



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>

1 360368223

OU IN PLOE 8 N

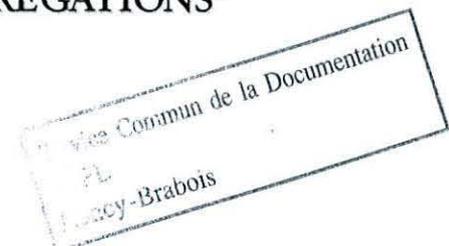
THESE DE DOCTORAT
DE L'INSTITUT POLYTECHNIQUE DE LORRAINE
Spécialité : Mécanique – Energétique
Ecole Doctorale : EMMA

(M) 2004 RABIA, B.

Réalisée au
LABORATOIRE DE SCIENCE ET GENIE DES MATERIAUX ET DE
METALLURGIE à l'ECOLE NATIONALE DES MINES DE NANCY

Présentée par :
Boubeker RABIA
(Ingénieur (ENP ALGER) & Magistère (USTHB ALGER))

LA FORMATION DES STRUCTURES EQUIAXES :
"MOUVEMENT DES GRAINS, CROISSANCE-REFUSION,
CONSEQUENCES SUR LES MACROSEGREGATIONS"



Soutenue Publiquement le 04 Octobre 2004
Devant le jury composé de

M. Pierre ARCHAMBAULT	Président
M. Michel RAPPAZ	Rapporteur
M. Eric ARQUIS	Rapporteur
M. Stéphane HANS	Examineur
M. Gérard LESOULT	Co-directeur de thèse
M. Hervé COMBEAU	Directeur de thèse

REMERCIEMENTS

Je remercie Messieurs André Simon ancien directeur et Jean Marie Dubois directeur du Laboratoire de Science et Ingénierie des Matériaux et de Métallurgie, de m'avoir accueilli au sein de leur Laboratoire.

Je tiens à remercier également Messieurs Pierre Archambault, Michel Rappaz, Eric Arquis et Stéphane Hans d'avoir bien voulu être mes examinateurs.

Toute ma sincère reconnaissance au vénéré M. Hervé COMBEAU (Monsieur encyclopédie) pour ses conseils très précieux, son aide et son soutien indéfectible tout au long de ma thèse.

Un grand merci à M. Gérard Lesoult, pour tous ses conseils et ses encouragements en continu tout au long de ma thèse.

Je remercie tous les partenaires du projet de recherche OSC qui a financé ce travail, pour leurs encouragements en continu et sincère tout au long de ma thèse. Je remercie spécialement Madame Isabelle POITRAULT d'ARCELOR la coordinatrice du Projet.

Je remercie, le personnel du SCC qui a travaillé en coordination avec notre laboratoire, pour le développement du Logiciel SOLID. Merci, Madame Chantal DAVID, Mickael et Sophie.

Mille mercis à J F Douce, Sabrina, Aziz, Bernard, Mustapha, Salah, Mo, Olivier, Laurence, Anne Marie, Martine,.... de m'avoir supporté pendant 4 ans, thanmirth

Enfin, un grand merci à tout le personnel du groupe de recherche de solidification (GT2), à tout le personnel du laboratoire LSG2M et enfin à tous les thésards des différents laboratoires de l'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Nancy.

Dédicaces

Je dédie ce Manuscrit à mes très chers
parents et à mes frères et sœurs

TABLE DE MATIERES

SYMBOLES ET NOTATIONS	6
INTRODUCTION.....	9
CHAPITRE I.....	15
I - ETUDE BIBLIOGRAPHIQUE	16
I - 1. ORIGINE ET FORMATION DE LA ZONE EQUIAXE :	16
I - 2. INFLUENCE DES CONDITIONS OPERATOIRES :	16
➤ La surchauffe initiale :	16
➤ La composition de l'alliage :	16
➤ La convection :	16
➤ Ensemencement de la zone liquide centrale :	17
I - 3. GERMINATION HETEROGENE :	17
I - 4. FRAGMENTATION DU TISSU DENDRITIQUE :	18
I - 5. PHENOMENES PHYSIQUES ET MECANISMES RESPONSABLES DE LA FRAGMENTATION DU TISSU DENDRITIQUE :	19
I - 5.1. Principaux travaux de la littérature entrepris sur les populations de fragments cristallins :	22
I - 5.1.1. Alliages métalliques :	22
I - 5.1.1.1. Résultats expérimentaux de Moukassi et coll :	24
➤ Cas Pb-2%Sb :	24
I - 5.1.1.2. Interprétations des résultats et discussions :	25
➤ Cas Pb-4%Sb :	25
I - 5.1.1.3. Interprétations des résultats et discussions :	26
I - 5.1.2. Alliages organiques et solutions aqueuses :	29
I - 5.2. Conclusion :	38
CHAPITRE II.....	43
II - PRESENTATION DU MODELE DIPHASIQUE.....	44
II - 1. INTRODUCTION :	44
II - 2. BIBLIOGRAPHIE SUR LES MODELES DIPHASIQUES :	44
II - 2.1. Présentation de la méthode de prise de moyenne :	45
II - 2.1.1. Définition des diverses moyennes :	45
II - 2.1.2. Relation entre grandeurs macroscopiques et microscopiques :	46
II - 2.1.3. Application de la méthode des prises de moyenne sur un bilan de conservation :	47
II - 2.1.4. Application sur un bilan de conservation globale de la masse :	48
II - 2.2. Présentation du modèle diphasique de Beckermann :	49

➤ Bilan de conservation sur les populations de cristallites :	49
➤ Bilan de conservation de la masse sur la phase α :	49
➤ Bilan de conservation de la masse aux interfaces l/s :	49
➤ Bilan de conservation de la masse sur le constituant i dans la phase α :	49
➤ Bilan de conservation de la masse sur le constituant i à l'interface liquide- solide :	50
➤ Bilan de l'énergie dans la phase α :	50
➤ Bilan de conservation de l'énergie aux interfaces l/s :	50
➤ Equilibre thermodynamique aux interfaces liquide/solide:	50
➤ Bilan de conservation de la quantité de mouvement sur la phase α :	50
II - 3. CONCLUSION :	55
II - 4. APPLICATION DU MODELE ET RESULTATS NUMERIQUES :	56
II - 5. CONCLUSIONS :	68
CHAPITRE III :	69
III - MODELISATION DES EXPERIENCES DE MOUKASSI A L'AIDE DU MODELE DIPHASIQUE.....	70
III - 1. INTRODUCTION.....	70
III - 2. MISE EN PLACE DU MODELE DIPHASIQUE ET APPLICATION :	70
<i>III - 2.1. Etablissement des bilans de conservation pour l'expérience Moukassi :</i>	<i>71</i>
➤ Dispositif expérimental :	71
➤ Bilan de conservation de la densité volumique moyenne de grains :	72
➤ Bilan moyen de conservation de la masse dans la phase solide :	74
➤ Bilan moyen de conservation de la masse à l'interface :	74
➤ Bilan moyen de conservation de la masse du constituant i dans la phase liquide :	74
➤ Bilan moyen de conservation de la masse du constituant i dans la phase solide : 75	
➤ Bilan moyen de conservation de la masse du constituant i aux interfaces l/s : 75	
➤ Bilan moyen de conservation de l'énergie :	75
➤ Equilibre thermodynamique aux interfaces liquide/solide:	76
➤ La surface spécifique :	76
➤ Les longueurs de diffusion chimique :	76
➤ Calcul de la température des pointes de dendrites colonnaires :	76
➤ Algorithme de résolution :	77
III - 3. DETERMINATION DES DENSITES DE FLUX DE FRAGMENTS CRISTALLINS :	79
➤ Densité volumique de cristaux globulaires :	79
➤ Méthode mise en œuvre pour l'exploitation des résultats expérimentaux :	79
➤ Calcul des rayons réels des cristaux :	80
<i>III - 3.1. CAS Pb-2%Sb :</i>	<i>80</i>
III - 3.1.1. Résultats du modèle et discussions :	80
<i>III - 3.2. CAS Pb-4%Sb :</i>	<i>83</i>
III - 3.2.1. Résultats et discussions :	83
➤ Synthèse des résultats obtenus et corrélations établies :	86
<i>III - 3.3. Synthèses et conclusions sur l'exploitation des expériences de Moukassi :</i>	<i>88</i>
III - 4. APPLICATION DU MODELE DIPHASIQUE MOYENNE AUX EXPERIENCES DE BRASSAGE DE MOUKASSI :	90
➤ Données thermodynamiques des deux nuances d'alliage Pb-Sb :	90
<i>III - 4.1. Définition d'un cas de référence pour la nuance d'alliage Pb- 4% Sb :</i>	<i>91</i>

