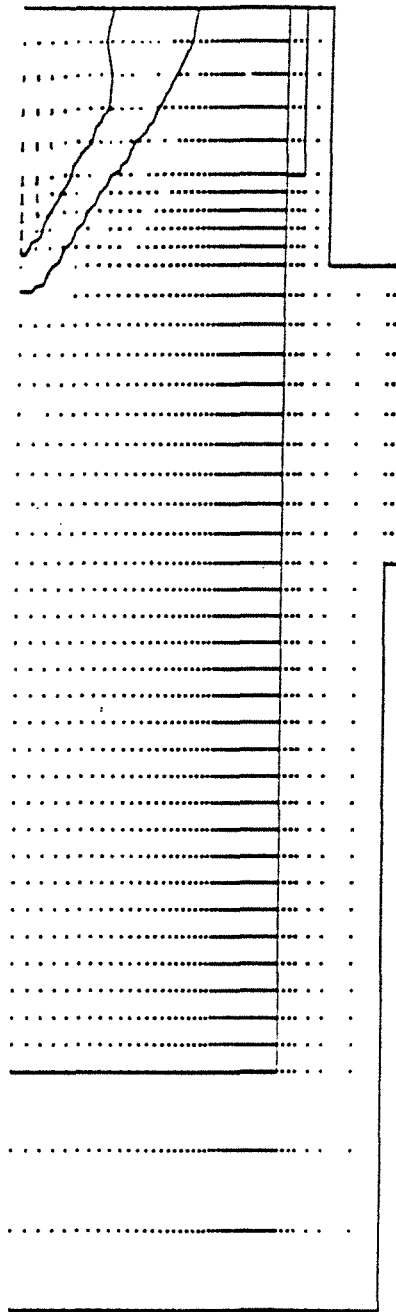


Figure IV-3g : $t = 44000 \text{ s} (\approx 12 \text{ h } 13 \text{ min})$

$v_{\text{max}} = 1,1 \text{ mm/s}$

iso-fractions liquides 0,5 ; 0,1

$$w_c = 0,22\%$$

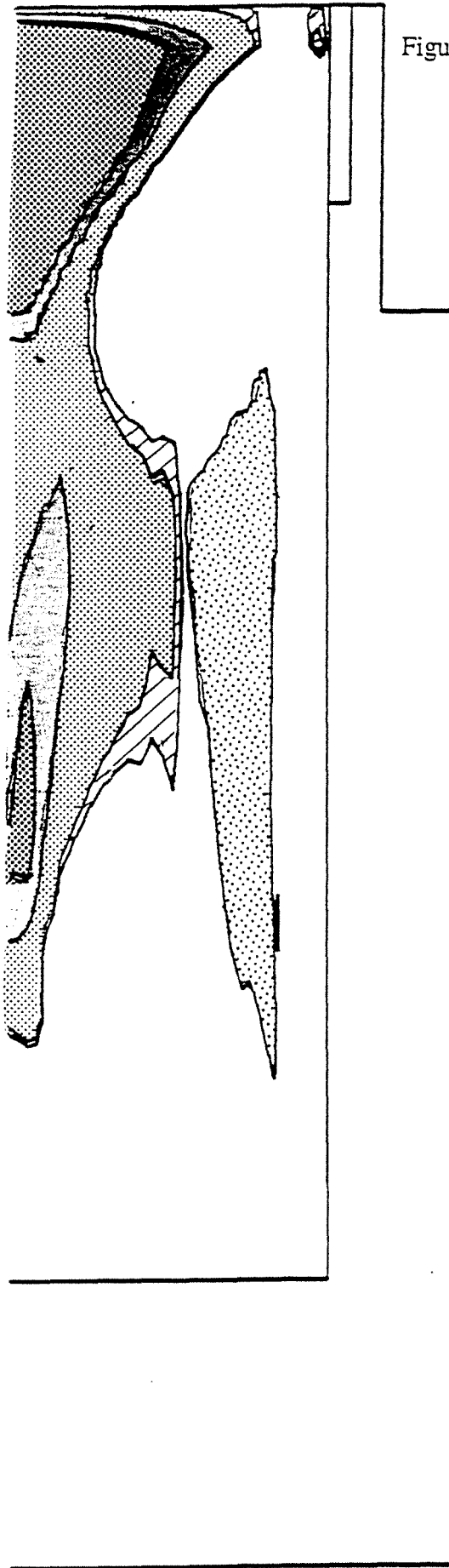
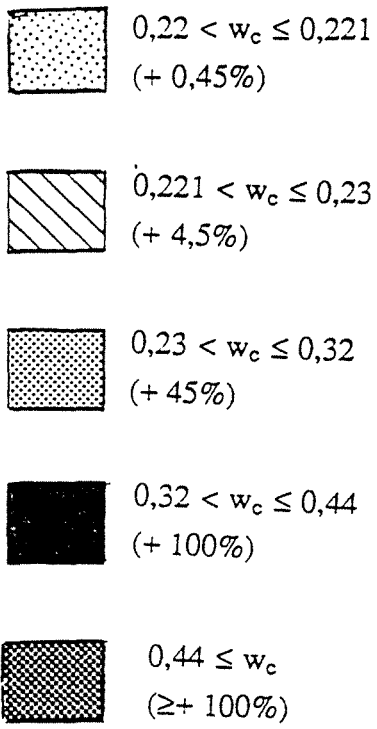
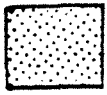
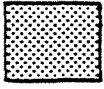


Figure IV-4a : Macroségrégations positives calculées

$$w_c = 0,22\%$$



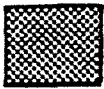
$0,219 < w_c \leq 0,22$
(- 0,45%)



$0,21 < w_c \leq 0,219$
(- 4,5%)



$0,17 < w_c \leq 0,21$
(- 22,5%)



$0,12 < w_c \leq 0,17$
(- 54,5%)

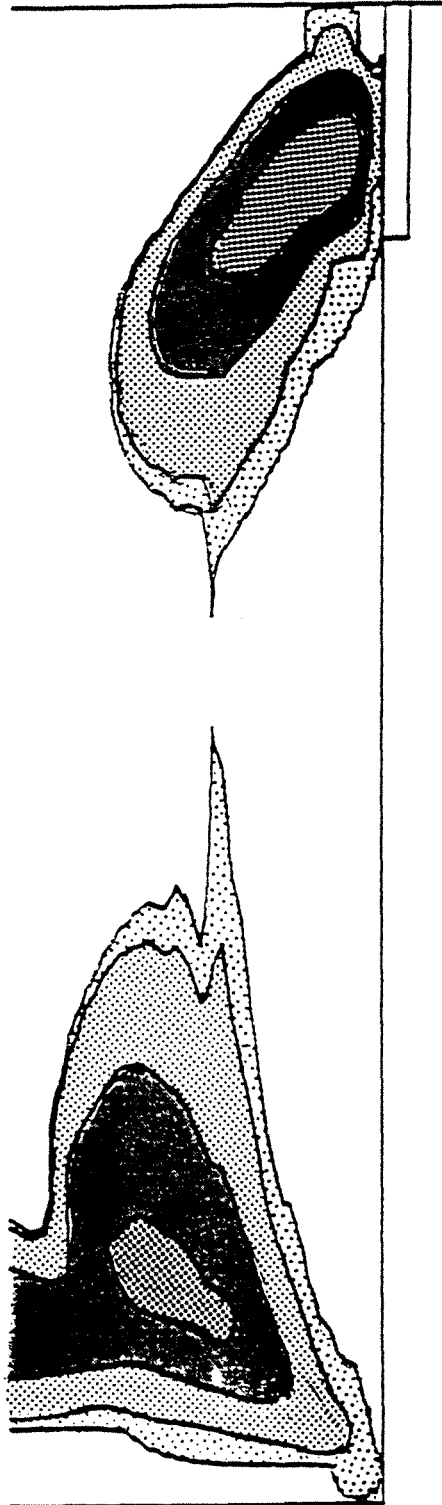


Figure IV-4b : Macroségrégations
négatives calculées

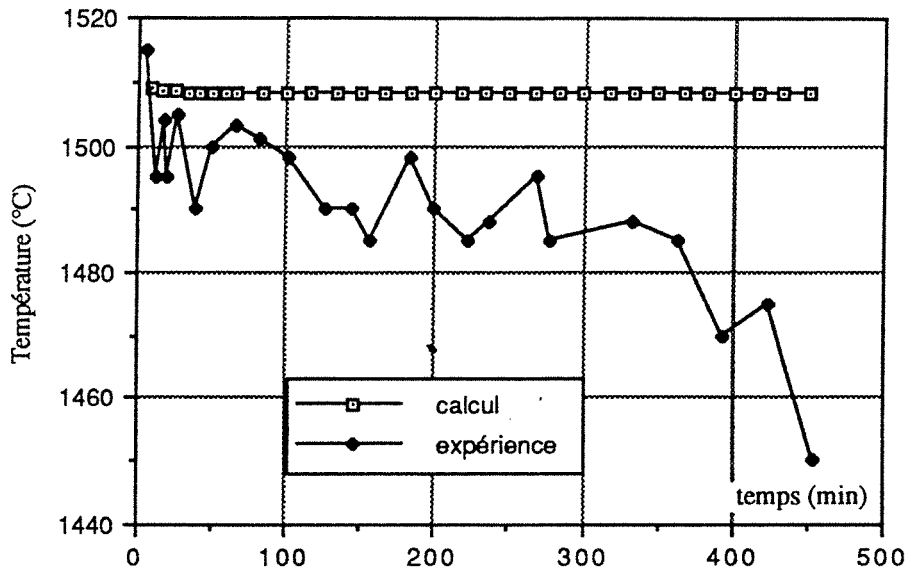


Figure IV-5 : température dans le liquide mesurée et calculée à 1 m de profondeur

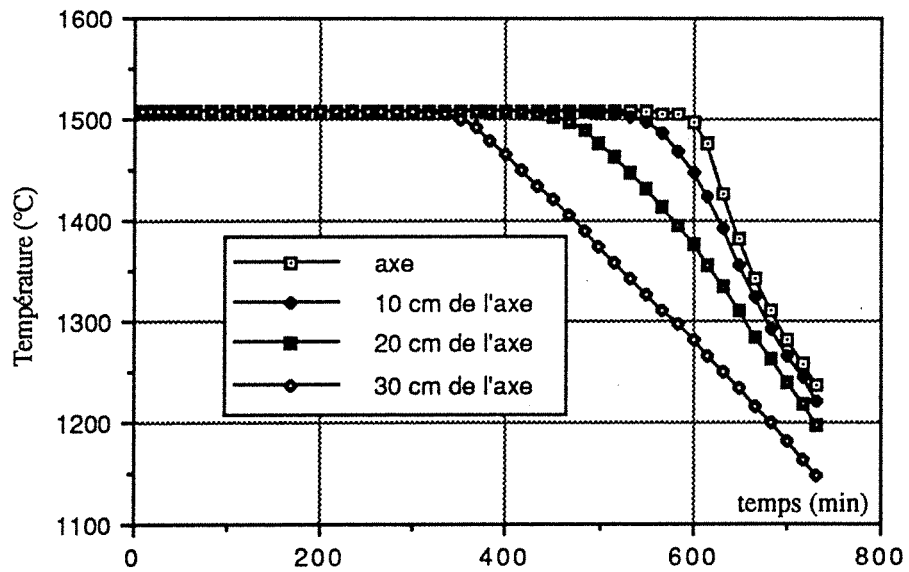


Figure IV-6 : Evolution calculée de la température au coeur du lingot

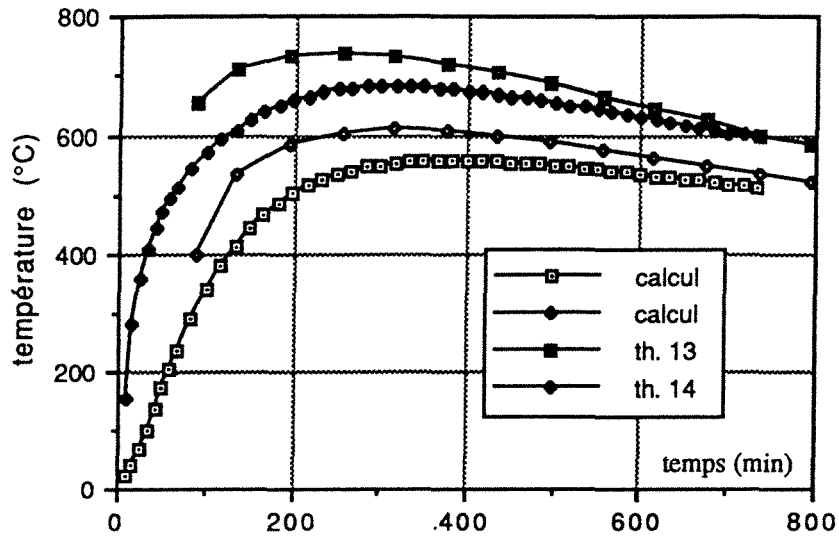


Figure IV-8a : Comparaison calcul-expérience (thermocouples 13-14)

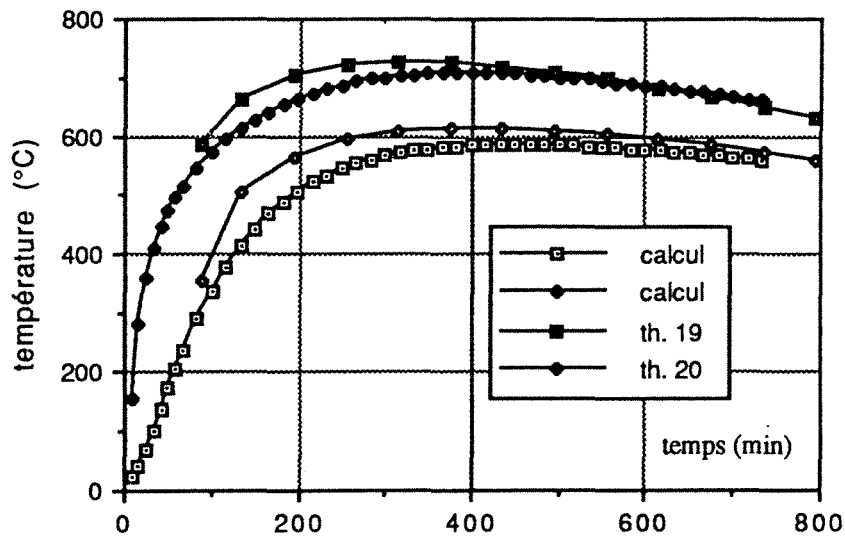


Figure IV-8b : Comparaison calcul-expérience (thermocouples 19-20)

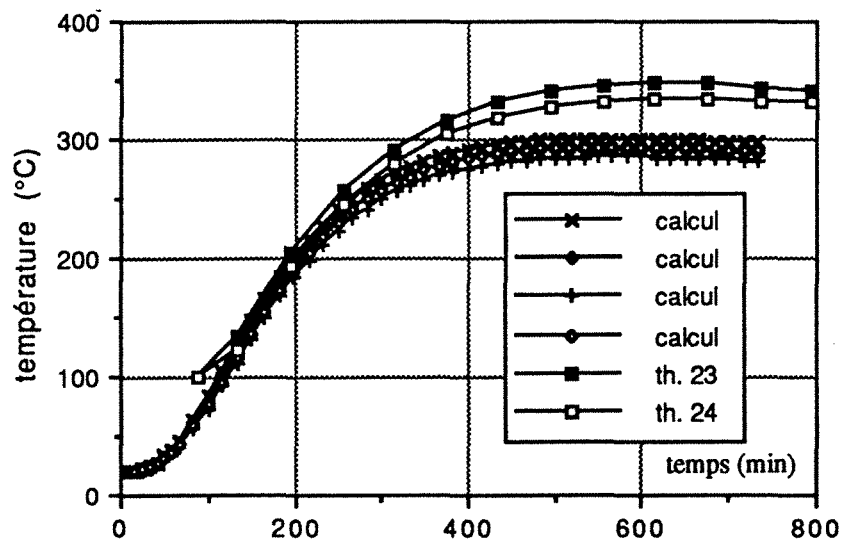


Figure IV-8c : comparaison calcul-expérience (thermocouples 23-24)