III - 4.2. Etude paramétrique pour la nuance Pb-4%Sb :	95
III - 4.2.1. Influence de la surfusion aux pointes de dendrites colonnaires :	95
III - 4.2.2. Influence de la taille initiale de fragments cristallins :	96
III - 4.2.3. Influence de la surchauffe initiale :	100
III - 4.2.4. Influence de la densité volumique initiale de cristallites dans le puits liquide :	101
III - 4.2.5. Influence du temps d'injection de fragments dans le puits liquide :	103
□ Influence de la sédimentation des grains :	104
III - 4.3. Etude paramétrique sur la nuance Pb-2%Sb :	105
III - 4.3.1. Influence de la taille initiale de fragments cristallins :	105
III - 4.3.2. Influence de la surchauffe :	107
III - 4.3.3. Influence de la densité volumique initiale de cristallites dans le puits liquide :	108
III - 4.3.4. Influence du temps d'injection de fragments dans le puits liquide :	109
III - 5. CONCLUSIONS :	110
CHAPITRE IV :	112
IV - MODELISATION DE LA SOLIDIFICATION AVEC PRISE EN COMPTE DU MOUVEMENT DES GRAINS EQUIAXES	113
IV - 1. MODELE DECRIVANT LA SOLIDIFICATION D'UN ALLIAGE AVEC LA PRISE EN COMPTE DU MOUVEMENT DE LA PHASE SOLIDE	113
➤ Bilan de conservation de la densité volumique de grains :	114
➤ Bilan de masse sur la phase solide :	114
➤ Bilan de masse sur la phase liquide :	114
➤ Bilan de conservation de la masse globale :	114
➤ Bilan de conservation de la masse sur le constituant i dans la phase liquide :	115
➤ Bilan de conservation de la masse sur le constituant i dans la phase solide :	115
➤ Titre massique moyen sur le constituant i :	115
➤ Bilan de conservation de la masse sur le constituant i aux interfaces liquide/solide :	116
➤ Equilibre thermodynamique aux interfaces liquide/solide:	116
➤ Bilan de conservation de l'énergie :	116
➤ Bilan de conservation de la quantité de mouvement :	116
IV - 1.1. Equation de conservation de la quantité de mouvement lorsque les vitesses moyennes intrinsèques des phases liquide et solide sont égales :	117
IV - 1.2. Equation de conservation de la quantité de mouvement lorsque les vitesses moyennes intrinsèques des phases liquide et solide sont différentes :	119
➤ Traitement du mouvement des phases liquide et solide si $g^s < g_{pack}^s$ ($\langle \vec{v}^s \rangle^s \neq 0$)	119
□ Bilan de quantité de mouvement dans la phase solide :	119
□ Bilan de quantité de mouvement dans la phase liquide :	120
➤ Traitement du mouvement des phases liquide et solide si $g^s \geq g_{pack}^s$ ($\langle \vec{v}^s \rangle^s = 0$)	122
IV - 1.3. Synthèse sur les différentes bilans de conservation de quantité de mouvement :	122
IV - 1.4. Méthode de résolution des EDP et algorithme de calcul :	123

IV - 1.4.1. Méthode de résolution des EDP :	123
➤ Système d'équations résolues :	123
IV - 1.4.1.1. Exemple :	125
➤ Première étape :	125
➤ Deuxième étape :	125
IV - 1.4.2. Application de la méthode de séparation à un cas unidirectionnel simple :	126
IV - 1.4.3. Discrétisation de l'EDP par la méthode de séparation :	126
➤ Schéma obtenu avec une méthode classique :	127
➤ Schéma obtenu avec une méthode de séparation :	127
❑ Première étape : résolution de la partie transport	127
❑ Deuxième étape : résolution de la partie croissance	127
IV - 1.4.4. Comparaison des résultats de la méthode de séparation avec une méthode classique:	128
IV - 1.4.4.1. Solution obtenue avec la méthode classique :	128
➤ Influence du pas de temps :	130
➤ Influence du maillage :	131
➤ Influence de la vitesse :	131
IV - 1.4.5. Algorithme de résolution :	133
IV - 1.4.5.1. Détails des calculs : transport et croissance	133
❑ Première étape : Transport	133
❑ Deuxième étape : Croissance - Refusion	135
IV - 2. CONCLUSIONS :	138
CHAPITRE V :	139
SIMULATION NUMERIQUE AVEC PRISE EN COMPTE DU MOUVEMENT DE LA PHASE SOLIDE (GRAINS EQUIAXES GLOBULAIRES)	139
V - INTRODUCTION :	140
V - 1. ANALYSE NUMERIQUE DANS LE CAS : $\langle \vec{v}^s \rangle^s = \langle \vec{v}^l \rangle^l$	140
<i>V - 1.1. définition du cas de référence :</i>	<i>140</i>
➤ Propriétés thermophysiques et données thermodynamiques de l'alliage étudié :	141
➤ Loi d'injection de fragments :	142
<i>V - 1.2. Résultats et interprétation :</i>	<i>142</i>
➤ Autre loi de formation des grains:	152
❑ Germination en volume :	152
V - 2. CONCLUSION :	155
V - 3. ANALYSE NUMERIQUE DANS LE CAS : $\langle \vec{v}^s \rangle^s \neq \langle \vec{v}^l \rangle^l$	156
<i>V - 3.1. Application du modèle diphasique en convection naturelle :</i>	<i>156</i>
V - 3.1.1. Résultats et discussions :	156
V - 3.1.2. Etude paramétrique :	170
➤ Influence de la fraction liquide limite (gpack) :	170
➤ Influence de la densité de flux de fragments cristallins :	173
V - 4. CONCLUSIONS :	174
V - 5. APPLICATION DU MODELE DIPHASIQUE A UN LINGOT INDUSTRIEL :	175
<i>V - 5.1. Application du modèle au Lingot ASCOMETAL de 6,2 tonnes :</i>	<i>175</i>
➤ Caractéristiques du Lingot :	175
➤ Géométrie de la lingotière :	175

➤ Géométrie du lingot et conditions adoptées pour les calculs :.....	175
V - 5.1.1. Calculs réalisés et conditions imposées :	177
V - 5.1.2. Résultats et discussions :.....	177
➤ Influence du maillage :.....	185
➤ Influence de la fraction de liquide limite (gpack) :.....	187
➤ Influence de la masselotte (maillage fin) :.....	188
➤ Influence de la zone colonnaire :	190
➤ Influence de la loi de germination de grains en volume :.....	195
V - 6. CONCLUSIONS :.....	198
CONCLUSION GENERALE	199
REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES.....	202
ANNEXES.....	208

SYMBOLES ET NOTATIONS

cp^φ	Capacité thermique massique de la phase φ	$J\text{ kg}^{-1}\text{ K}^{-1}$
C_D	Coefficient de traîné des grains	
D_i^φ	Coefficient de diffusion de l'élément d'alliage i dans la phase φ	$\text{m}^2\text{ s}^{-1}$
f^φ	Fraction massique de la phase φ	
F^s	Fraction solide surfacique mesurée par Moukassi	
\bar{g}	Accélération gravitationnelle	m s^{-2}
g^φ	Fraction volumique de la phase φ	
g^{limite}	Fraction liquide limite (critique) à partir de laquelle le solide est fixe	
h^φ	Enthalpie massique de la phase φ	$J\text{ kg}^{-1}$
H	Hauteur du doigt refroidisseur plongé dans le bain liquide	m
H_{max}	Hauteur maximale du creuset	m
k_i	Coefficient de partage de l'élément d'alliage i	
\bar{j}_i^φ	Densité de flux massique de l'élément i par diffusion dans la phase φ à l'interface l/s	$\% \text{ mass m}^{-2}\text{ s}^{-1}$
K_{conv}	Coefficient de convection thermique	$\text{W m}^{-2}\text{ K}^{-1}$
L	Chaleur latente de fusion massique	$J\text{ kg}^{-1}$
\dot{m}_s	Débit massique de fragments cristallins	$\text{Kg m}^{-2}\text{ s}^{-1}$
\dot{n}_s	Densité de flux de fragments détachés par unité de surface du front colonnaire	$\text{fragments m}^{-2}\text{ s}^{-1}$
n_{surf}	Nombre de cristallites par unité de surface de l'échantillon prélevé	$\text{cristallites m}^{-2}$
\dot{n}	Densité volumique de cristallites formés par unité de temps	$\text{cristallites m}^{-3}\text{ s}^{-1}$
N_v	Densité volumique de cristallites	grains m^{-3}
m_i	Pente de liquidus linéarisée en fonction de la composition en élément d'alliage	$\text{K \%}^{-1}\text{ mass}$
p	Pression absolue	Pa
\hat{p}	Pression motrice	Pa
R_c	Nombre de Reynolds des grains associés à leurs tailles et aux vitesses intrinsèques des phases liquide et solide	

R_{fg}^0	Rayon initial d'un fragment	m
R_g	Rayon moyen du grain	m
R_{int}	Rayon extérieur du cylindre interne (doigt)	m
R_{ext}	Rayon intérieur du cylindre externe (creuset)	m
$R_{réel}$	Rayon réel des cristallites	m
S_v	Surface spécifique	m ⁻¹
S	Surface du font colonnaire	m ²
S_c	Nombre de Schmidt pour l'élément d'alliage i	
T	Température	K
T_l	Température de liquidus	K
T_f	Température de fusion du corps pur	K
T_s	Température de solidus	K
μ	Viscosité dynamique	Pa s
V_s^0	Volume initial d'un fragment	m ³
$\langle \vec{V}^\varphi \rangle^\varphi$	Vitesse moyenne intrinsèque de la phase φ	m s ⁻¹
\vec{V}^φ	Vitesse moyenne débitante de la phase φ	m s ⁻¹
\vec{V}	Vitesse moyenne barycentrique massique	m s ⁻¹
Vol	Volume du bain liquide ou du volume global	m ³
w_i^φ	Titre massique en élément d'alliage i de la phase φ	% mass
$w_i^{\varphi*}$	Titre massique de l'élément d'alliage (i) de la phase φ à l'interface l/s	% mass
Δh_f	chaleur latente de fusion massique	J kg
ΔT	surfusion	°C
Δs_f	entropie de fusion massique	J kg K

Lettres grecques

φ	Variable pour désigner la nature de la phase : liquide ou solide	
$\sigma_{interface}$	énergie d'interface	$J m^2$
ρ_r	rayon du disque de contact solide/substrat	m
ρ^φ	Masse volumique de la phase φ	$kg m^{-3}$
δ_i^φ	Longueur de diffusion chimique dans la phase φ	m
β_T	Coefficient d'expansion thermique	K^{-1}
β_w	Coefficient d'expansion solutale	$\%^{-1}$
Γ_s	Masse de la phase α qui est formée ou qui a disparu par unité de temps et de volume	$kg m^{-3} s^{-1}$

Indices

φ	Phase liquide ou solide
fg	Fragments cristallins
l	Liquide
s	Solide
p	Pointe du front colonnaire (interface front colonnaire/puits liquide)
inj	injection
transp	Transport
crois	Croissance
*	Interface liquide/solide

INTRODUCTION

La qualité finale d'un lingot est en grande partie déterminée par les ségrégations ou hétérogénéités chimiques qui se forment pendant l'opération de solidification. Ces ségrégations se développent à plusieurs échelles dans le lingot. On appelle **microségrégation** les hétérogénéités de composition observées à l'échelle des structures de solidification, **mésoségrégation**, les hétérogénéités de composition dont au moins une dimension est petite par rapport à la taille du produit et enfin **macroségrégation**, les hétérogénéités de composition à l'échelle du produit. La carte des ségrégations est en relation avec la carte des microstructures à l'échelle des dendrites, des grains et du produit.