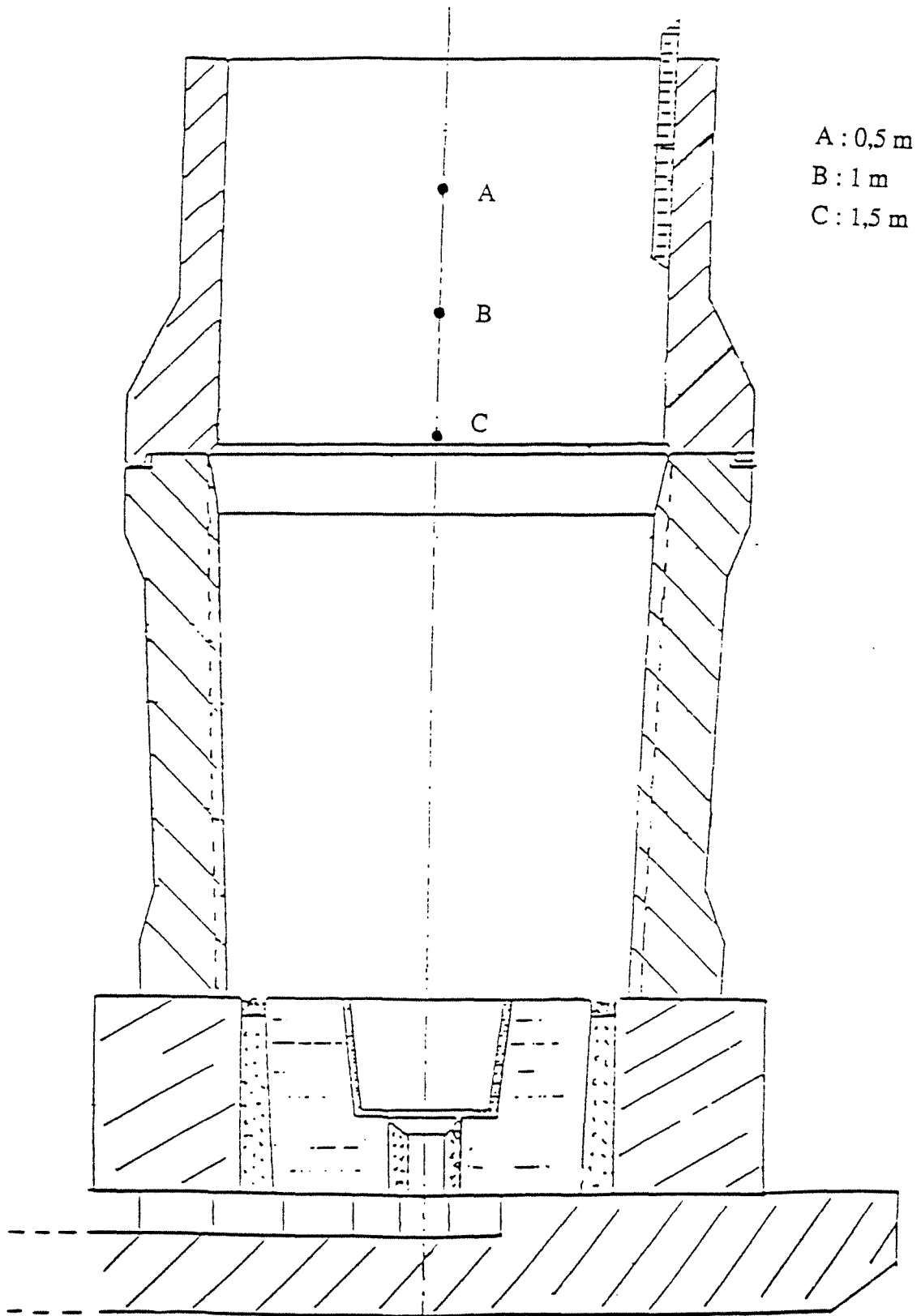


Figure IV-9 : Position des points de prélèvement de l'acier

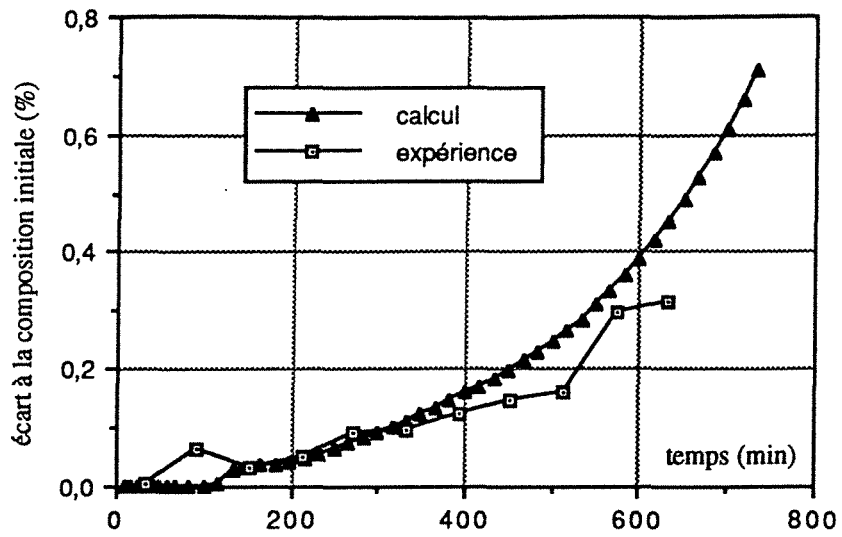


Figure IV-10a : Evolution de la composition moyenne en carbone à 0,5 m

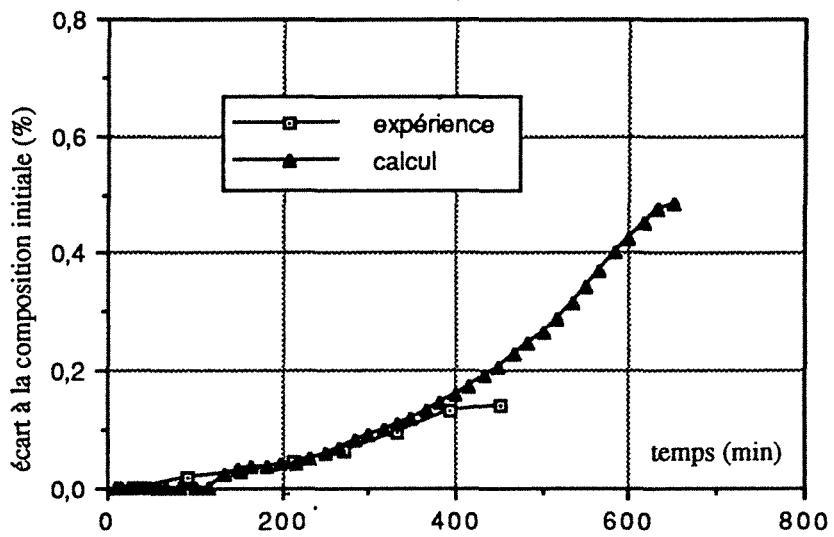


Figure IV-10b : Evolution de la composition moyenne en carbone à 1 m

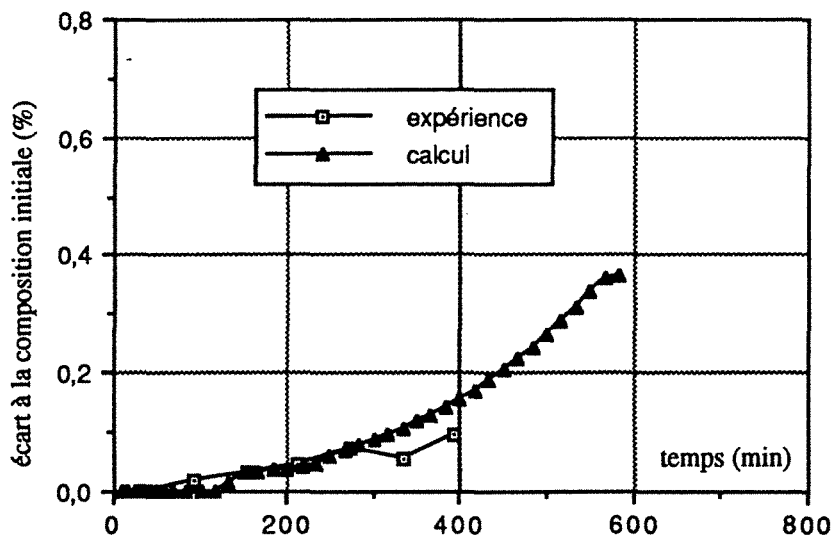
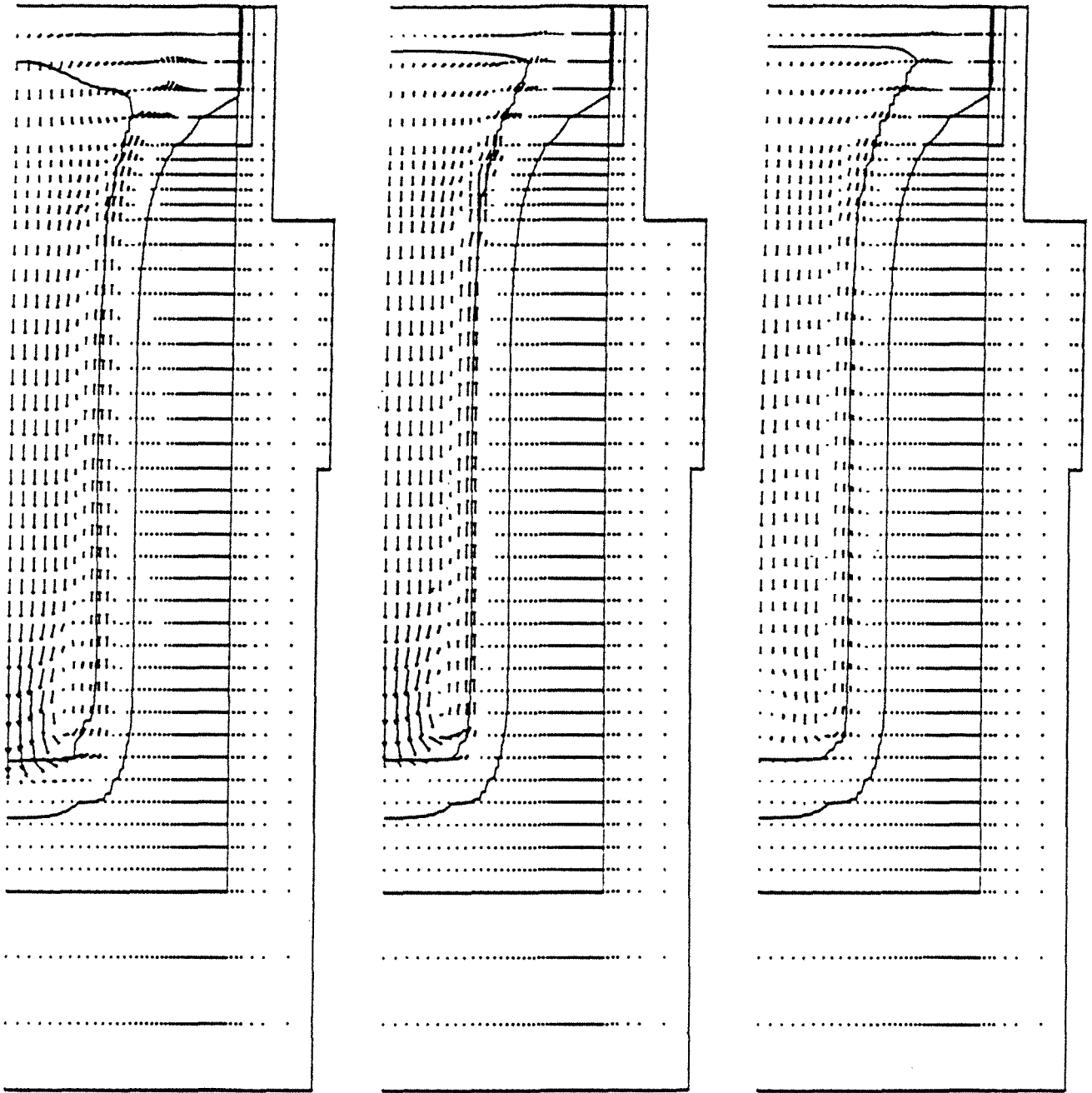


Figure IV-10c : Evolution de la composition en carbone à 1,5 m



Figures IV-11 : Influence de l'estimation de la perméabilité sur le calcul du champ de vitesse
 au temps 14000 s (\approx 4 heures)

Figure IV-11a

$$\lambda \approx 1 \text{ mm}$$

$$K_r = K_z \approx 10^{-8} \text{ m}^2$$

(pour $f^1 = 0,7$)

$$v_{\max} = 5,4 \text{ mm/s}$$

Figure IV-11b

$$\lambda \approx 0,1 \text{ mm}$$

$$K_r = K_z \approx 10^{-10} \text{ m}^2$$

(pour $f^1 = 0,7$)

$$v_{\max} = 3,2 \text{ mm/s}$$

Figure IV-11c

$$\lambda \approx 1 \text{ mm}$$

$$K_r \approx 10^{-8} \text{ m}^2$$

$$K_z \approx 5 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2$$

(pour $f^1 = 0,7$)

$$v_{\max} = 0,54 \text{ mm/s}$$

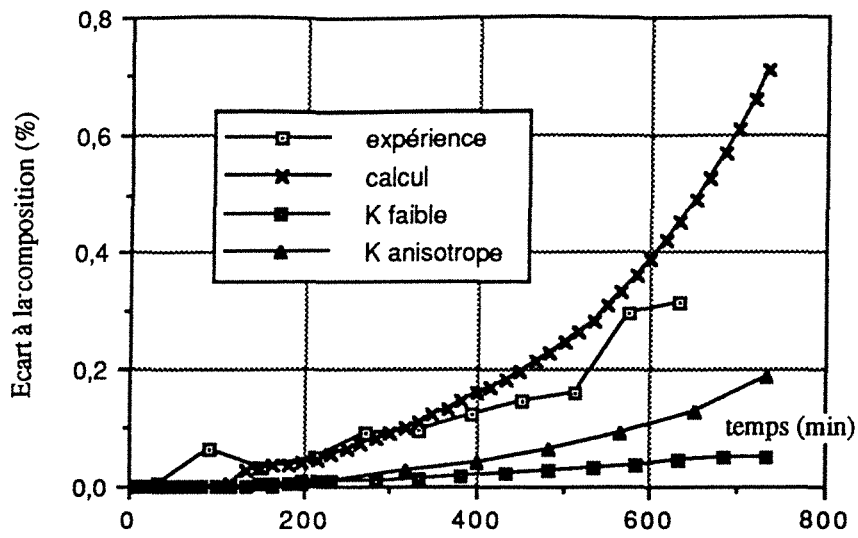


Figure IV-12a Influence théorique de la perméabilité sur la teneur en C à 0,5 m

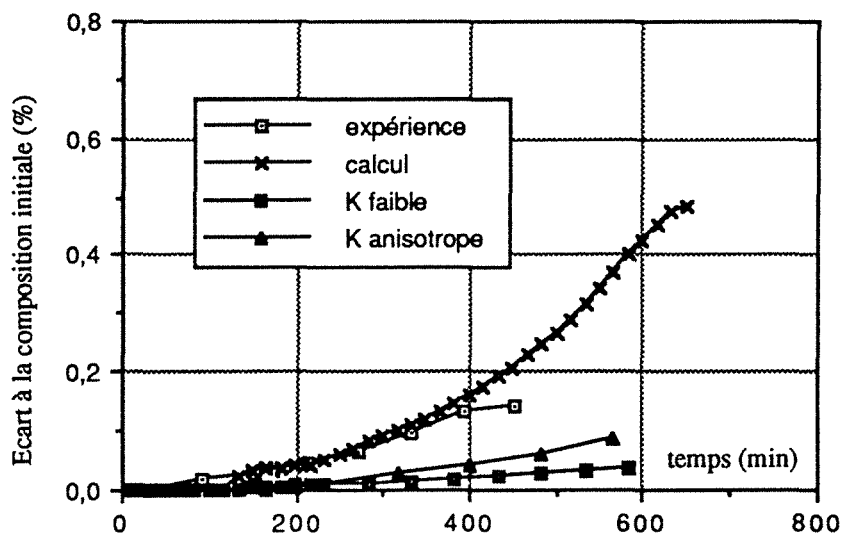


Figure IV-12b Influence théorique de la perméabilité sur la teneur en C à 1m

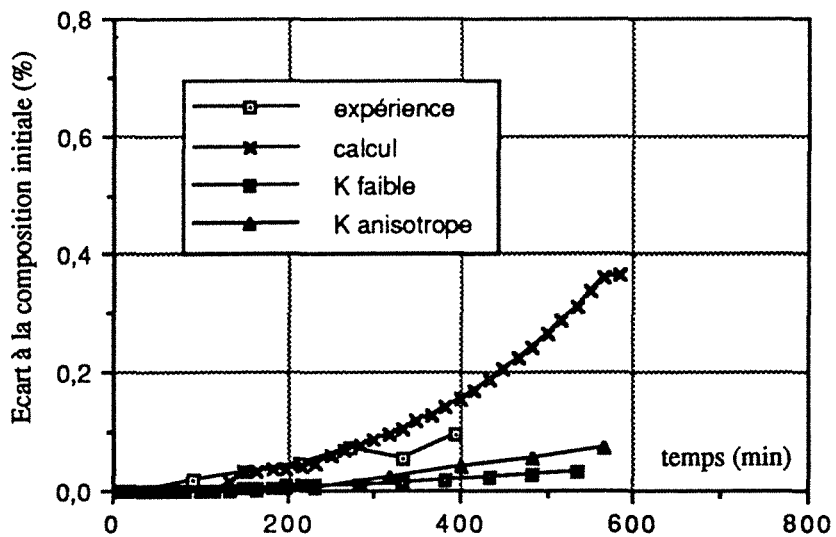


Figure IV-12c Influence théorique de la perméabilité sur la teneur en C à 1,5m

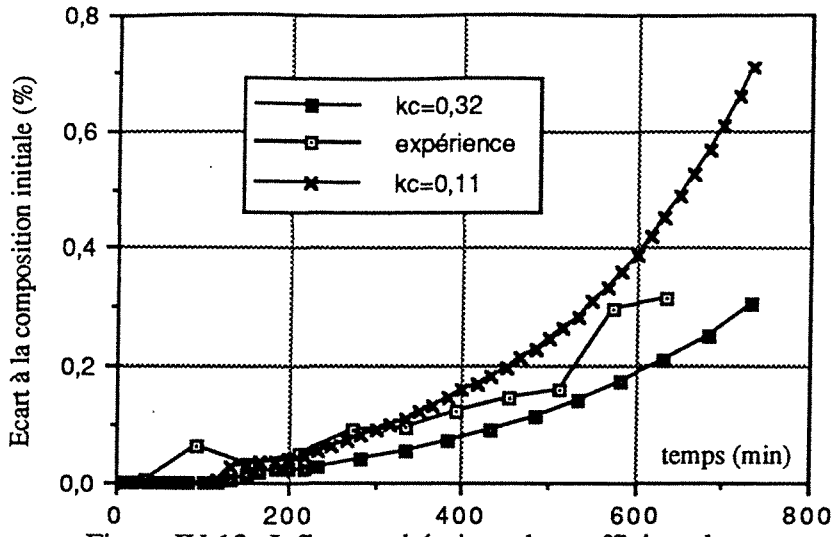


Figure IV-13a Influence théorique du coefficient de partage sur la teneur en C à 0,5 m

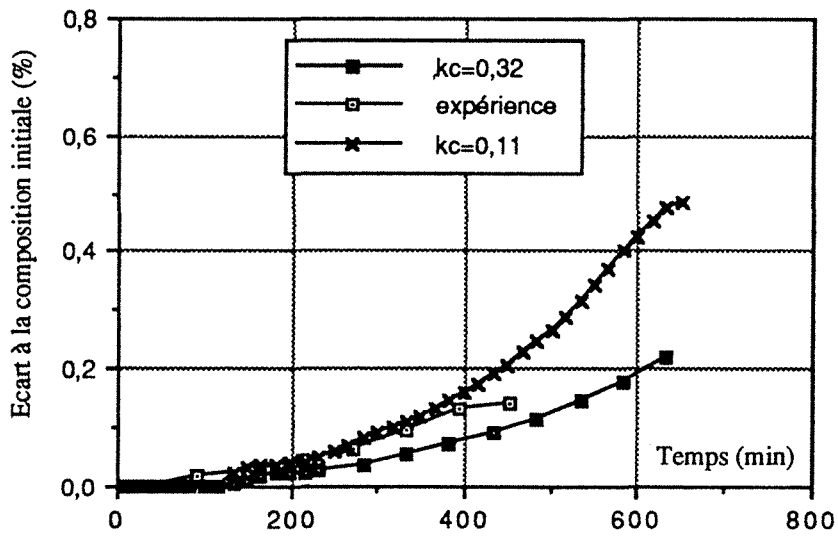


Figure IV-13b : Influence théorique du coefficient de partage sur la teneur en C à 1 m

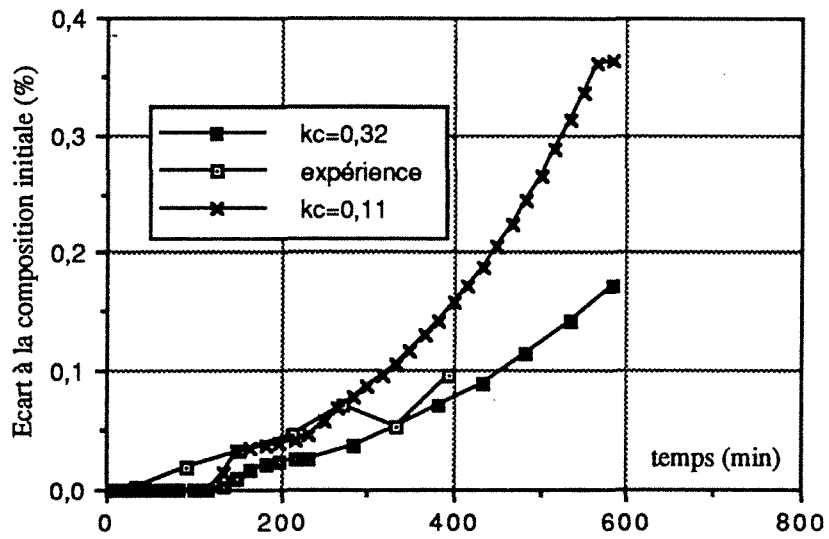


Figure IV-13c : Influence théorique du coefficient de partage sur la teneur en C à 1,5 m

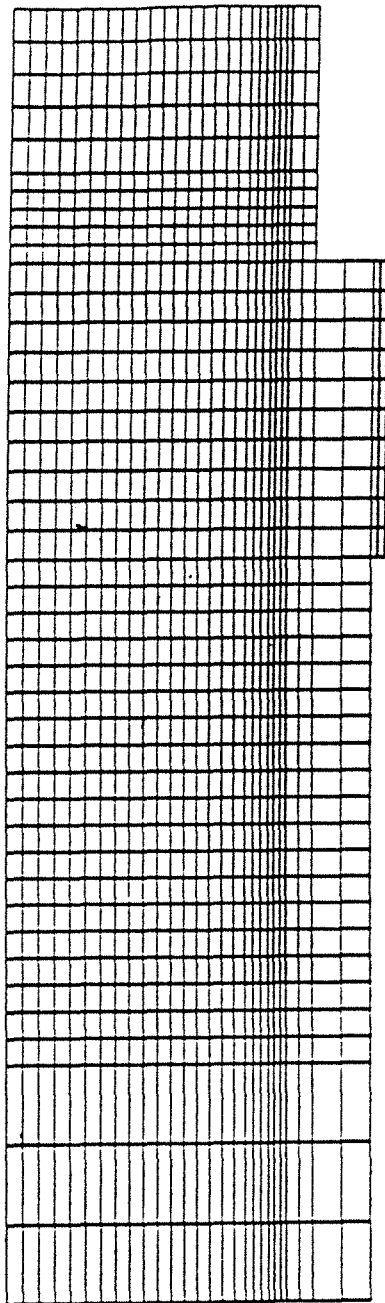


Figure IV-14 : Maillage simplifié
1206 points de pression-température, dont 840 dans l'acier
2339 points de vitesse

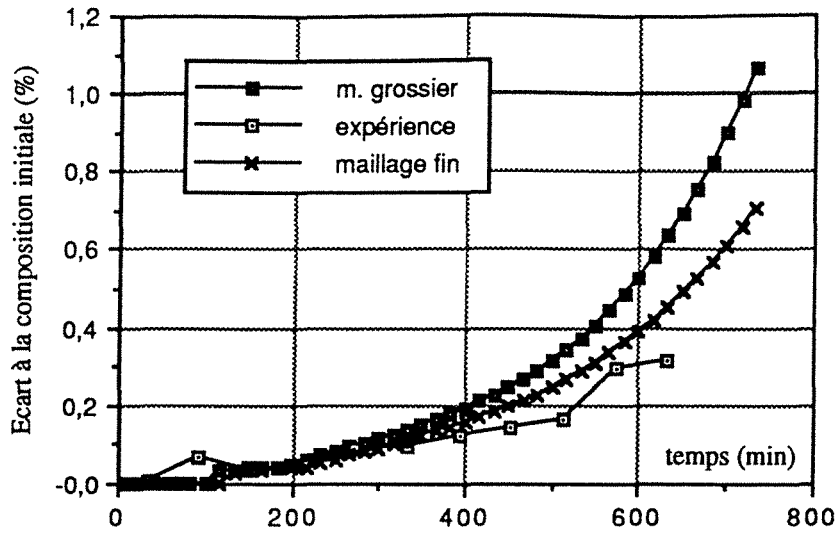


Figure IV-15a : Influence du maillage sur la teneur en C à 0,5m

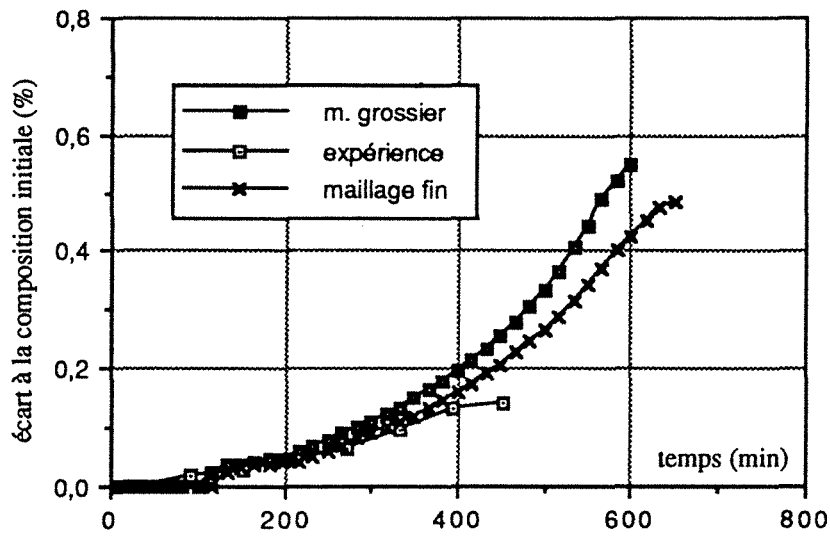


Figure IV-15b : Influence du maillage sur la teneur en C à 1 m

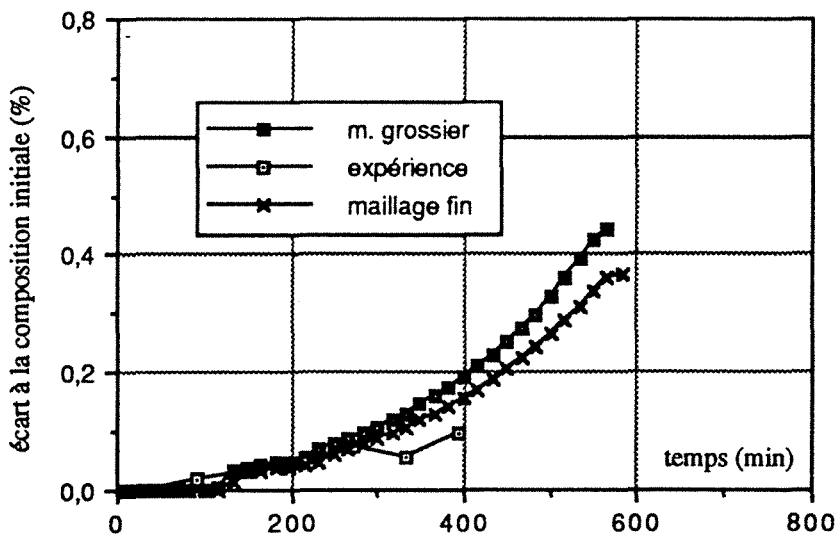


Figure IV-15c : Influence du maillage sur la teneur en C à 1,5 m

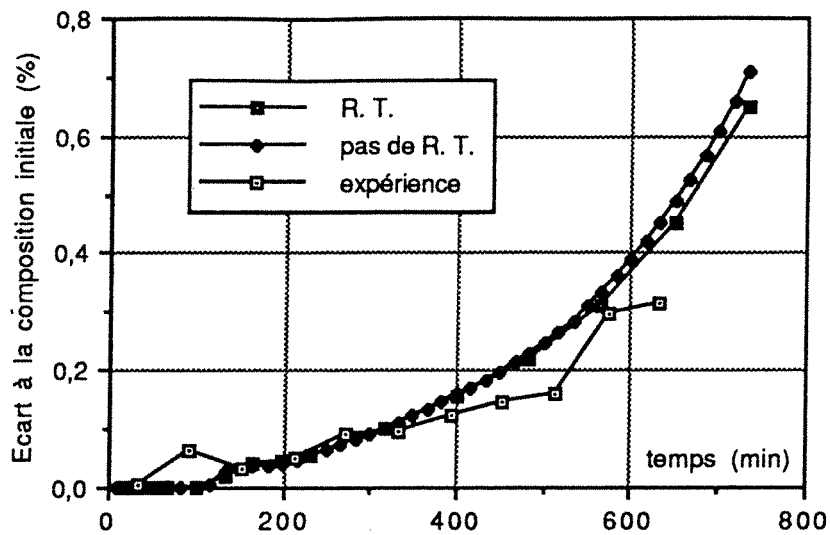


Figure IV-16a : Influence théorique de la résistance thermique sur la teneur en C à 0,5 m

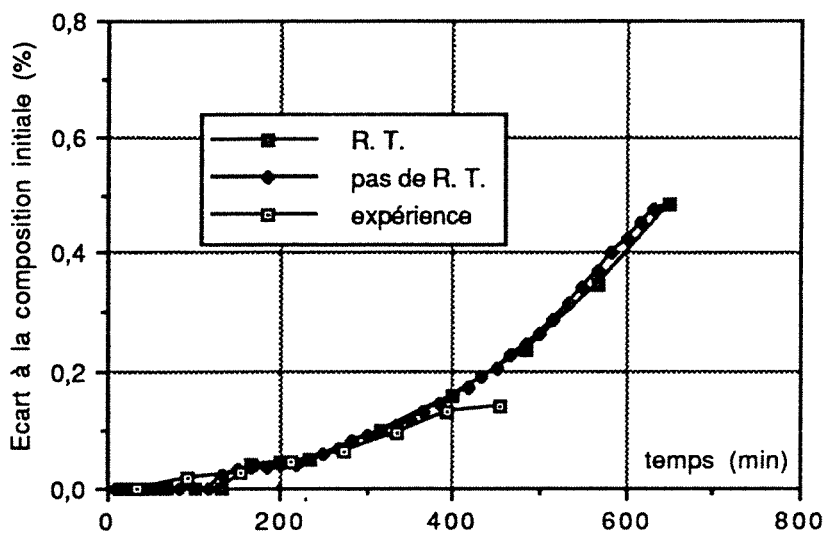


Figure IV-16b : Influence théorique de la résistance thermique sur la teneur en C à 1 m

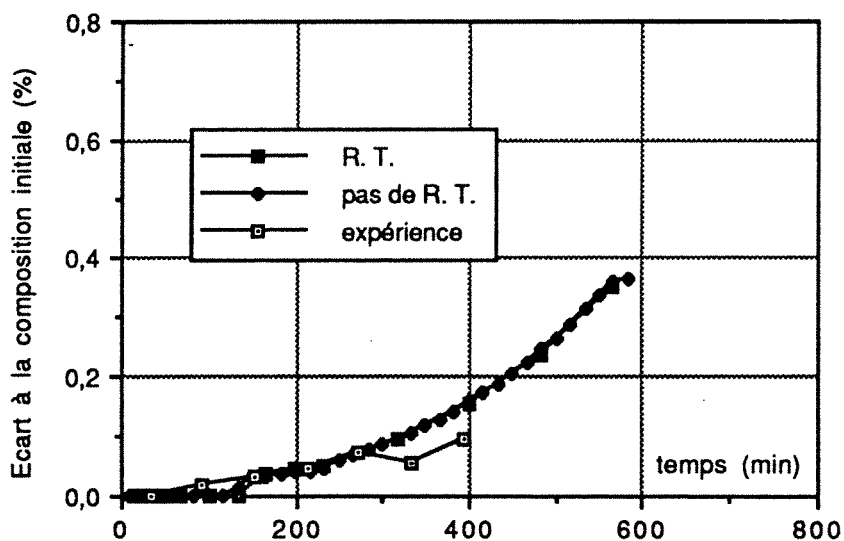


Figure IV-16c : Influence théorique de la résistance thermique sur la teneur en C à 1,5 m