Du point de vue des structures de grains ou macrostructures, elles présentent généralement trois zones (voir figure 1) [1]. La première zone est constituée de cristaux équiaxes de petite taille et sans orientation particulière qui s'étend sur toute la périphérie du lingot. Elle est le résultat d'une germination hétérogène, induite par la surfusion importante qui se développe au contact du métal liquide chaud avec les parois froides de la lingotière. Cette zone est appelée **zone de peau**. Dans la deuxième zone appelée **zone colonnaire** ou **basaltique**, les cristaux ont une structure ramifiée dite dendritique. Ils sont orientés parallèlement les uns par rapport aux autres dans le sens du gradient thermique ou vers le centre du lingot. La troisième zone, appelée **zone équiaxe centrale**, remplace tantôt brutalement, tantôt progressivement, la texture colonnaire. Elle est formée à nouveau de cristaux équiaxes mais de taille bien plus conséquente que celle des cristaux en peau. Les cristaux dans cette zone présentent des morphologies différentes suivant leurs positions verticales dans le lingot. Ils peuvent être de morphologie globulaire ou dendritique.

Dans le cas de lingots d'aciers coulés dans des lingotières composées le plus souvent d'un moule en fonte par lequel on extrait la chaleur, on discerne généralement une **macroségrégation positive** en tête du lingot, et une **macroségrégation négative** au pied du lingot (voir figure 2) [2].

Dans le but de comprendre la formation de ces structures et ces ségrégations dans les lingots d'acier, de nombreux travaux de recherches expérimentaux et théoriques ont été entrepris.

Dans notre laboratoire, les principaux travaux de recherche réalisés sur cette thématique ont été les suivants :

(1) Roch (1992) a étudié, par la simulation numérique, les ségrégations qui se développent au cours de la solidification colonnaire des lingots. Cette étude a montré que les macroségrégations obtenues par le calcul présentaient : une ségrégation positive en haut du lingot, négative dans la partie basse et positive dans la zone centrale.

Par la suite, deux études ont été entreprises simultanément :

(2) La première étude était à caractère numérique. Elle a été réalisée par Vannier (1995). C'est une étude qui a contribué à prédire l'étendue de la zone équiaxe et les ségrégations engendrées, en intégrant dans le modèle développé par Roch la croissance de cristaux équiaxes fixes.

(3) La deuxième étude était expérimentale. Elle a été réalisée par Mazet (1995). C'est une étude sur les structures dendritiques et les macroségrégations qui se développent dans les lingots. Les expertises expérimentales réalisées ont montré l'importance des mouvements des grains sur l'étendue des ségrégations chimiques obtenues.

Mazet a conclu que :

- la composition des cœurs de dendrites colonnaires est supérieure à celle des cristaux équiaxes ;
 - dans la zone équiaxe globulaire, les plus faibles compositions des cœurs des cristaux sont obtenues dans la partie basse du lingot (cône de sédimentation). Ces concentrations augmentent quand on se rapproche de la tête du lingot ;
 - la carte de structures est modifiée en changeant les conditions thermiques de masselottage. Il a été constaté que lorsque la solidification est réalisée sans masselotte, la composition des cœurs des cristaux obtenue dans la partie haute du lingot est inférieure à celle des cristaux issus du pied du lingot, contrairement à la solidification avec masselottage. D'autre part, il a été observé que la ségrégation centrale du lingot sans masselotte est moins importante que celle du lingot coulé avec masselottage ;
- Enfin, la carte de structures et notamment la localisation des zones des grains équiaxes globulaires et dendritiques est différente dans les deux cas (sans masselotte et avec masselotte) ;

(4) Un autre travail de recherche a été réalisé par Appolaire (1999). Il a été consacré à l'étude théorique de l'évolution de la morphologie des cristaux en mouvement dans le bain liquide et à l'étude de l'incidence de la convection sur les ségrégations et sur les différents mécanismes prenant part à la cristallisation.

Les principaux points abordés dans ce travail étaient :

-
- La prise en compte des effets de la convection sur la croissance d'un grain équiaxe.
 - Le développement d'un modèle de groupes de grains.

Appolaire a constaté que lorsque la densité volumique de grains est importante, les grains ont tendance à prendre une morphologie globulaire. Dans le cas contraire, ils ont tendance à prendre une morphologie dendritique.

Il a également développé un modèle à une dimension (**1D**) de chute de grains, couplé à la thermique prenant en compte la croissance et la sédimentation. Ce modèle **1D** permet entre autre de décrire la macroségrégation centrale d'un lingot.

(5) Le dernier travail de recherche est celui de Gerardin (2002) qui a étudié expérimentalement la croissance libre de cristaux équiaxes en mouvement dans le bain liquide. Ce travail a permis d'une part, le suivi tri-dimensionnel d'un cristal sédimentant librement dans un liquide en surfusion et d'autre part, de comprendre les conséquences du mouvement relatif liquide/cristaux sur le développement morphologique des grains en cours de croissance.

Les différents travaux de recherche présentés ci-dessus et rapportés dans la littérature ont contribué à identifier les principaux phénomènes physiques qui contrôlent le développement des zones équiaxe et colonnaire et les hétérogénéités chimiques (ségrégations) présentes dans les lingots d'acier à la fin de la solidification.

Il s'avère que l'étude sur la formation des ségrégations nécessite une recherche approfondie et une bonne connaissance *des causes et des conséquences du mouvement relatif de la phase liquide par rapport à la phase solide, de la formation des structures de solidification, des phénomènes de transfert de chaleur, de masse et de quantité de mouvement et du comportement mécanique dans la zone pâteuse.*

Aujourd'hui, beaucoup de travaux admettent que dans le cas des produits coulés, la formation de la structure équiaxe est essentiellement le résultat d'un détachement de fragments cristallins des structures dendritiques colonnaires ou équiaxes déjà formées ([2], [3], [4], [5],...). Le détachement des fragments cristallins, le transport et le développement des fragments dans le bain liquide sont des sujets d'études importants pour prédire la formation et l'étendue de la zone équiaxe dans la structure finale d'un lingot. C'est également important pour la prédiction de la macroségrégation dans la partie centrale. Il est donc nécessaire de comprendre les phénomènes physiques qui sont à l'origine du détachement de fragments, d'estimer le nombre de fragments détachés au cours du temps et de connaître le comportement des populations de fragments une fois entrées dans le bain liquide.

Pour progresser dans la compréhension de ces différents phénomènes physiques, la thèse intitulée : « **la formation des structures équiaxes : mouvement des grains, croissance-refusion, conséquence sur les macroségrégations** », a été lancée en septembre 2000. Elle s'inscrit dans le cadre d'un projet de recherche français en métallurgie, désigné par le sigle **OSC** (Optimisation des Systèmes de Coulée).

Les principaux objectifs visés par cette thèse étaient les suivants :

- La compréhension de la formation de la zone équiaxe par la fragmentation des structures dendritiques : **origine des fragments cristallins et quantification de ce phénomène.**

Dans cette partie, les travaux de recherches donnés par la littérature nous ont permis d'identifier les principaux **phénomènes physiques** responsables du détachement de fragments des structures dendritiques.

A titre de rappel, les grains équiaxes trouvent leur origine dans la **fragmentation du tissu dendritique** et/ou dans la **germination hétérogène**. Dans notre travail, afin de mieux cerner le phénomène de fragmentation, nous avons supposé que la germination hétérogène ne jouait aucun rôle sur la formation de la zone équiaxe. Cette dernière n'est seulement que le résultat de l'ensemencement du bain liquide par des fragments détachés du tissu dendritique.

- L'estimation des populations de fragments détachés et la description de la croissance/refusion et du transport de ces fragments dans le bain liquide.

Dans cette partie nous avons introduit une loi d'**arrachement** et une loi de **survie** des fragments. Nous avons modélisé **leur transport** dans le bain liquide à l'aide d'un **modèle diphasique**.

- L'implémentation de ce **modèle diphasique** dans le code de calcul **SOLID®**

Le modèle mis au point pour décrire les évolutions des grains équiaxes en mouvement dans le bain liquide, a été étendu et implanté dans le code macroscopique (**SOLID®**). Pour cela, deux étapes ont été ménagées. Dans une première étape, nous avons considéré égales les vitesses intrinsèques des phases solide et liquide. Dans un deuxième temps, nous avons considéré des vitesses différentes pour ces deux phases.

- La validation du modèle.

La dernière étape de cette thèse a été consacrée à la validation de notre modèle d'une part par une étude portant sur un exemple académique et d'autre part, par son application à des lingots industriels.