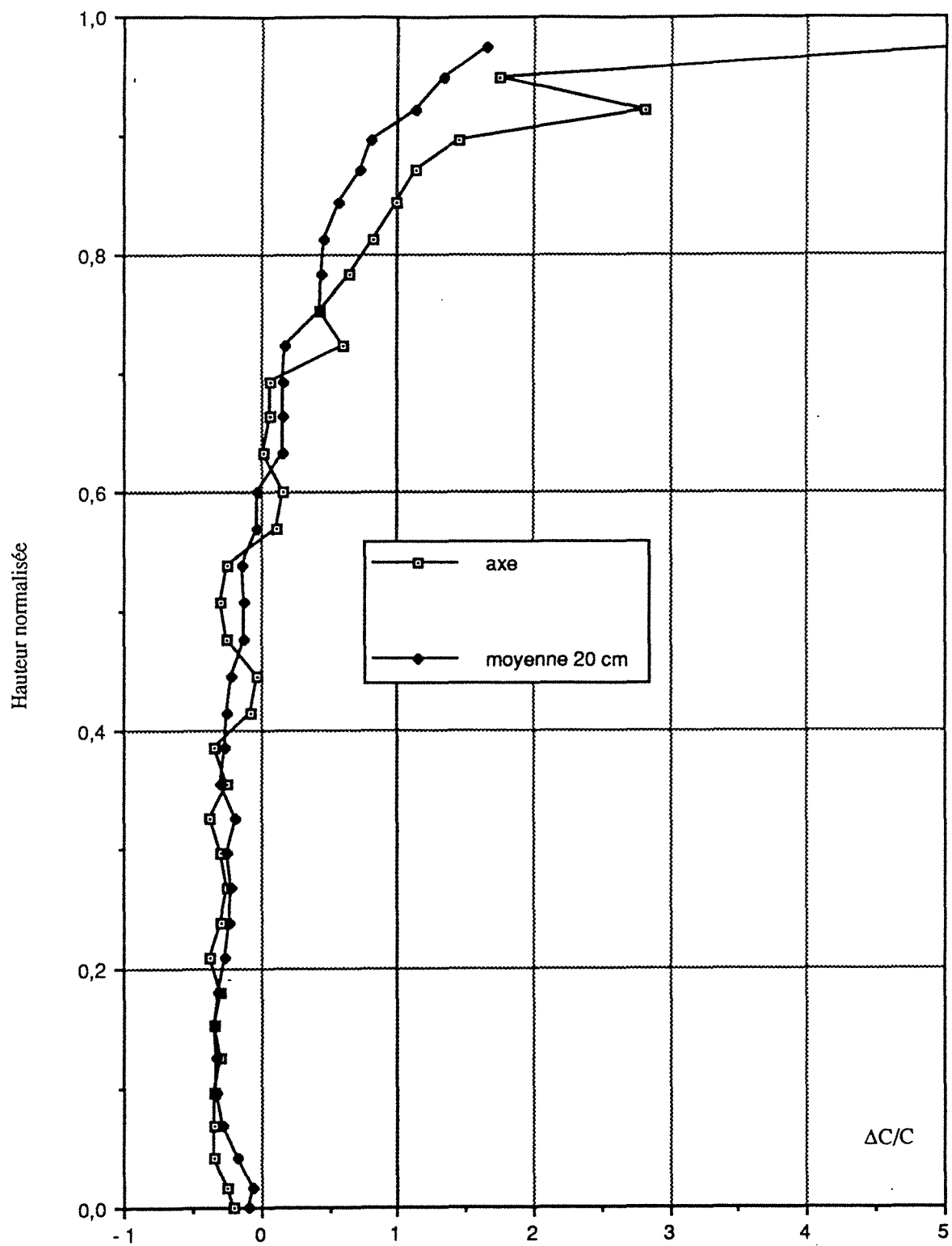


Figure IV-17 : influence d'une prise de moyenne sur la ségrégation axiale expérimentale

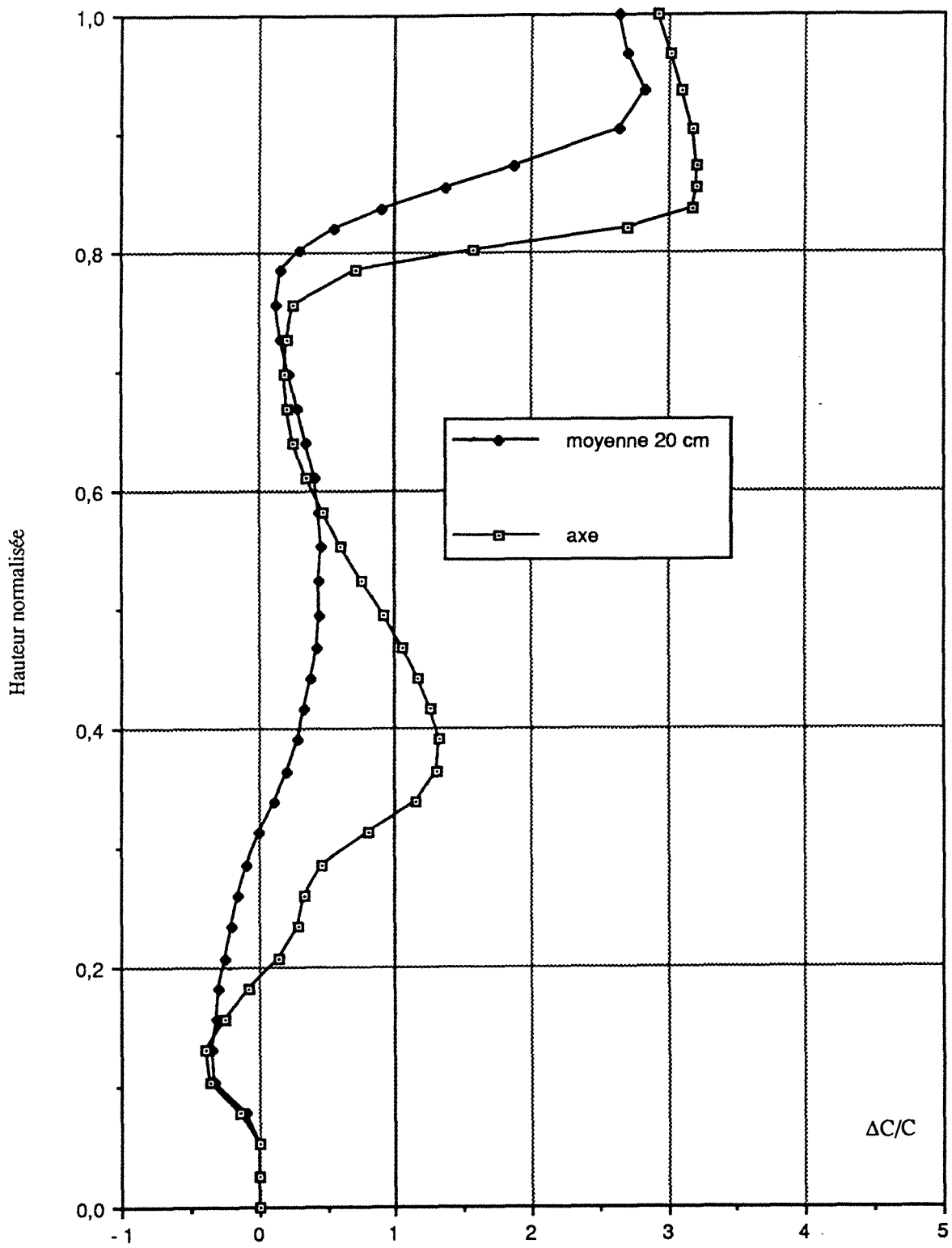


Figure IV-18 : influence d'une prise de moyenne sur la ségrégation axiale calculée