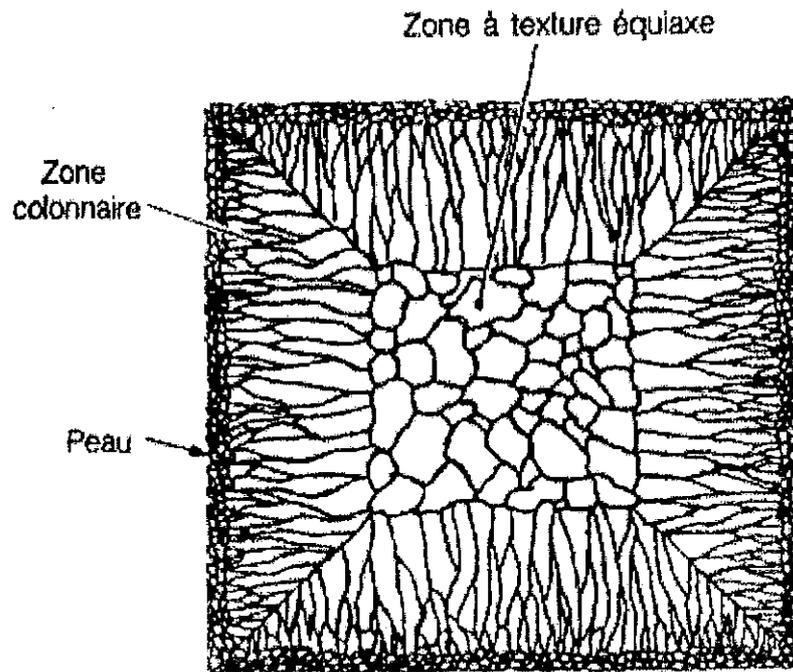


figure 1 : Représentation schématique d'une coupe de lingot montrant les trois zones de cristallisation (Lesoult [1])

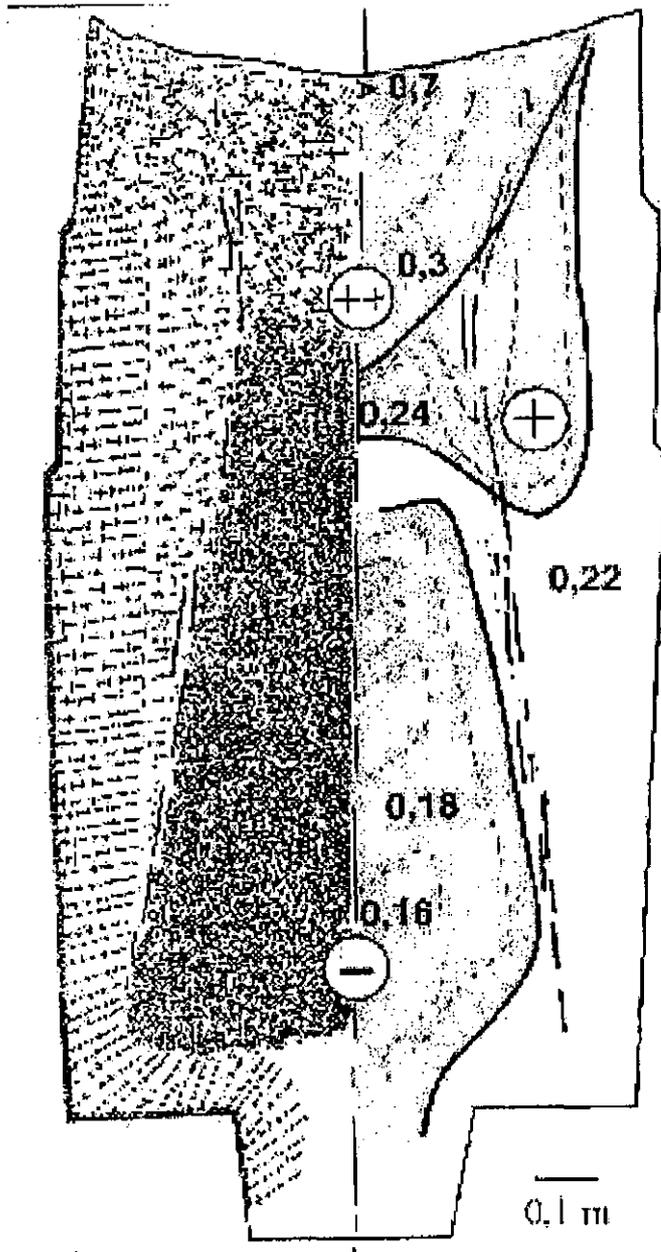


figure 2 : Coupe longitudinale d'un lingot de forge masselotté de 65 tonnes (Mazet [2])

CHAPITRE I
ETUDE BIBLIOGRAPHIQUE

I - ETUDE BIBLIOGRAPHIQUE

I- 1. ORIGINE ET FORMATION DE LA ZONE EQUIAXE :

Dans le cas de la coulée des lingots ou de la coulée continue d'acier, la zone équiaxe formée pendant la solidification peut être constituée de cristaux de tailles et de morphologies différentes (globulaire/dendritique). Ces grains trouvent leur origine dans l'ensemencement du bain liquide par les fragments cristallins détachés des structures dendritiques et/ou dans la germination hétérogène due à l'ajout de matière inoculante. Les fragments ou germes formés se retrouvent ensuite dans des situations de refusion ou de croissance dans le puits liquide, suivant les conditions thermodynamiques et chimiques qui règnent dans ce dernier. Les évolutions subies par ces fragments influenceront en conséquence la formation et l'étendue finale de la zone équiaxe. L'étendue et l'existence même de la zone équiaxe dépendent donc de paramètres physico-chimiques et des conditions opératoires.

I- 2. INFLUENCE DES CONDITIONS OPERATOIRES :

➤ *La surchauffe initiale :*

La surchauffe initiale ou la différence entre la température de coulée et la température de liquidus est un facteur important dans la formation et l'étendue de la zone équiaxe. Des études expérimentales ont montré que plus la surchauffe initiale est grande et plus l'étendue relative de la zone équiaxe est petite. Dans certains cas où la surchauffe initiale est importante, la zone colonnaire occupe tout le produit et la zone équiaxe disparaît complètement. La surchauffe initiale est donc un facteur défavorable à la formation et à l'extension de la zone équiaxe.

➤ *La composition de l'alliage :*

Il est vérifié expérimentalement [3] que la zone équiaxe est plus développée dans un alliage riche en éléments que dans un alliage pauvre en éléments. La composition en éléments d'alliages est un facteur favorable à la formation et l'étendue de la zone équiaxe.

➤ *La convection :*

La convection naturelle ou forcée a pour effet d'augmenter l'échange thermique entre le liquide et la peau solidifiée au niveau du front de solidification [3], [7]. Elle permet l'abaissement de la température et de son gradient dans le liquide et de créer des zones en surfusion devant le front où les cristallites peuvent survivre et croître. La convection naturelle est d'autant plus intense que la hauteur de la paroi le long de laquelle le liquide se refroidit est grande. On conclut que la convection et la hauteur du produit à solidifier sont deux facteurs favorables à la formation de la zone équiaxe et à son étendue.

➤ *Ensemencement de la zone liquide centrale :*

L'ensemencement de la zone liquide par des cristallites susceptibles de se développer dans un bain légèrement surfondu est un facteur qui joue un rôle favorable à la formation (germination hétérogène) et à l'étendue de la zone équiaxe.

I- 3. GERMINATION HETEROGENE :

Le concept de germination est très général. L'idée maîtresse est que la formation d'une phase nouvelle à partir d'une phase initiale s'initie à petite échelle. La phase d'initiation est appelée germination. Entre un germe de solide et son liquide environnant, existe une interface. Une telle interface possède une énergie. Lorsque l'échelle d'un système est grande, le rapport volume/interface est grand et l'énergie d'interface est généralement négligée. Il n'en est pas ainsi pour la germination qui se passe à une échelle très réduite (de l'ordre de la centaine de nanomètre). La variation de l'énergie de Gibbs lors de la formation d'un cristal de volume V et de surface S est donnée par l'équation suivante :

$$\Delta G = -(\Delta h_f - T\Delta s_f)\rho V + \sigma_{interface} S \quad I.1$$

où la température T est considérée constante. ΔG est l'énergie de Gibbs de la transformation. Δh_f est la chaleur latente de fusion massique (positive). Δs_f est l'entropie de fusion massique (positive car le désordre augmente à la fusion). ρ est la masse volumique du métal. V est le volume du germe, $\sigma_{interface}$ est l'énergie d'interface, S la surface du germe.

La germination hétérogène correspond à la germination de la phase solide sur un substrat présent dans le liquide (voir figure I. 1). Dans ce cas, le terme d'interface de l'équation I.1 s'écrit comme suit :

$$\sigma_{interface} S = (\sigma^{LS} S + \pi \rho_r^2 (\sigma^{MS} - \sigma^{ML})) \quad I.2$$

où S est la surface de la calotte et ρ_r le rayon du disque de contact solide/substrat. Les considérations géométriques de la figure fournissent :

$$V = \pi r^3 / 3 (2 - 3 \cos \theta + \cos^3 \theta) = 4 / 3 \pi r^3 f(\theta) \quad I.3$$

$$S = 2\pi r^2 (1 - \cos \theta) \quad I.4$$

$$\rho_r = r \sin \theta \quad I.5$$

où r est le rayon de la calotte sphérique et θ est l'angle de mouillage décrit sur la figure I. 1. Le potentiel de transformation présente un maximum pour le rayon de la calotte égale à :

$$r^* = \frac{2T_f \sigma_{interface}}{\rho_r \Delta h_f \Delta T} \quad I.6$$

T_f : température de fusion (°C)

$\sigma_{interface}$: énergie d'interface (J/m²)

ρ_v : rayon du disque de contact solide/substrat (m)

Δh_f : chaleur latente de fusion massique (J/kg)

ΔT : surfusion (°C)

Δs_f : entropie de fusion massique (J/kg/K)

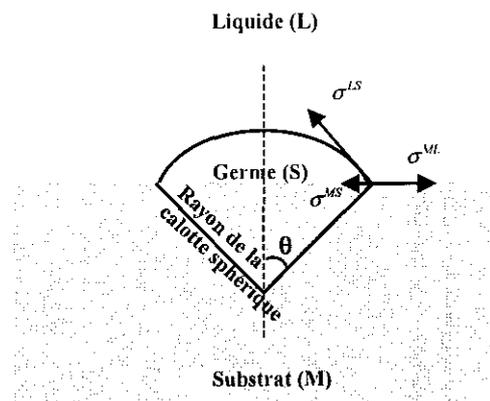


figure I. 1 : germination hétérogène

Dans un procédé de solidification, la germination hétérogène est l'un des mécanismes qui conduit à la formation de la zone équiaxe. Ce phénomène physique de formation de cristallites peut être le résultat de l'ajout volontaire d'agents inoculants emportés par le liquide au cours du remplissage. Ces agents inoculants servent ensuite de catalyseurs dans ce processus de germination de cristallites.

Cependant, ces cristallites ne peuvent apparaître que si le liquide se trouve dans un état surfondu. Cet état est induit par les évolutions thermiques ou solutales.

D'autre part, suivant cette théorie de germination hétérogène, le cristallite présent dans un liquide surfondu n'a la possibilité de croître que si sa taille (donnée par l'équation I.6) est supérieure à une taille critique caractéristique de la surfusion existante.

I - 4. FRAGMENTATION DU TISSU DENDRITIQUE :

Le deuxième mécanisme qui conduit à la formation de la zone équiaxe est l'ensemencement du puits liquide par des fragments cristallins détachés des structures dendritiques. Ce phénomène qu'on appelle ici la **fragmentation**, est le résultat d'un certain nombre de phénomènes physiques qui se produisent dans une opération de solidification.

Dans notre travail de modélisation de la formation de la zone équiaxe, la germination hétérogène n'est pas considérée. En effet, nous avons fait l'hypothèse que la formation de cette zone n'est le résultat que de l'ensemencement du puits liquide par des fragments

arrachés aux structures dendritiques. L'identification et la compréhension de ce phénomène physique appelé la **fragmentation**, a constitué la première étape dans notre travail de recherche.

La recherche bibliographique nous a conduit à identifier et à définir les principaux phénomènes physiques qui provoquent le détachement de bras dendritiques dans une opération de solidification.

I - 5. PHENOMENES PHYSIQUES ET MECANISMES RESPONSABLES DE LA FRAGMENTATION DU TISSU DENDRITIQUE :

Depuis longtemps, plusieurs chercheurs ont entrepris des travaux expérimentaux et théoriques pour comprendre les mécanismes responsables et les phénomènes physiques qui sont à l'origine de la fragmentation du tissu dendritique. La compréhension de ces mécanismes a pour objectif de comprendre l'origine de la formation de la zone équiaxe et d'arriver à quantifier les populations de fragments cristallins qui naissent des structures de solidification.

Les travaux expérimentaux de Jackson et Hunt [8], souvent cités comme référence, ont permis de définir les principaux phénomènes physiques. Ces auteurs ont mis en place des expériences permettant de visualiser le détachement des fragments de la structure dendritique en cours de solidification.

Les trois images présentées sur les figures I. 2 (a, b et c) montrent l'évolution de la structure dendritique d'un alliage à base de cyclohexanol pendant un maintien isotherme de deux fois dix minutes. Ces auteurs ont constaté que des bras secondaires se détachent de la structure dendritique à cause de la refusion de ces derniers au niveau des jonctions bras primaire-bras secondaire. Cette refusion est due au flux de soluté orienté des pointes des bras secondaires vers les jonctions (voir figure I. 3), autrement dit, des rayons de courbure plus grands (courbures plus faibles) vers les rayons de courbure plus faibles (courbures plus fortes). Les rayons de courbure sont plus grands vers les pointes que vers les bases des bras secondaires. Ces derniers ont en effet plus de liberté de croître dans les zones éloignées du tronc primaire, contrairement aux bases où plusieurs voisins poussent en même temps et ralentissent leur croissance. Ces figures montrent l'importance de la **courbure interfaciale** dans la fragmentation du tissu dendritique.

La figure I. 4 montre une structure dendritique d'une zone colonnaire avec des bras secondaires (fragments) qui se détachent pendant la décélération du front colonnaire.

La **décélération** du front colonnaire [8] et [9] conduit à une élévation instantanée de la température des pointes dendritiques et à l'augmentation de la distance entre les bras primaires. Ceci peut provoquer la refusion des branches secondaires à leur base et leur

détachement du tronc primaire. En effet, la vitesse d'avancée du front colonnaire est proportionnelle à la surfusion aux pointes des dendrites, la diminution de cette vitesse réduit la surfusion devant les pointes des dendrites, ce qui peut conduire à la remontée de la composition des pointes et provoque ainsi un flux de matière dirigé vers les jonctions bras primaire-bras secondaire.

La **décélération d'un front colonnaire** est ainsi un autre phénomène qui conduit à la fragmentation du tissu dendritique.

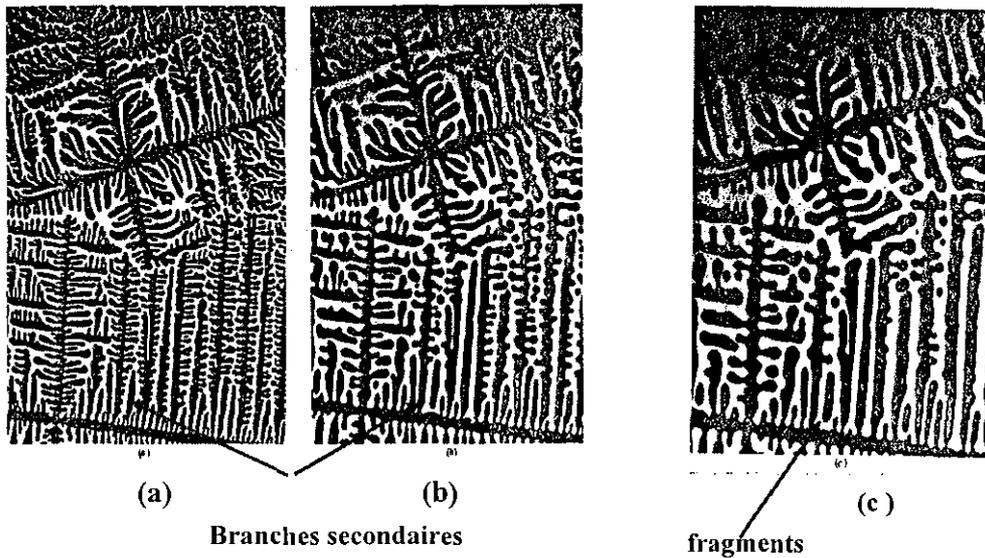


figure 1. 2 : Photographie en fluorescence de la structure dendritique d'un alliage à base du cyclohexanol (Jackson et Hunt [8])

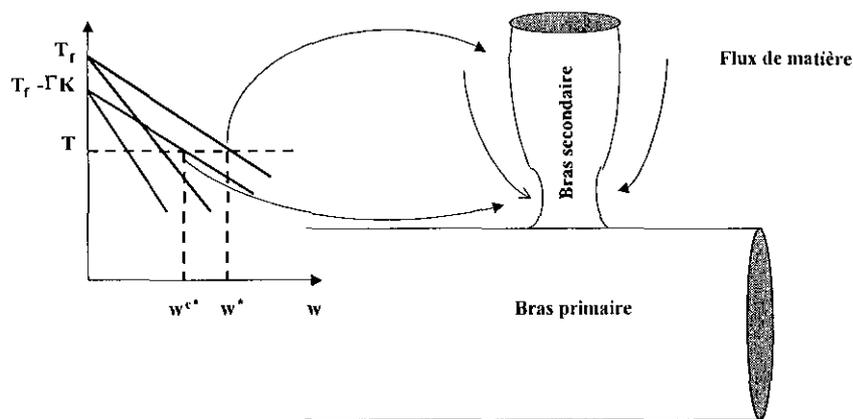


figure 1. 3 : Effets de la courbure interfaciale

avec K : courbure locale ($\frac{1}{R}$)

Γ : coefficient de Gibbs-Thomson défini comme suit :
$$\Gamma = \frac{V_m^s \sigma^{s/l}}{\Delta_s^l S_m}$$

V_m^s : le volume molaire du solide

$\sigma^{s/l}$: la tension interfaciale isotrope

$\Delta_s^l S_m$: l'entropie molaire de fusion du cristal dans le liquide

w^* : titre massique dans la phase liquide à l'interface l/s plane

w^{c^*} : titre massique dans la phase liquide à l'interface l/s dont la forme est caractérisée par une courbure K

Branche secondaire
détachée (fragment)

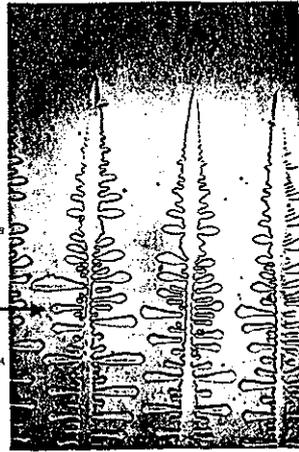


figure I. 4 : Effet de la décélération du front sur la fragmentation du tissu dendritique d'un alliage à base de Tétrabromure de carbone (Jackson et Hunt [8])

La **convection** naturelle ou forcée est une autre cause de formation de fragments cristallins [3], [10] et [11]. Les transports de matière et de chaleur qui en résultent peuvent accélérer la refusion, notamment en apportant du liquide surchauffé et appauvri en éléments d'alliage dans la zone pâteuse et en diminuant l'épaisseur des couches limites. Les principales expériences relatives à la fragmentation mettant en évidence l'effet de la convection, seront présentées en détail plus loin.