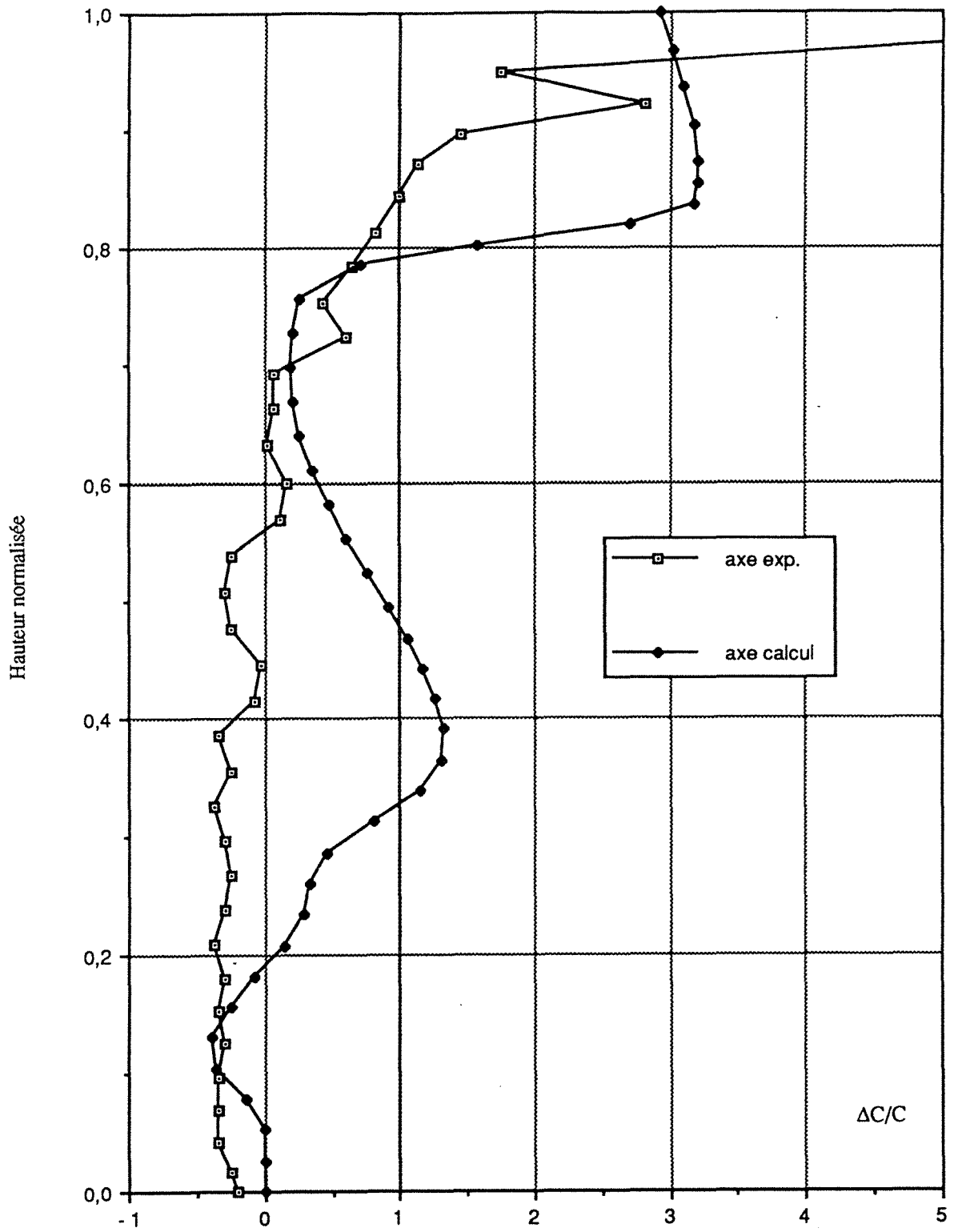


Figure IV-19 : Ségrégation axiale expérimentale et mesurée

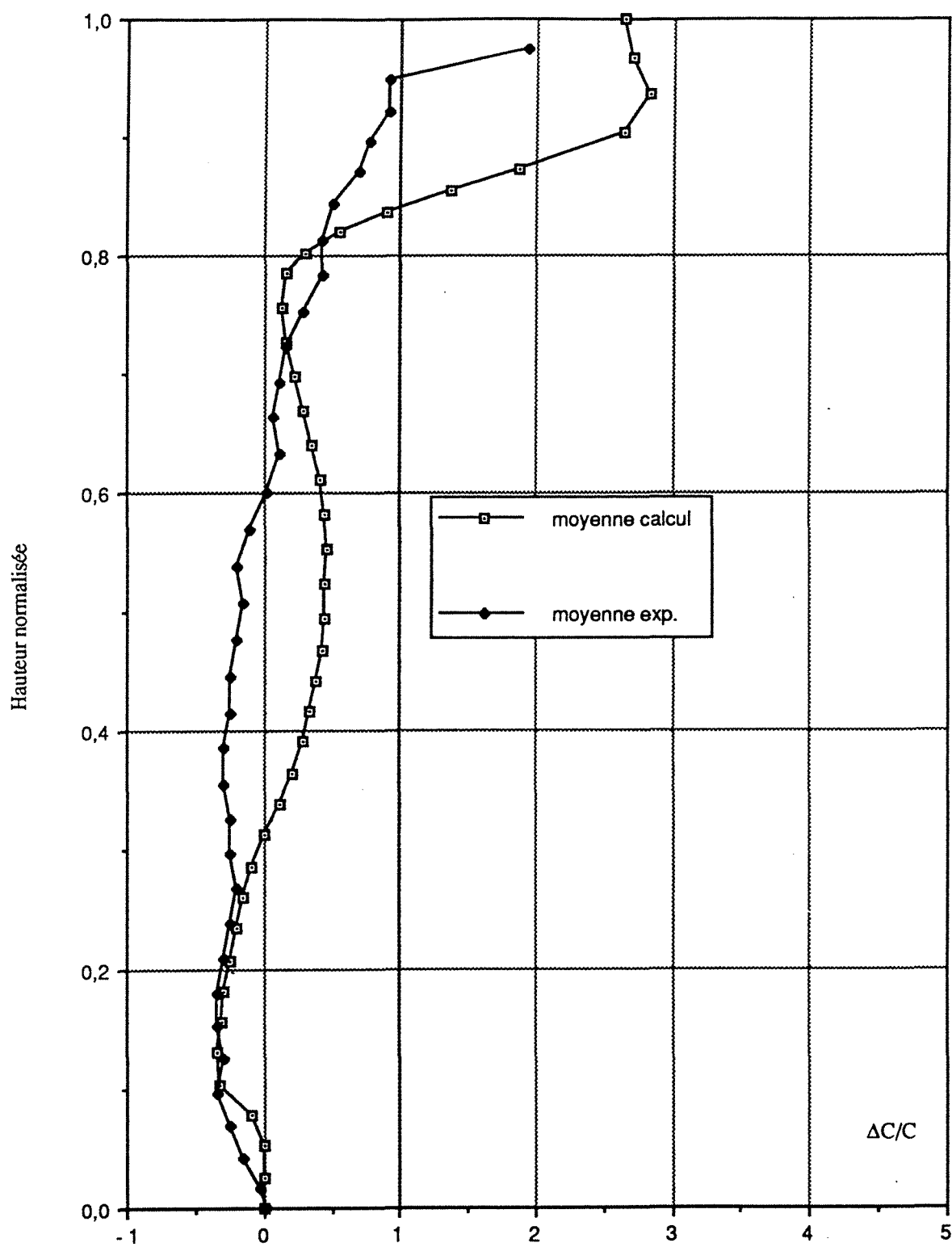


Figure IV-20 : Ségrégation axiale moyennée expérimentale et calculée

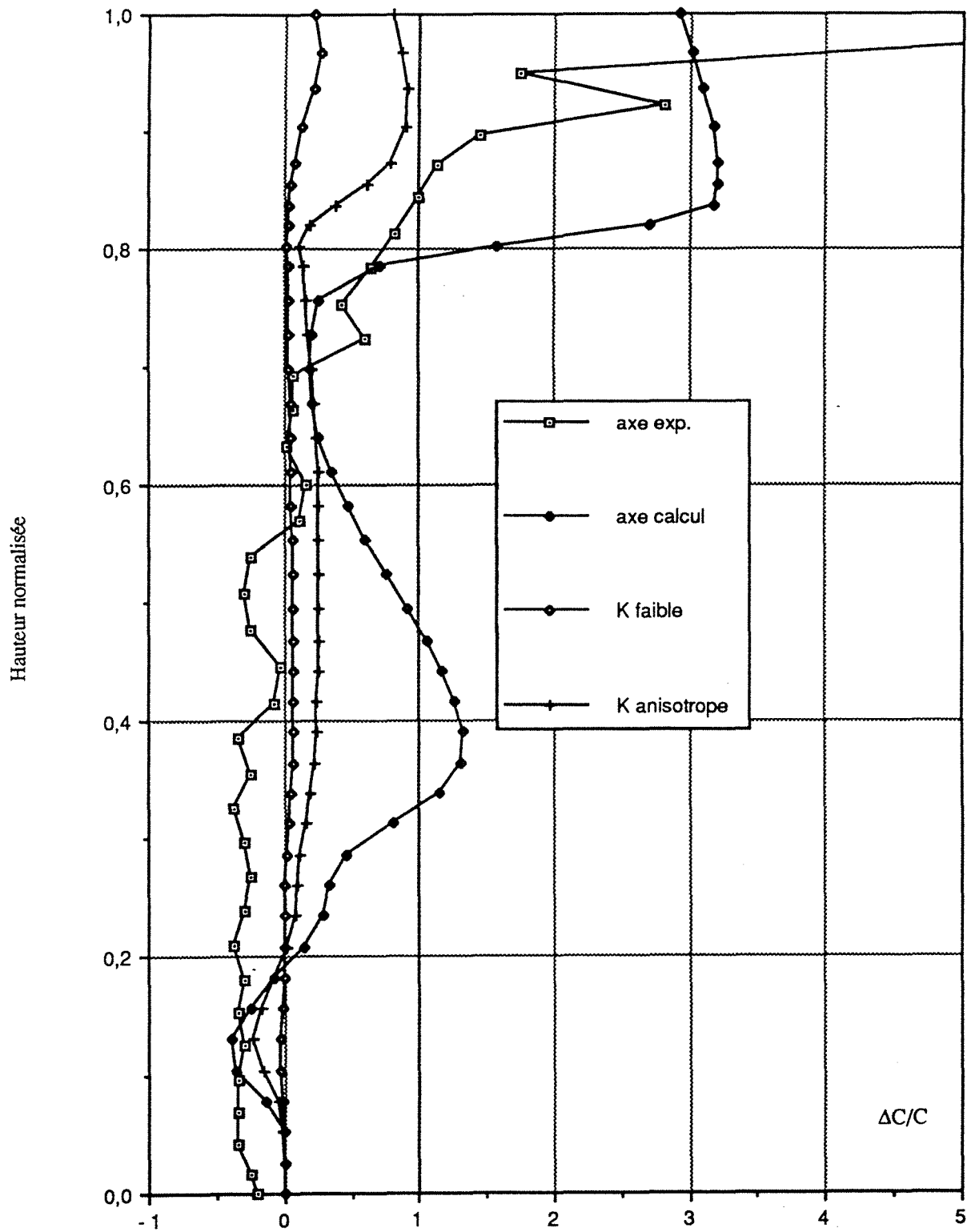


Figure IV-21 : Influence de la perméabilité sur la ségrégation axiale

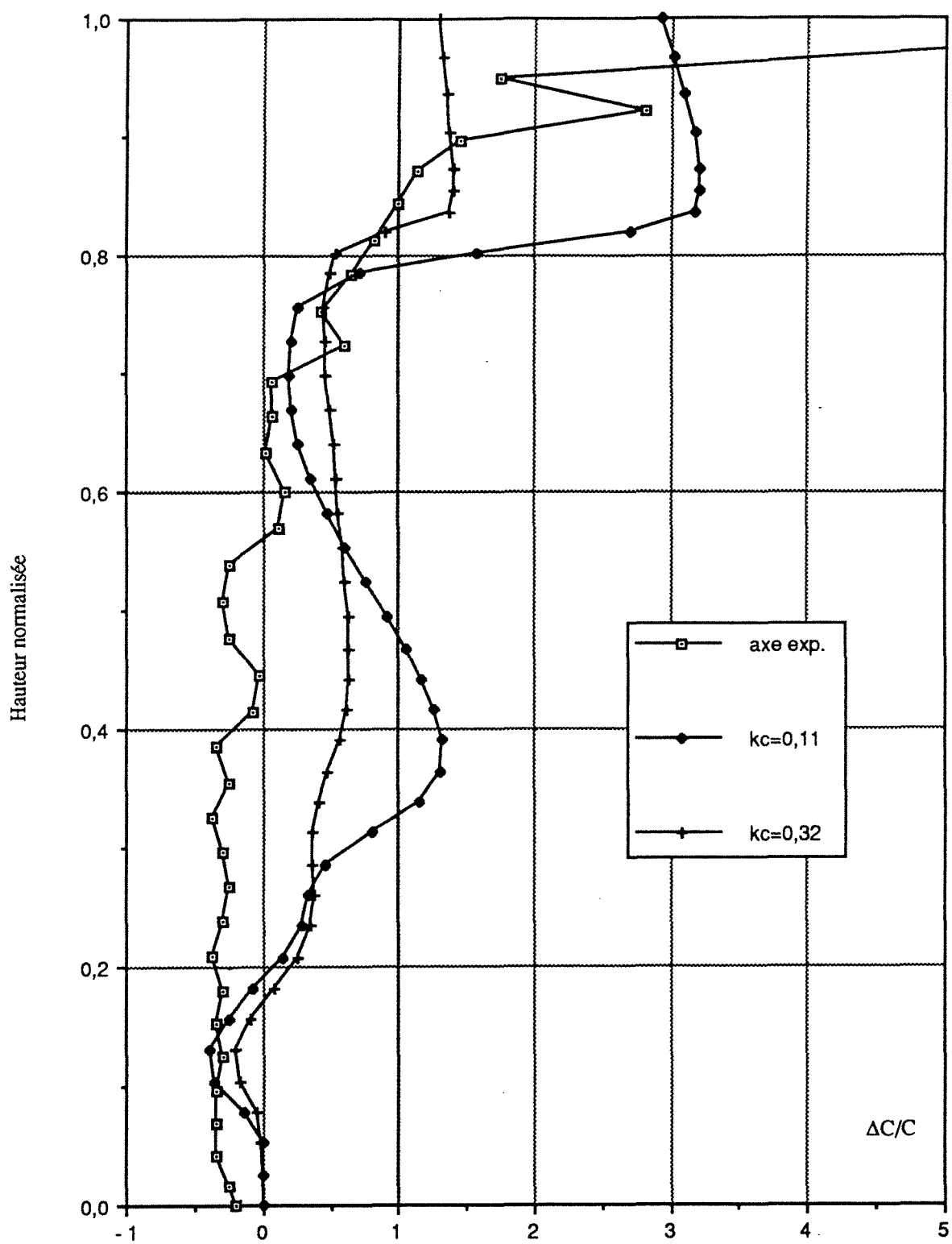


Figure IV-22 : Influence du coefficient de partage du carbone sur la ségrégation axiale

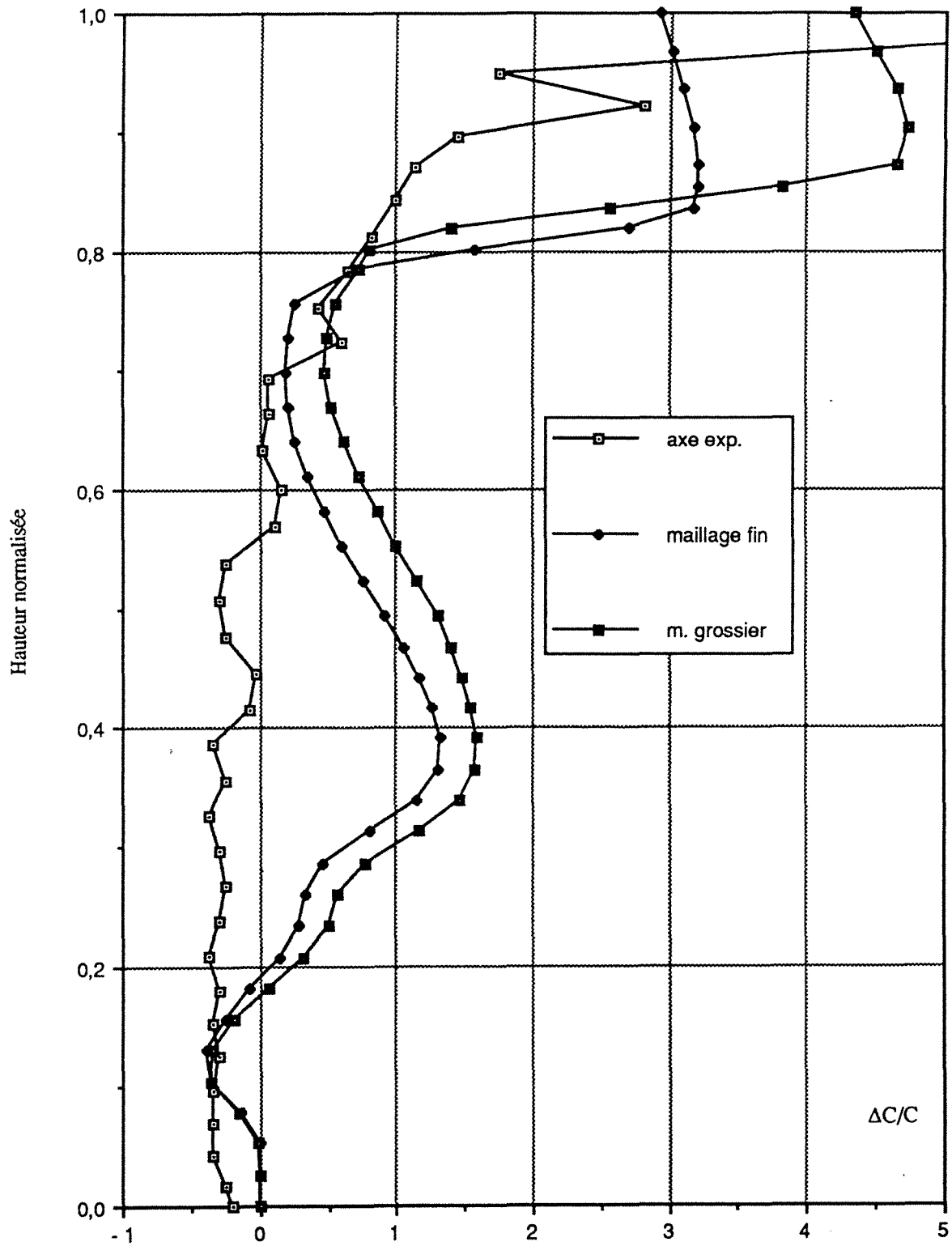


Figure IV-23 : Influence du maillage sur la ségrégation axiale

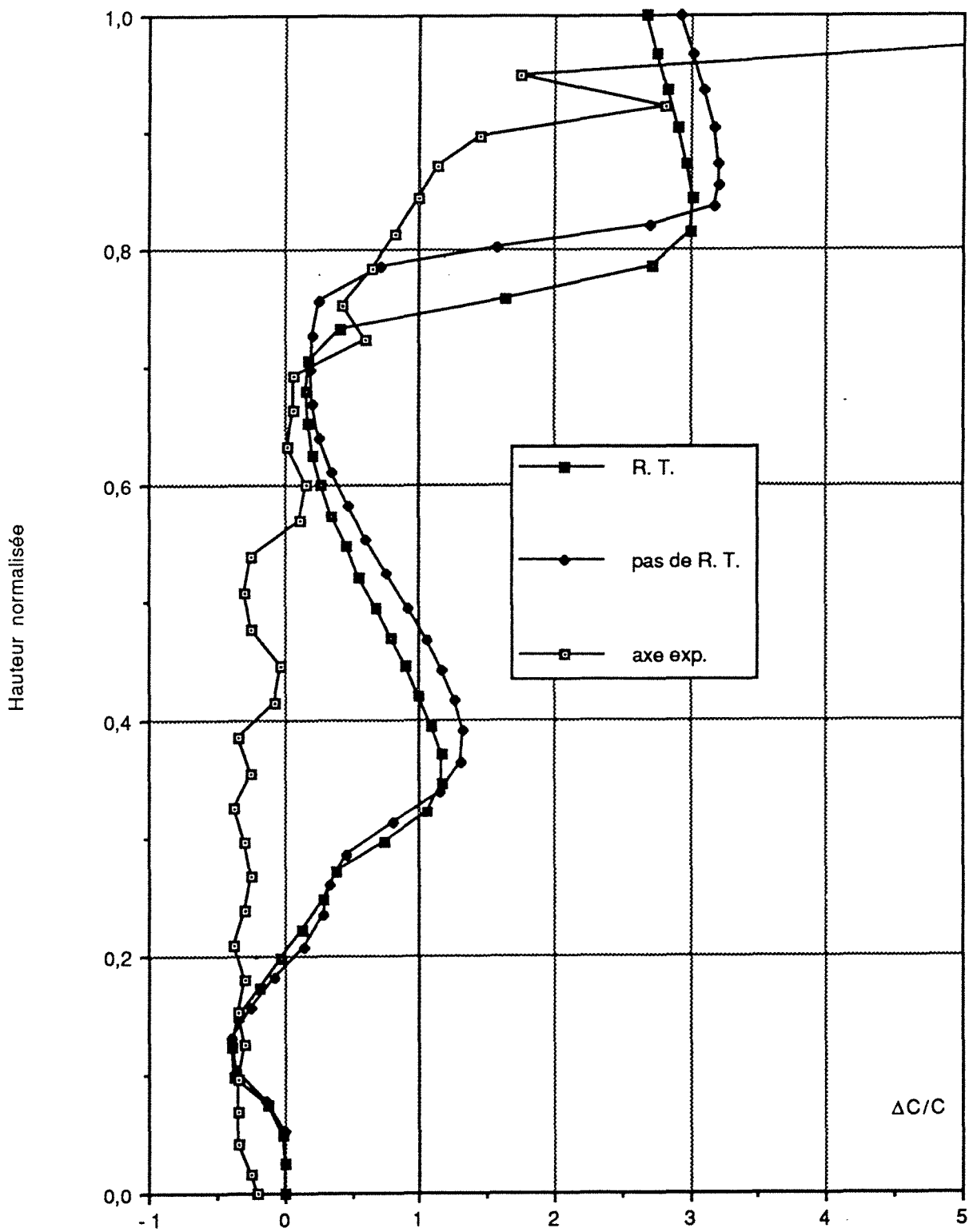


figure IV-24 : Influence de la resistance thermique sur la ségrégation axiale



Figure IV-25 - Enveloppe des zones du lingot supposées renfermer des veines sombres