Enfin, d'après Pilling et Hellawell [12], la déformation mécanique appliquée à un bras dendritique, même pour des nombres de Reynolds élevés, reste au-dessous du domaine plastique et aucune rupture mécanique ne peut être engendrée par les forces mécaniques induites par le fluide.

En conclusion, les principaux phénomènes physiques qui provoquent la fragmentation de la structure dendritique sont :

1. Les effets de courbures interfaciales
2. La décélération du front colonnaire
3. La convection

I - 5.1. Principaux travaux de la littérature entrepris sur les populations de fragments cristallins :

Après avoir énuméré les principaux phénomènes physiques responsables de la fragmentation des structures dendritiques au cours d'une opération de solidification, nous nous sommes intéressés à certaines expériences rapportées dans la littérature et réalisées dans le but d'étudier l'influence de paramètres opératoires qui jouent un rôle dans le détachement de fragments cristallins, à savoir : la charge en éléments d'alliage, la convection, la surchauffe initiale et la vitesse de solidification.

I - 5.1.1. Alliages métalliques :

G.Lesoult et coll [6], dans une étude théorique consacrée aux effets du brassage électromagnétique sur l'étendue de la zone équiaxe dans une opération de solidification de l'acier en coulée continue, ont donné une estimation de la densité de flux de fragments. Dans cette étude, un modèle qui décrit la croissance et la refusion des cristallites a été développé. Ce modèle prend en compte l'ensemencement du puits liquide, la croissance ou la refusion des grains et le transfert thermique. La densité de flux de fragments a été estimée en identifiant la zone équiaxe calculée par le modèle avec celle mesurée sur une brame d'acier coulée en continu. La taille finale de grains a été estimée à environ **300 μm** . La densité de flux obtenue est d'environ **8.10^4 fragments $\text{m}^{-2} \text{s}^{-1}$** dans la région de brassage électromagnétique en refroidissement secondaire et de **4.10^4 fragments $\text{m}^{-2} \text{s}^{-1}$** près de la paroi de la lingotière. Les vitesses de coulée et de brassage utilisées dans cette étude étaient respectivement de $1,08 \text{ cm s}^{-1}$ et $40. \text{cm s}^{-1}$, et la surchauffe initiale était de 25°C .

Dans une étude sur des alliages métalliques, Moukassi [3] a suivi en continu l'évolution des états morphologiques des structures d'un alliage binaire plomb-antimoine (**Pb-Sb**), solidifié en présence de brassage mécanique.

Les paramètres opératoires ajustables dans ces expériences étaient : la vitesse de brassage, la concentration initiale en élément d'alliage et la surchauffe initiale.

Les objectifs visés dans cette étude étaient :

- L'influence du brassage sur l'ensemencement du bain liquide par les cristallites arrachés du front colonnaire.
- L'influence de la surchauffe ou de la surfusion sur l'évolution des cristallites dans la zone pâteuse.

Le dispositif expérimental utilisé est schématisé sur la figure I. 5. Il est constitué de deux cylindres concentriques, d'un système de trempe et d'un four.

$$\begin{aligned}
 a &= 2R_{ext} = 125\text{mm} & b &= 50\text{mm} \\
 H_{max} &= 370\text{mm} & d &= 2R_{int} = 40\text{mm} \\
 A &= 133\text{mm} & e &= 4\text{mm}
 \end{aligned}$$

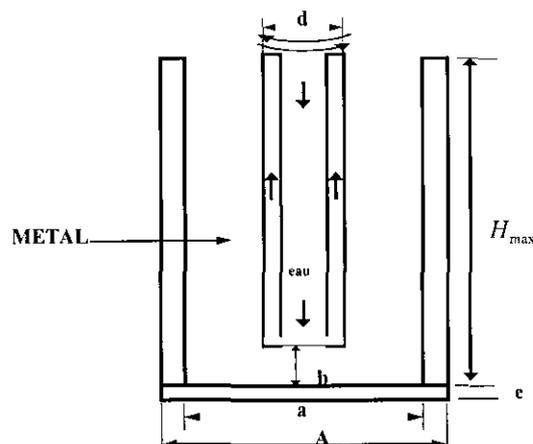


figure I. 5 : Montage expérimental utilisé par (Moukassi [3])

Le cylindre interne en acier inoxydable est entraîné en rotation par un moteur électrique permettant d'atteindre une vitesse maximale de 1200 tr.min^{-1} . A l'intérieur du cylindre circule de l'eau froide. Le cylindre externe fixe constitue le creuset dans lequel le cylindre interne (doigt de refroidissement) est plongé sur une profondeur de 310 mm. Une solidification colonnaire a lieu sur les parois du cylindre interne refroidi. Les fragments se détachent des structures dendritiques de la zone colonnaire et sont transportés par convection dans le puits liquide où ils refondent ou croissent. Des prélèvements périodiques d'échantillons ont été réalisés dans la zone brassée. En supposant que la zone brassée est homogène, les échantillons¹ prélevés permettent de remonter aux grandeurs physiques suivantes :

1. La fraction de solide surfacique de cristallites.
2. La densité surfacique de cristallites.
3. La taille moyenne des cristallites.

La gamme de vitesse étudiée était comprise entre 100 tr.min^{-1} et 600 tr.min^{-1} et les titres massiques nominaux en éléments d'alliages étaient respectivement de 2% et 4% en antimoine (Sb) dans le plomb (Pb).

L'ensemble des résultats expérimentaux obtenus est reporté sur les figures I.6 (a, b et c), figures I.7 (a, b et c), et figures I.8 (a et b). Sur ces figures sont reportées les mesures pour chaque prélèvement à différents instants, de la densité surfacique de cristallites, du rayon moyen des cristallites, de la fraction solide surfacique et de la température du bain.

¹ le prélèvement de la matière (échantillon) est réalisé par un tube en silice de 5 mm de diamètre intérieur et de 10 cm de longueur. Ces tubes sont plongés dans le bain 10 secondes avant chaque prélèvement (mise en température)

I- 5.1.1.1. Résultats expérimentaux de Moukassi et coll :

➤ Cas Pb-2%Sb :

Les résultats expérimentaux obtenus par Moukassi sur l'alliage Pb-2%Sb sont reportés sur les figures I.6 (a), (b) et (c). Ces figures présentent les évolutions au cours du temps de la densité surfacique de cristallites, du rayon moyen du cristallite et de fraction de solide surfacique, pour différentes vitesses de brassage.

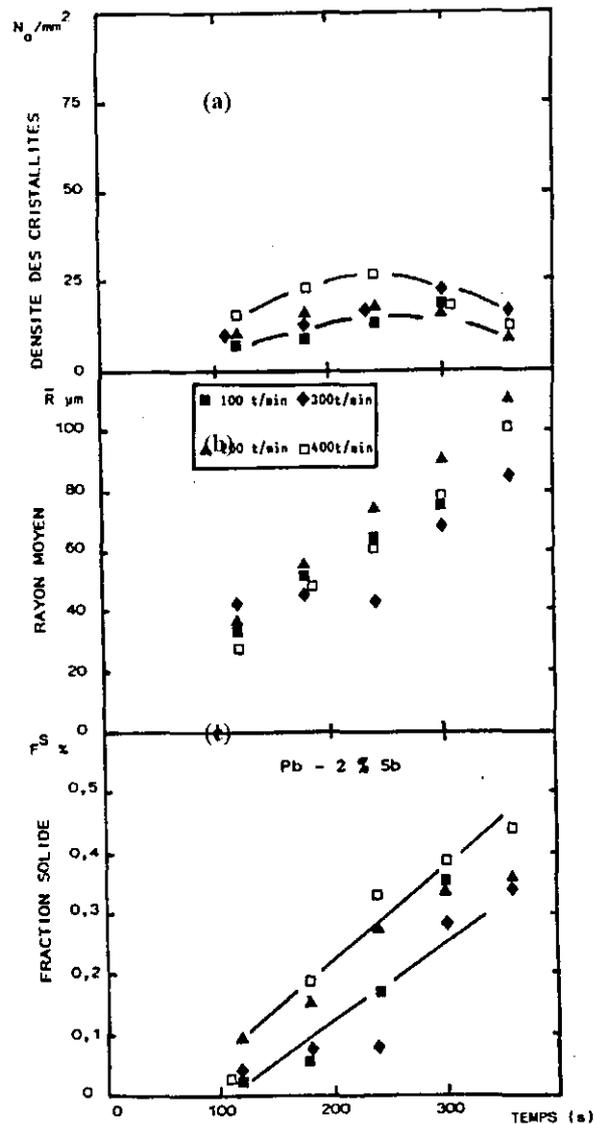


figure I. 6 : Evolution de la densité moyenne surfacique N_o , du rayon moyen R_o et de la fraction solide surfacique F^s en fonction du temps. Effet de la vitesse de rotation du cylindre interne.
Alliage (Pb -2% Sb) [3]

I- 5.1.1.2. Interprétations des résultats et discussions :

Les résultats obtenus montrent que, pour l'expérience réalisée à la vitesse de brassage de 100 tr.min^{-1} , la densité de cristallites croît en continu au cours du temps (voir figure I. 6 (a)). Cet accroissement continu peut être attribué à un détachement continu de fragments. Dans le cas des autres expériences, pour les vitesses de brassage de 200, 300 et 400 tr.min^{-1} , la densité de cristallites évolue au cours du temps suivant deux phases. Dans la première phase, elle est croissante et dans la deuxième phase, elle est décroissante. La phase ascendante correspond au détachement continu de fragments et la phase descendante a été interprétée par Moukassi comme une phase d'agglomération de cristaux.

Une autre observation, qui est déduite de la figure I. 6 (a), concerne l'effet de la vitesse de brassage sur la densité surfacique de cristallites. On constate que l'augmentation de la vitesse de brassage a tendance à augmenter cette densité surfacique, donc à augmenter le nombre de fragments détachés.

La figure I. 6 (b) présente l'évolution au cours du temps du rayon moyen des cristallites pour les quatre expériences. La première observation qui ressort de cette figure concerne la gamme d'évolution de la taille moyenne des cristallites. Elle passe, en 240 secondes, d'environ $20 \mu\text{m}$ à environ $100 \mu\text{m}$. La deuxième observation concerne la croissance des cristallites. On constate que les cristaux croissent suivant une même pente dans les quatre cas.

La figure I. 6 (c) présente l'évolution au cours du temps de la fraction de solide pour les quatre expériences étudiées. La fraction de solide croît continûment au cours du temps. Cependant, à part le cas de l'expérience à 400 tr.min^{-1} où la fraction solide apparaît plus grande, sauf au premier prélèvement, les valeurs des fractions solides pour les autres expériences se chevauchent entre elles.

A partir de ces premiers résultats, on peut conclure qu'une augmentation de la vitesse de brassage conduit à une augmentation de la densité de cristallites détachées mais qu'elle n'influence pas significativement la vitesse de croissance des grains.

➤ *Cas Pb-4%Sb :*

Les résultats expérimentaux obtenus par Moukassi sur l'alliage Pb-4%Sb sont reportés sur les figures I.7 (a), (b) et (c).

Ces figures présentent les évolutions au cours du temps de la densité surfacique de cristallites, du rayon moyen des cristallites et de la fraction solide surfacique, pour les six vitesses de brassage étudiées dans ce cas.

En comparaison au cas précédent, la vitesse de croissance des grains est plus faible mais la densité surfacique de grain évolue plus rapidement. On note également que le phénomène de décroissance de la densité de grains est présent pour toutes les vitesses de brassage.

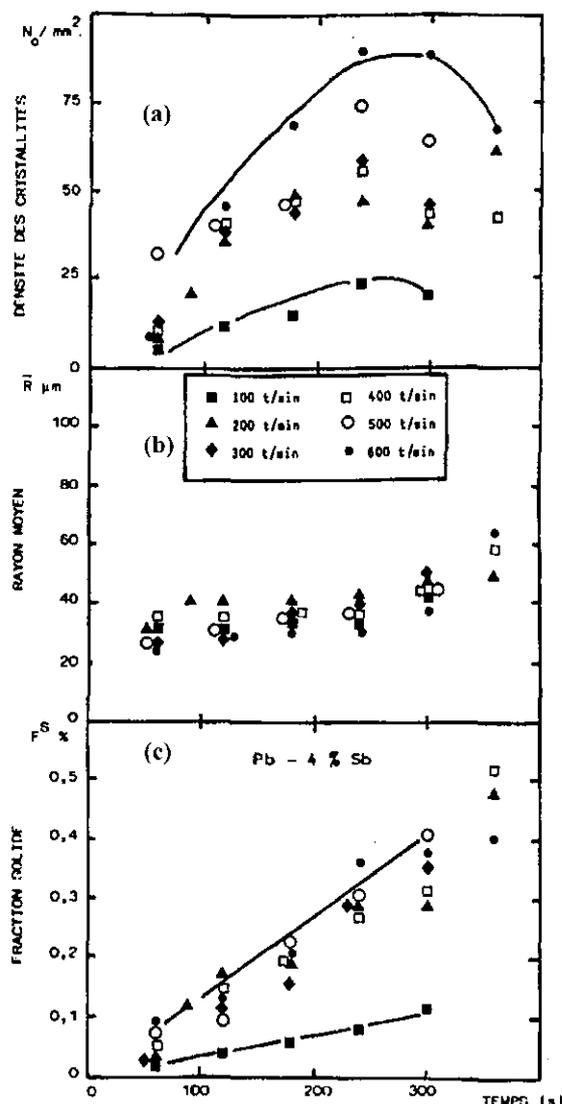


figure I. 7 : Evolution de la densité surfacique moyenne N_0 , du rayon moyen R_0 et de la fraction solide surfacique F^s en fonction du temps. Effet de la vitesse de rotation du cylindre interne. Alliage (Pb - 4%Sb) [3]

I - 5.1.1.3. Interprétations des résultats et discussions :

La figure I. 7 (a), représente l'évolution au cours du temps de la densité surfacique de cristallites mesurée sur les échantillons prélevés, elle évolue au cours du temps suivant deux phases. Dans la première phase, elle est ascendante et dans la deuxième phase, elle est descendante. En plus de ces évolutions déjà observées dans le cas précédent (Pb-2%Sb), l'information apportée par cette figure concerne l'ordre de grandeur de la densité surfacique.

On constate qu'il est plus grand pour la nuance à 4%Sb que pour la nuance à 2%Sb. Donc, plus l'alliage est chargé en éléments et plus on a tendance à détacher de fragments.

La figure I. 7 (b) représente l'évolution au cours du temps du rayon moyen des cristallites pour les six expériences. La première observation qui est déduite de cette figure concerne la gamme d'évolution de la taille moyenne des cristallites. Elle passe, en 300 secondes, d'environ 20 μm à environ 60 μm . Par comparaison au cas précédent (Pb-2%Sb), et pour un même temps d'expérience, la taille d'un cristallite a évolué plus lentement. On constate aussi que les tailles des cristallites ne varient pas beaucoup avec la vitesse de brassage.

La croissance d'un cristallite dépend des conditions thermique et chimique du milieu qui dépendent essentiellement de la vitesse de brassage, de la densité de cristallites et de la concentration.

La figure I. 7 (c) présente l'évolution au cours du temps de la fraction solide pour les six expériences étudiées. La fraction solide croît en continu au cours du temps dans toutes les expériences. On remarque qu'à part pour l'expérience à 100 tr.min⁻¹ où la fraction solide apparaît plus faible, les autres valeurs des fractions solides dans toutes les expériences se chevauchent entre elles. Il est difficile de dégager une tendance.

Sur cette partie, on conclut que :

- Un alliage riche en éléments de soluté conduit à des densités de cristallites plus grandes.
- La vitesse de croissance des cristaux est plus grande dans la nuance Pb-2%Sb que dans la nuance Pb-4%Sb.

Les figures I.8 (a et b) présentent l'évolution en fonction de la température de la fraction de solide surfacique mesurée et de la fraction de solide calculée par les modèles de bras de levier et de Scheil-Gulliver.

On constate que :

- Les fractions solides mesurées sont supérieures aux fractions solides théoriques données par la règle des bras de levier ou par le modèle de Scheil-Gulliver, pour une même température. En particulier, il existe des cristallites dans les régions surchauffées
- La fraction solide augmente lorsqu'on augmente la vitesse de brassage. Cet effet est accentué dans le cas des essais réalisés avec l'alliage le plus riche (Pb-4%Sb).

Les interprétations faites par les auteurs sur ces observations sont les suivantes :

- Le liquide reste longtemps à une température égale ou voisine de la température de liquidus.

- A cette température (T_L), les fragments détachés du front colonnaire induisent un accroissement brutal de la fraction solide
- Les premiers fragments détachés présentent des titres massiques inférieurs à la composition nominale de l'alliage, ceci conduit à des vitesses de refusion plus faibles. Ces résultats peuvent expliquer les décalages observés au niveau des fractions solides mesurées et l'existence des cristallites en zone surchauffée.

On remarque également que les décalages des fractions solides mesurées et calculées sont accentués pour de fortes vitesses de brassage. On peut l'expliquer par la plus forte densité de fragments détachés lorsque l'on augmente la vitesse de brassage.

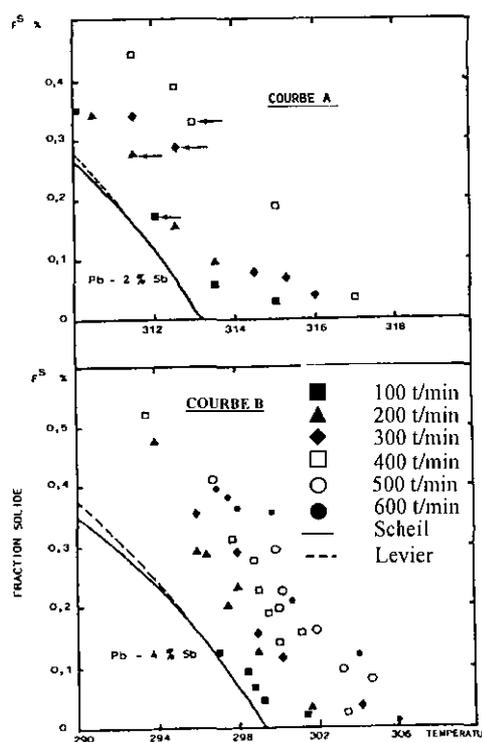


figure 1. 8: Courbes d'évolution de la fraction de solide en fonction de la température [3]

Courbe A : cas de l'alliage Pb-2%Sb

Courbe B : cas de l'alliage Pb-4%Sb

Des mesures de densités surfaciques, de rayons et de fractions solides ont été réalisées par Salvadori [13] pour de l'acier, dans un dispositif similaire à celui utilisé par Moukassi [3], avec un brassage d'une charge d'environ 20 à 25 kg d'acier liquide. Les mêmes conclusions que celles faites par Moukassi ont été tirées. On peut les résumer dans le rôle important de la convection forcée et la charge en éléments d'alliage dans la fragmentation des structures. Dans le cas de ces expériences sur les aciers, la densité de flux de fragments détachés par

unité de surface du front a été estimée à environ de 10^5 à 10^6 fragments $m^{-2}s^{-1}$. Cette valeur est proche de celles estimées par Lesoult [6] dans l'étude présentée précédemment.