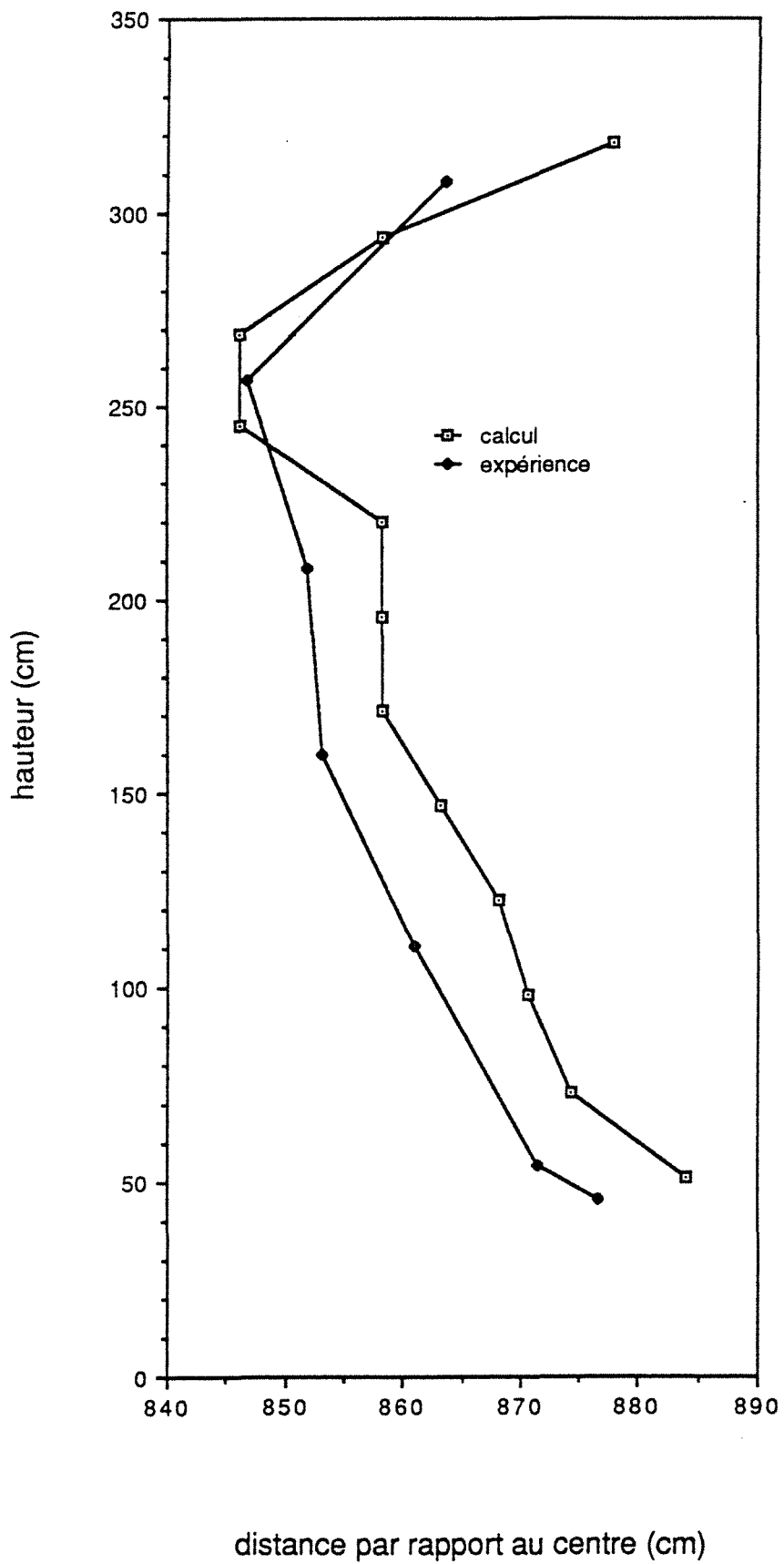


Figure IV-26 - Position des veines sombres mesurée et calculée

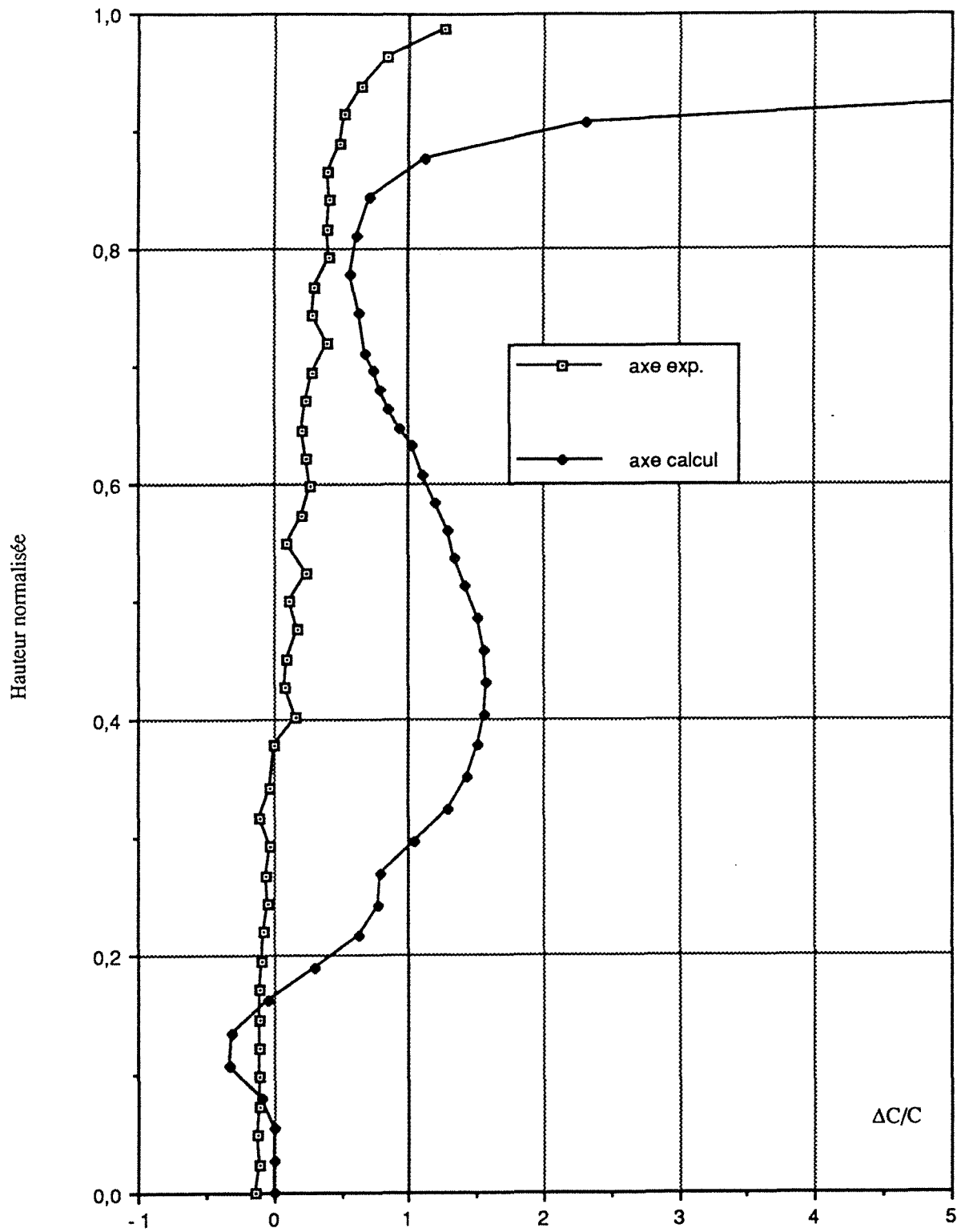


Figure IV-27 : ségrégation axiale d'un lingot de 110 tonnes

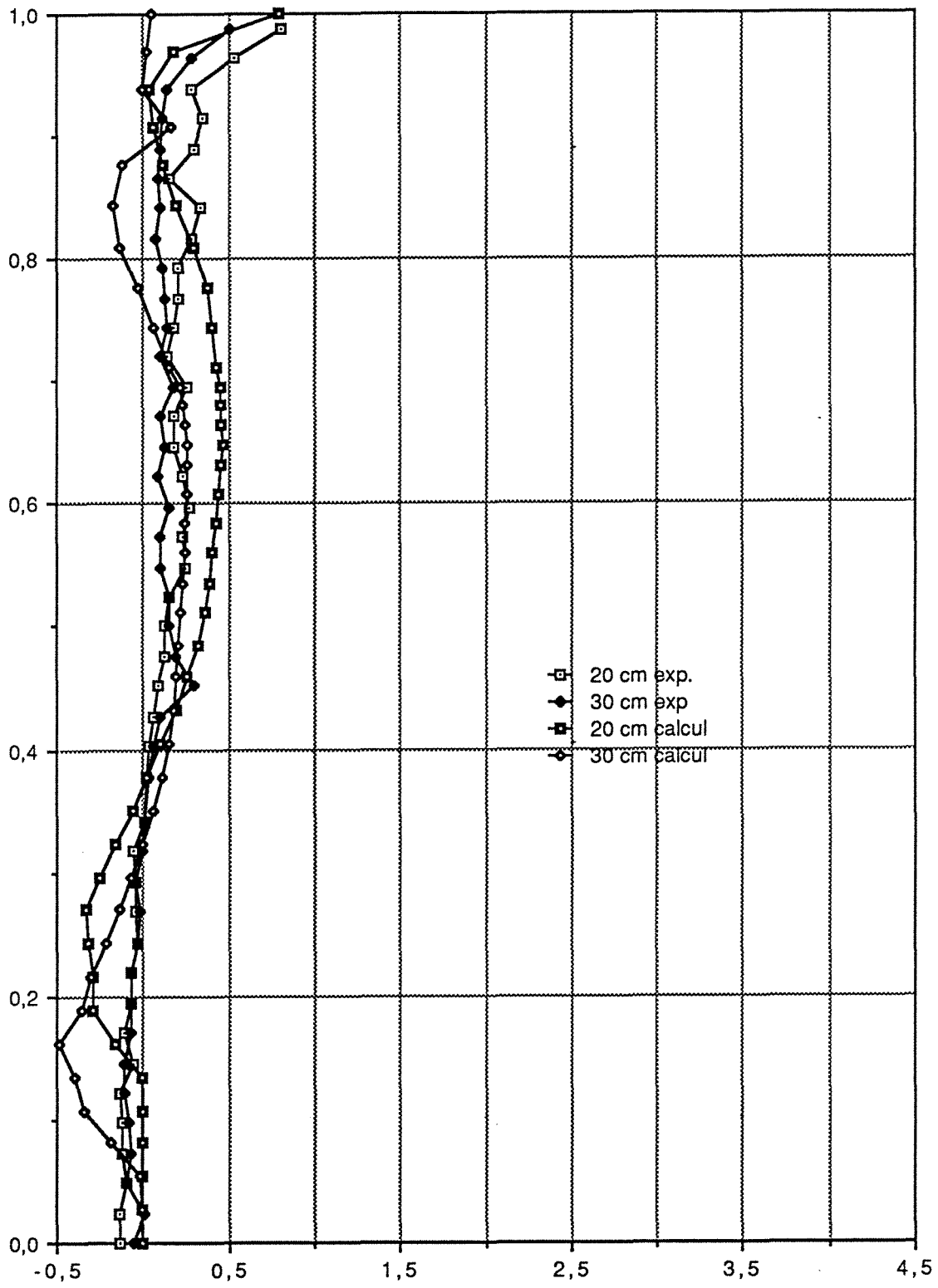


Figure IV-28 - Ségrégation calculée et expérimentale à 20 et 30 cm d l'axe d'un lingot de 110 tonnes

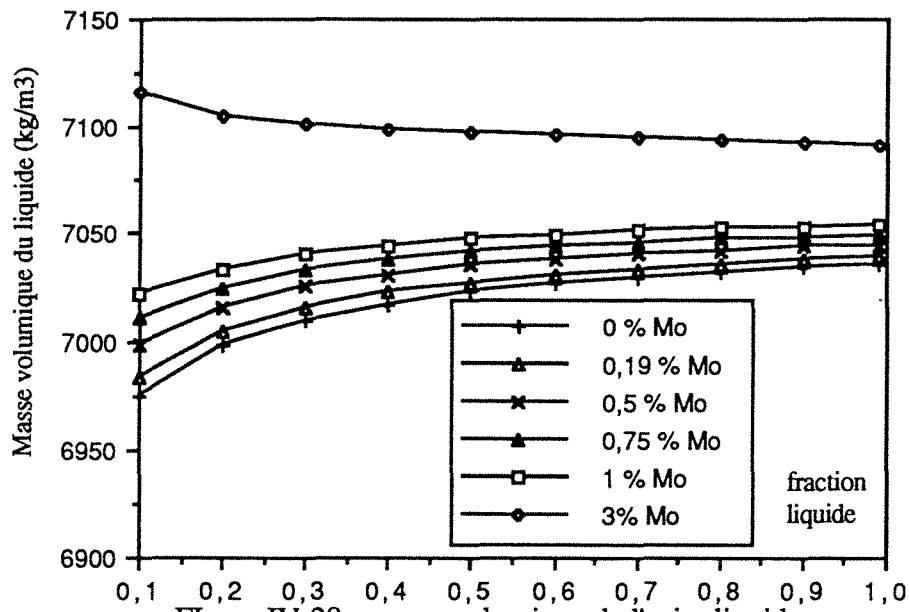


Figure IV-29 : masse volumique de l'acier liquide en fonction de la fraction liquide pour plusieurs teneurs en molybdène

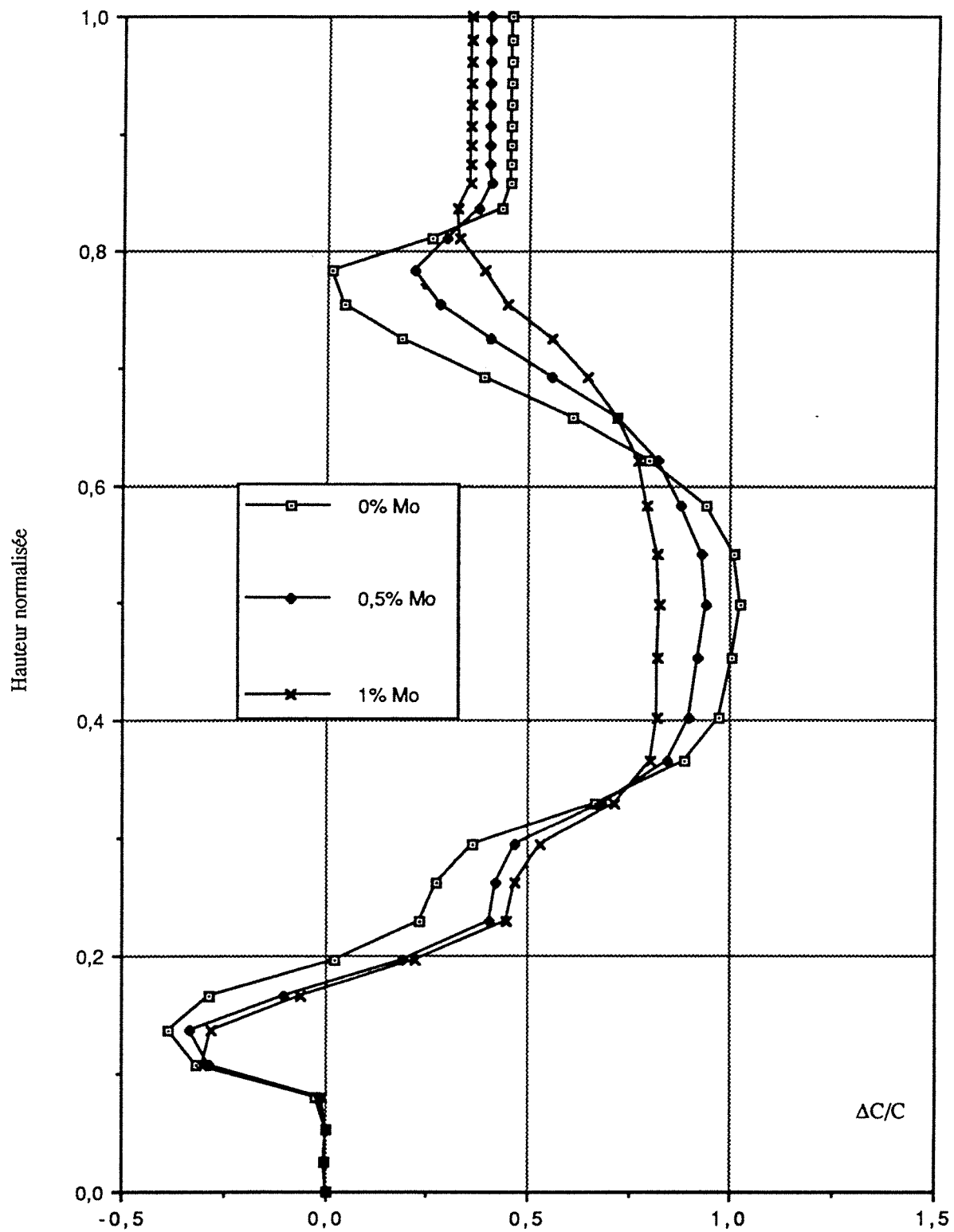


Figure IV-30 : Influence du molybdène sur la ségrégation axiale

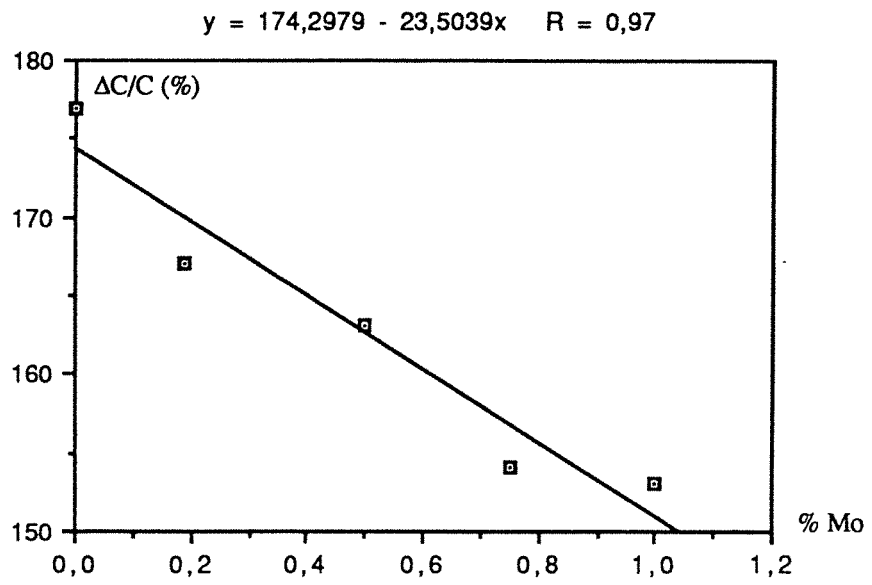


Figure IV-32 : taux de ségrégation en fonction de la teneur en molybdène

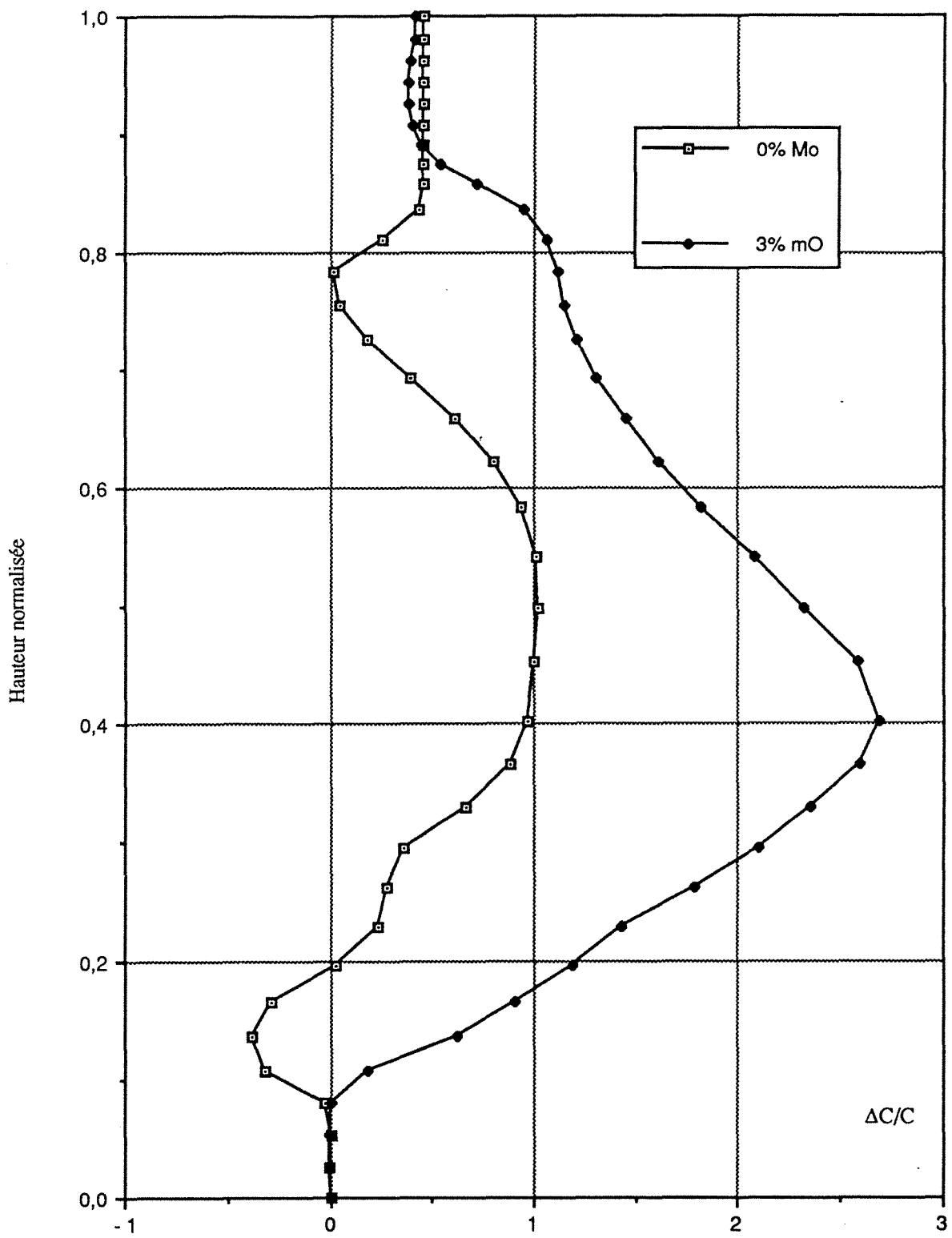


Figure IV-31 : conséquence d'une trop forte concentration en molybdène sur la ségrégation axiale

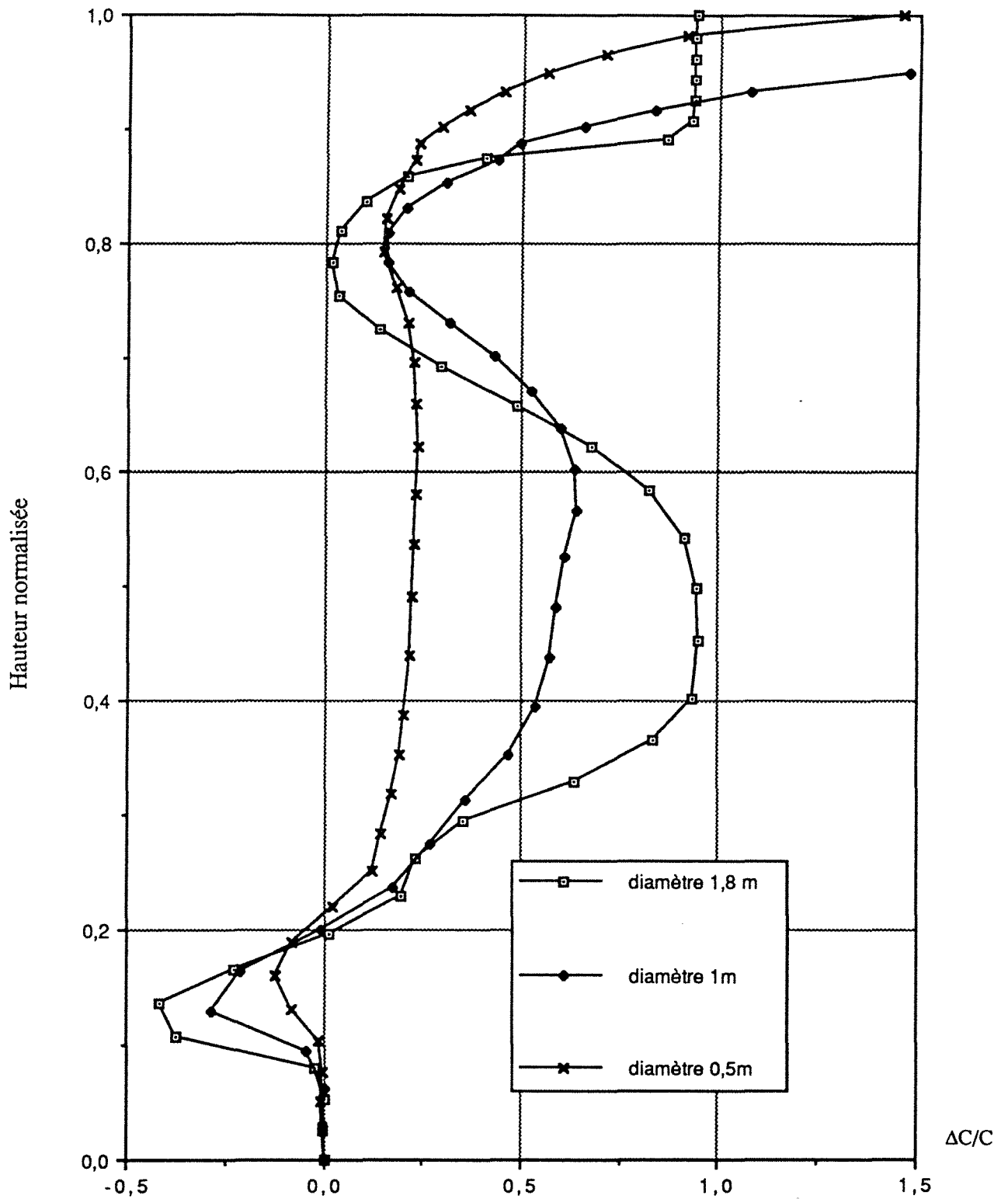


Figure IV-33 : influence du diamètre sur la ségrégation axiale

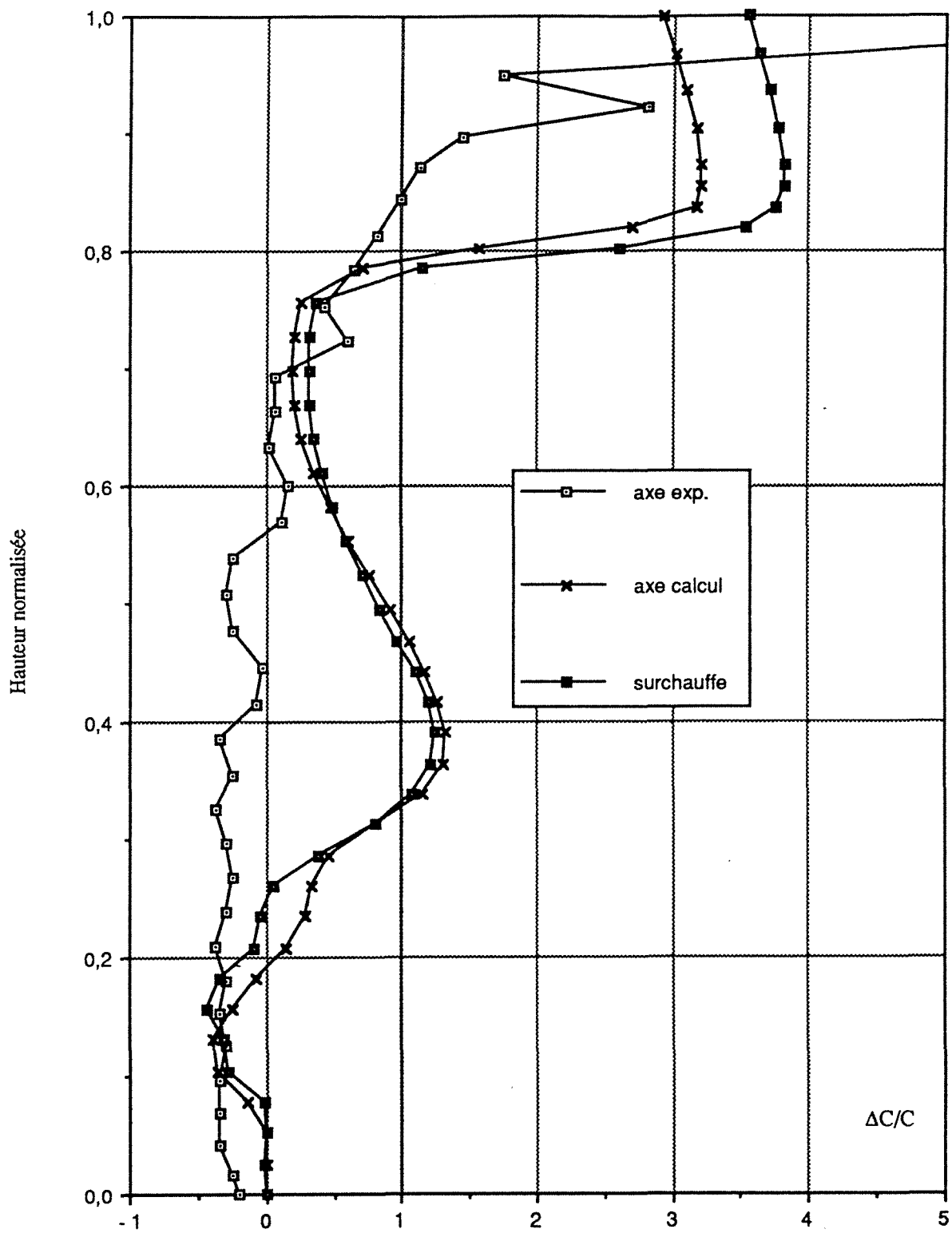


Figure IV-34 : Influence de la surchauffe sur la ségrégation axiale

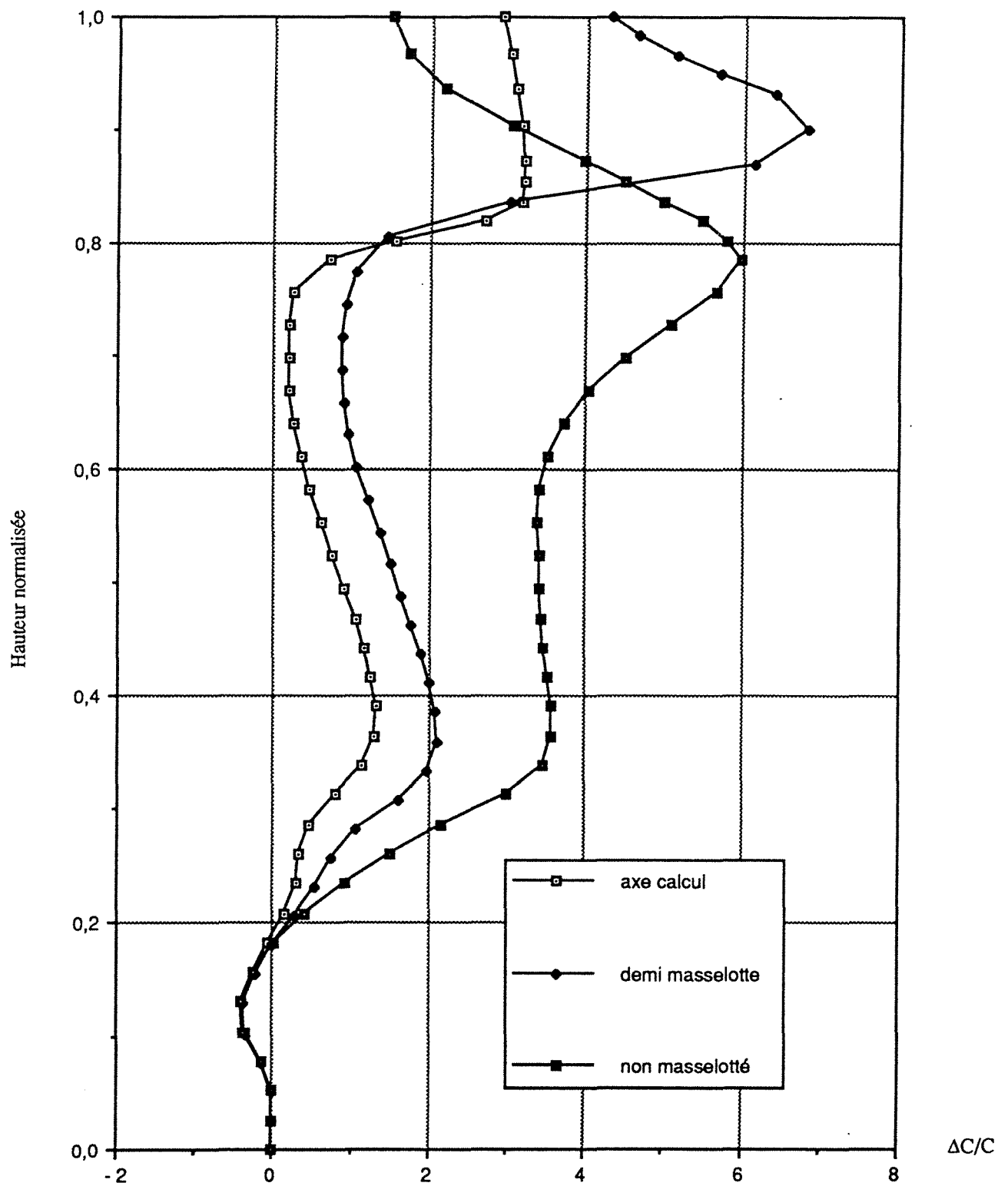
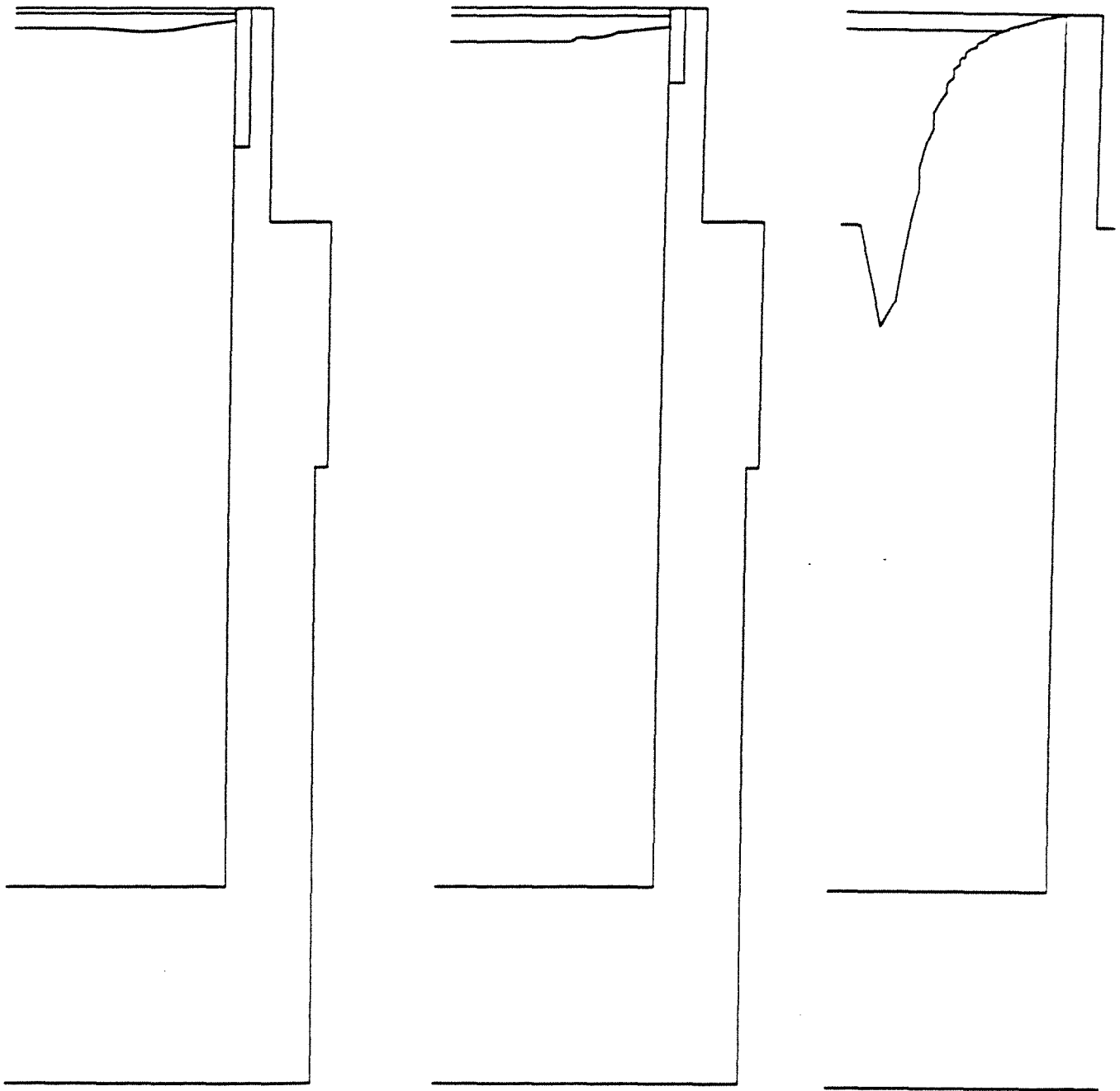


Figure IV-35 : Influence du masselottage sur le calcul de la ségrégation axiale



Figures IV-36 : Influence de la masselotte sur la forme de la retassure

Figure IV-36a
masselotte classique

Figure IV-36b
demie masselotte

Figure IV-36c
masselotte absente

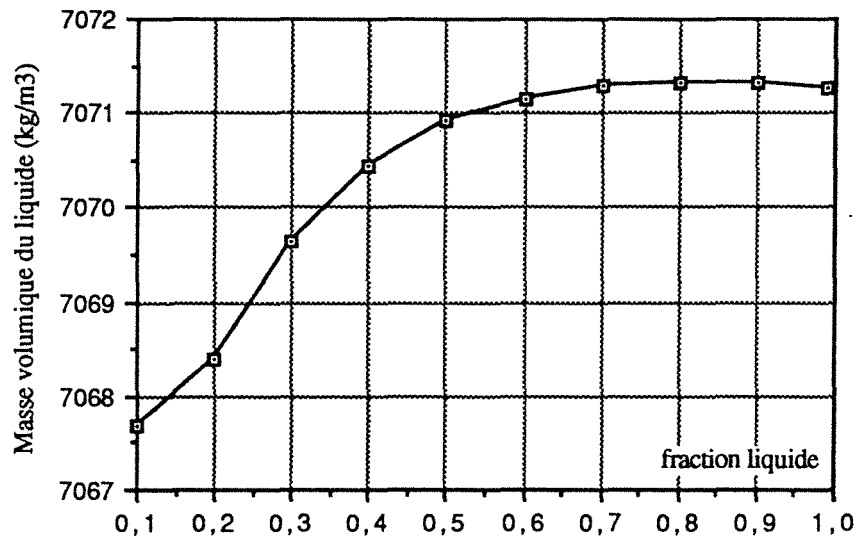


figure IV-37 : Masse volumique du liquide à 1,45% de molybdène

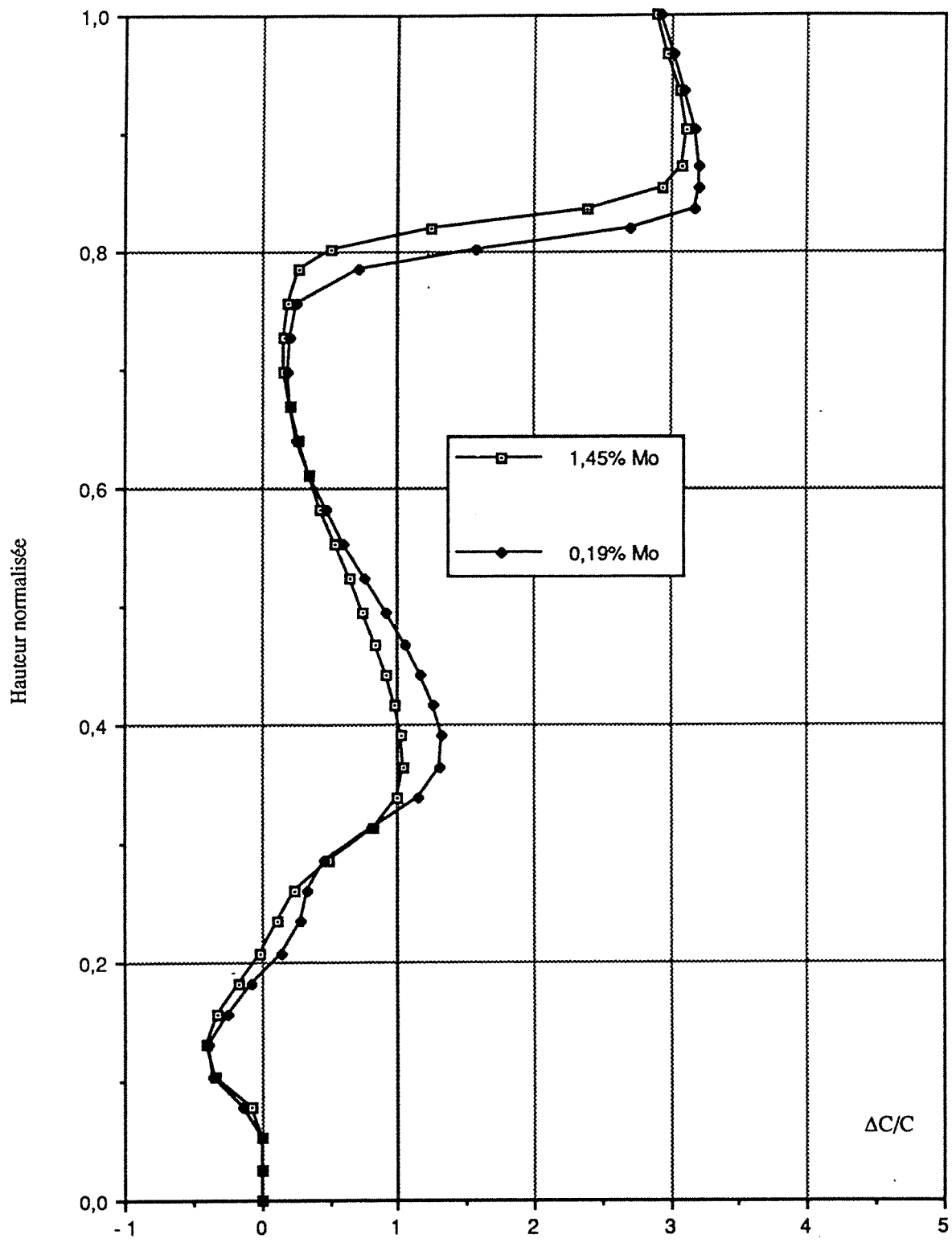


Figure IV-38 : Ségrégation axiale pour un acier à 1,45% de molybdène

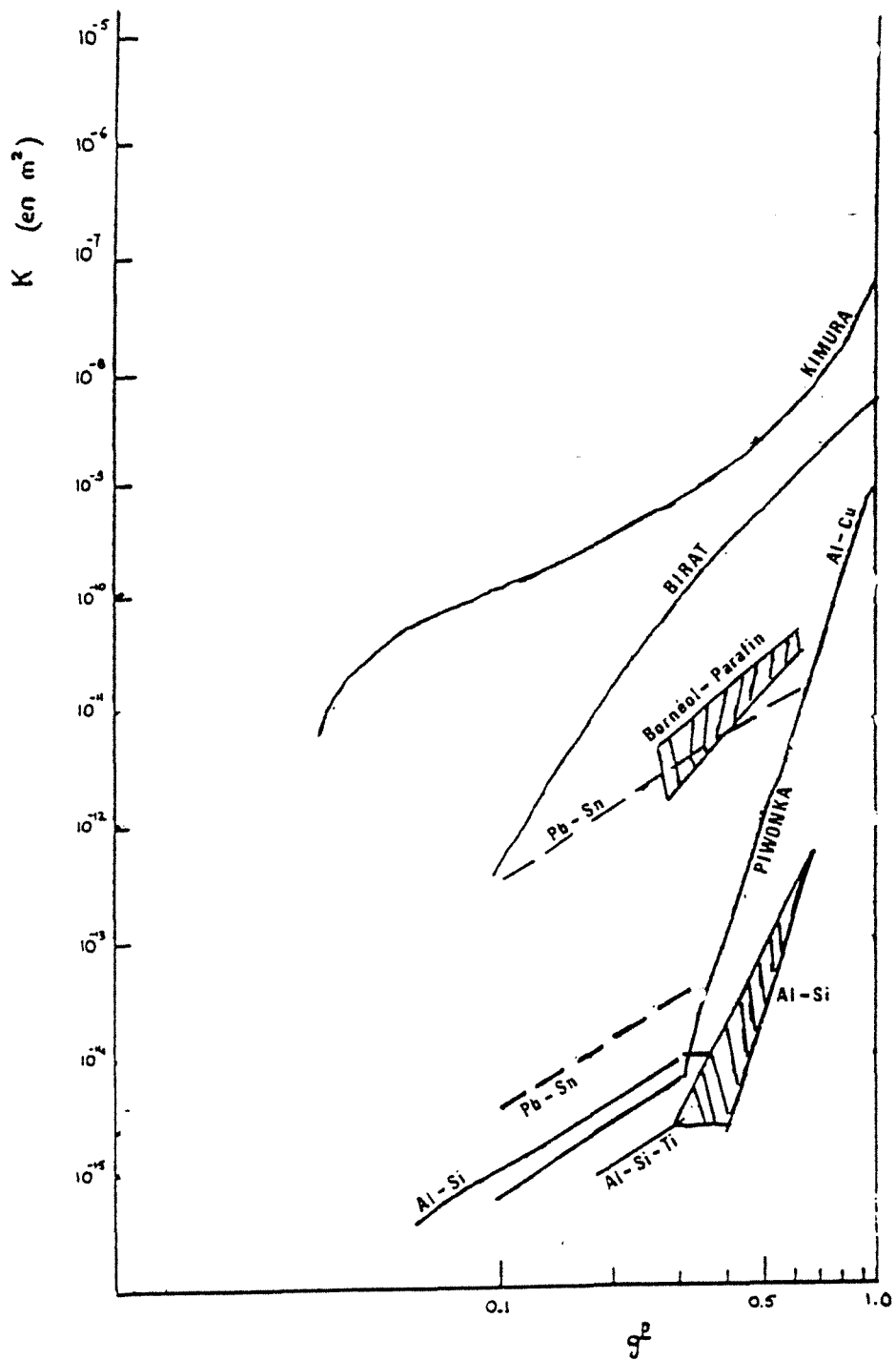


Figure A1 - Evolution de la perméabilité en fonction de la fraction liquide (courbes établies par différents auteurs)

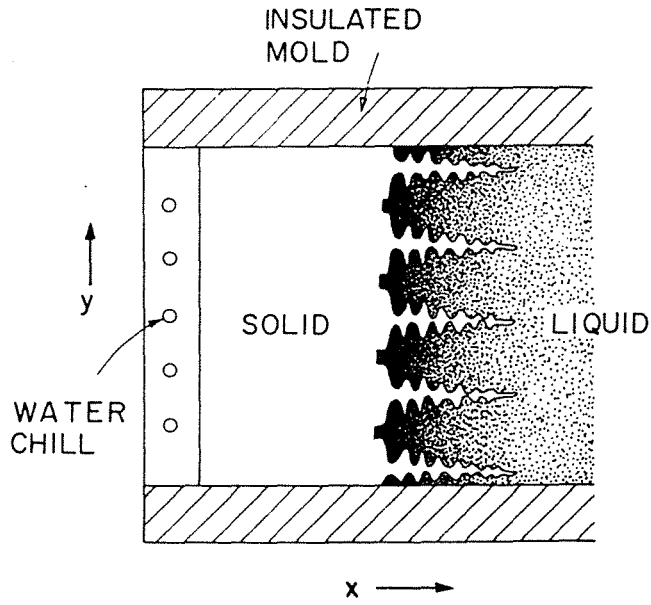


Figure A2-1 (d'après [64])

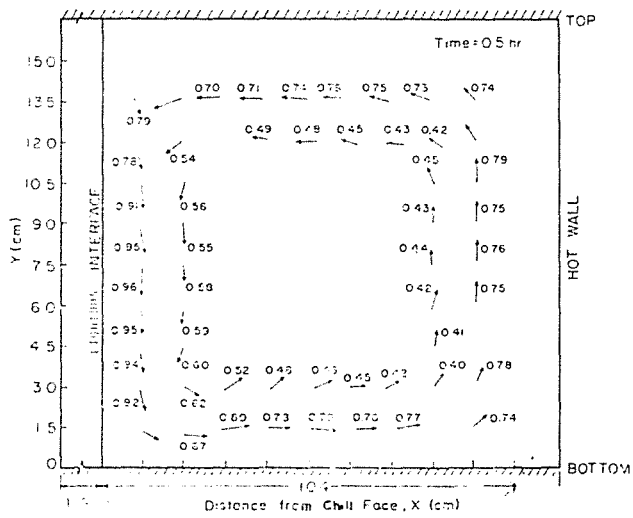


Fig. 16—Computed plot of the magnitude of the velocity field in the bulk liquid at 0.5 h.

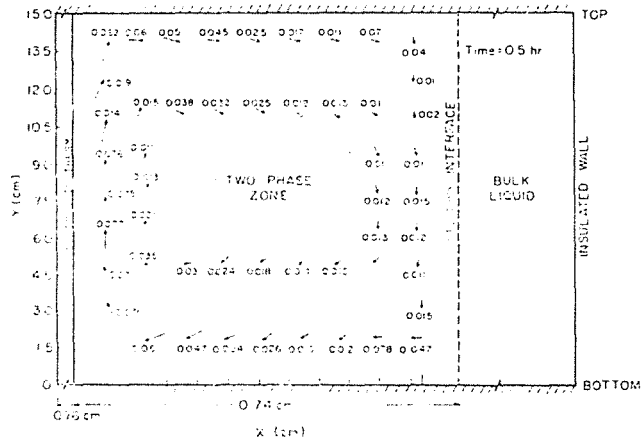
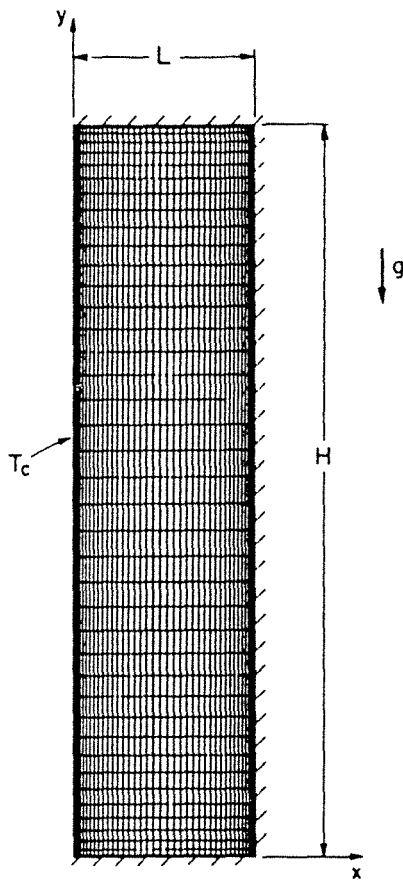


Fig. 17—Computed plot of the magnitude of the velocity field (cm/s) in the mushy zone at 0.5 h.

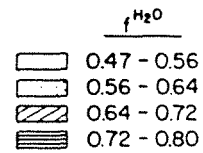
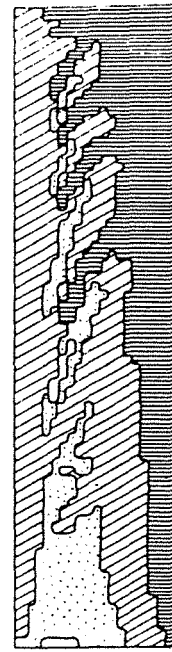
Figure A2-2 (d'après [67])



Physical system, computational grid, and nomenclature relevant to binary solidification in a rectangular mold.

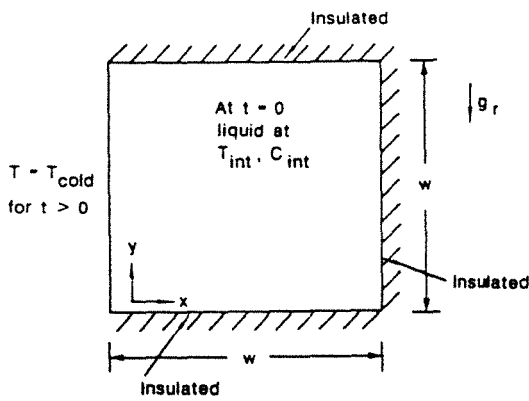
Figure A2-3 (d'après [32])

($t = 6540$ s)
Macrosegregation



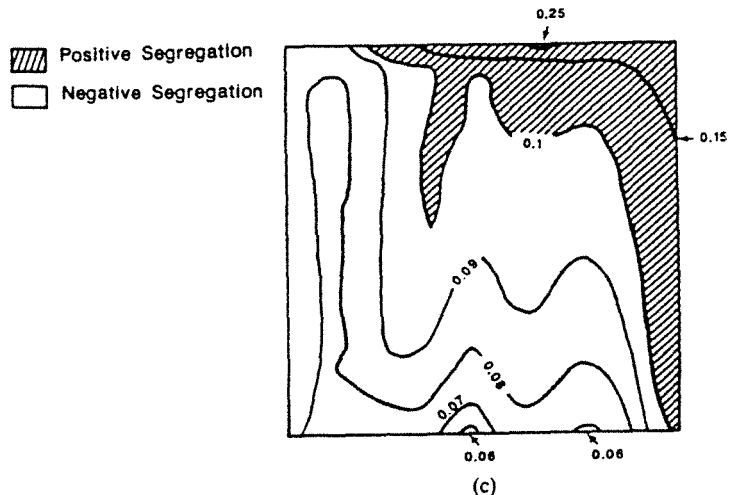
Macrosegregation after complete solidification ($t = 6540$ s).

Figure A2-4 (d'après [32])



Schematic diagram of the test problem.

Figure A2-5 (d'après [33])



Macro-segregation patterns at $t = 3000$ s :

Figure A2-6 (d'après [33])