I - 5.1.2. Alliages organiques et solutions aqueuses :

Paradies et Glicksman [11] ont réalisé une expérience de solidification d'une solution organique de succinonitrile-acétone en convection forcée (voir figure I. 9), dans une canalisation cylindrique comportant un refroidissement par une circulation d'un fluide froid dans un cylindre coaxial interne. La solution organique suit un mouvement ascendant dans l'espace annulaire. La solidification est obtenue par la circulation à contre-courant d'une solution aqueuse d'éthylène glycol dans le cylindre interne.

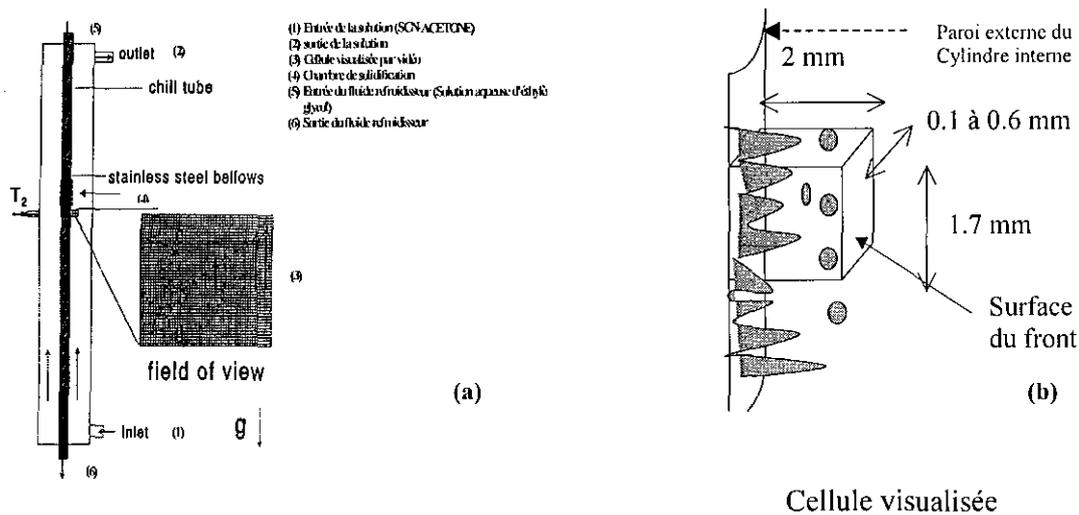


figure I. 9 : Schéma de l'installation (Paradies et Glicksman [11])

Les auteurs ont réalisé ces expériences dans le but de quantifier les effets de la convection, de la concentration et de la vitesse de solidification sur la fragmentation. La gamme de vitesse de circulation du fluide utilisée est comprise entre 1.8 et 11.9 $cm\ s^{-1}$, la vitesse de refroidissement est comprise entre $0,1$ $K\ min^{-1}$ et $0,6$ $K\ min^{-1}$ et les concentrations en éléments d'alliages étudiés sont de 1.3% et 6.1% d'acétone. Les températures de liquidus correspondantes à ces deux concentrations sont respectivement de 58 et de $41^\circ C$.

Le domaine étudié est observé par une caméra vidéo raccordée à la chambre de solidification. Ce domaine représente une cellule de $1,7$ mm de longueur dans la direction axiale de la zone pâteuse, de 2 mm de profondeur et de $0,1$ à $0,6$ mm de largeur (voir figure I. 9 (a) et (b)).

Le nombre de fragments détachés de la structure dendritique est égal à la différence entre le nombre de fragments qui rentrent et qui sortent de la cellule pendant le temps moyen mis par

un fragment pour la traverser. Les résultats sont donnés en terme de nombre de fragments par millimètre de la cellule dans la direction axiale et par seconde.

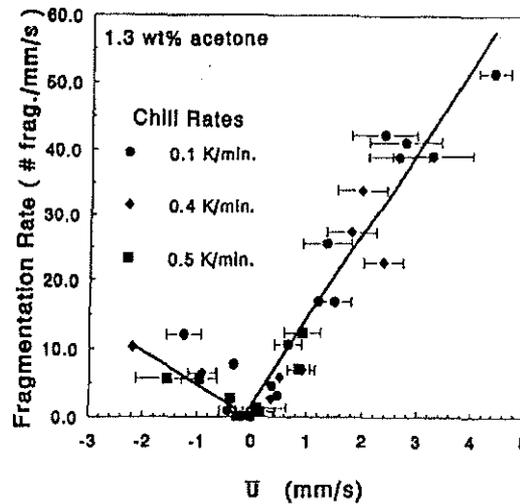


figure I. 10: Evolution de la densité de fragments en fonction de la vitesse estimée du fluide devant le front colonnaire (Paradies et Glicksmann [11])

La figure I. 10 représente la variation de la densité de fragments en fonction de la vitesse relative du fluide pour l'alliage de composition 1.3% en acétone. Sur la première partie de cette figure sont reportées des vitesses négatives (dirigées dans le sens opposé à l'écoulement moyen), elles sont induites par de la convection mixte liée à la solidification et au rejet de soluté. Dans cette zone, les particules suivent un mouvement descendant à l'inverse du mouvement ascendant du fluide. Lorsque la solidification progresse et que la zone pâteuse s'épaissit, ce phénomène devient négligeable et les particules suivent le mouvement du fluide. Sur cette figure, on constate que le nombre de fragments augmente avec la vitesse du fluide. On observe également que le nombre de fragments détachés passe par zéro lorsque la vitesse du fluide est nulle.

La figure I. 11 représente l'évolution de la densité de fragments en fonction de la vitesse du fluide, pour les deux concentrations étudiées. On constate que pour les vitesses inférieures à $1 \text{ mm}\cdot\text{s}^{-1}$, les deux densités de fragments obtenues sont du même ordre de grandeur. Au-delà de cette valeur, la densité de fragments est beaucoup plus faible pour les solutions riches en élément d'alliage. Ce résultat est à l'opposé d'autres résultats publiés dans la littérature [3] et [14]. Nous n'avons pas d'explication sur cette différence.

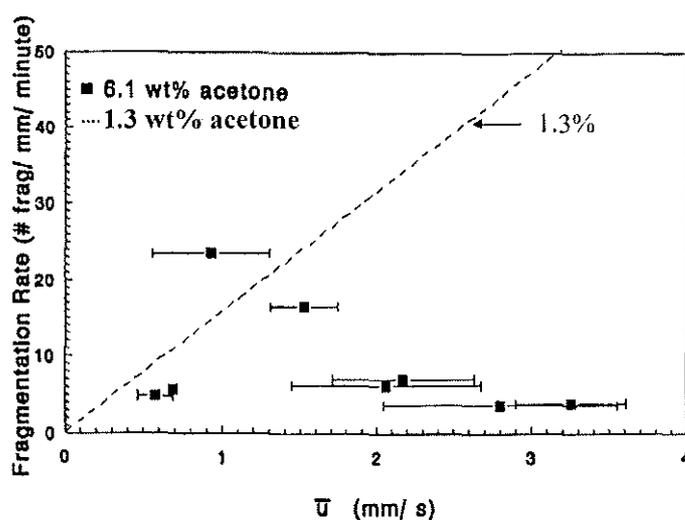


figure I. 11 : Evolution de la densité de fragments en fonction de la vitesse du fluide (Paradies et Glicksmann [11])

Hansen et Hellawell [9] ont étudié la solidification d'une solution aqueuse de chlorure d'ammonium ($\text{NH}_4\text{Cl-H}_2\text{O}$), dans une cellule rectangulaire. La solidification est dirigée grâce à un refroidissement appliqué sur la paroi inférieure de la cavité (voir figure I. 12).

En se basant sur les travaux de Jackson et Hunt [2] et sur des expériences de solidification de la solution aqueuse ($\text{NH}_4\text{Cl-H}_2\text{O}$) qu'ils ont réalisées, les auteurs ont estimé que la structure dendritique est capable de générer une densité volumique de 10^{12} germes m^{-3} ou une densité de fragments d'environ 10^7 fragments m^{-2} de front colonnaire s^{-1} , pour une vitesse de croissance des pointes dendritiques (front colonnaire) de 10^{-3} cm s^{-1} .

Dans le cas expérimental étudié ici (voir figure I. 12) et compte tenu de la configuration verticale utilisée où les mouvements de convection n'ont pas une grande portée, le nombre de fragments qui est transporté dans le puits liquide a été estimé à environ 10^5 particules $\text{m}^{-2} \text{s}^{-1}$. La taille moyenne des fragments arrachés a été estimée entre 10 et 40 μm et leur survie dans le puits liquide dans des conditions thermiques de forte surchauffe ne dépasse pas les 10 secondes. Ce temps de survie est obtenu par le modèle présenté ci-dessous :

Les auteurs ont écrit un modèle pour exprimer le nombre de fragments qui survivent au cours du temps, en tenant compte de la refusion et de la densité de fragments transportés par convection.

Le modèle est constitué des équations (a) et (b) :

$$\begin{cases} \frac{dN_t}{dt} = \dot{N} - N_t \Phi & \text{(a)} \\ N_t = \left(\frac{\dot{N}}{\Phi} (1 - \exp(-\Phi t)) \right) & \text{(b)} \end{cases}$$

avec :

\dot{N} : densité de fragments amenés
dans le puits liquide par convection

Φ : fréquence de survie en s^{-1} .

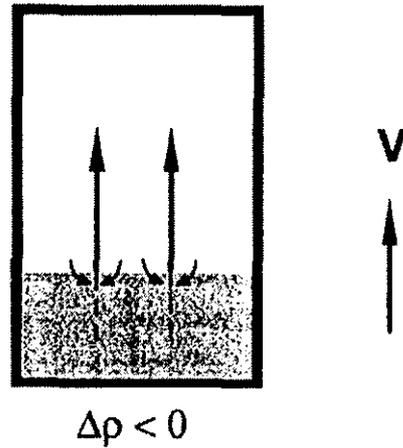


figure I. 12 : Cellule de solidification (Hansen [9])

A l'inverse de Hansen [9], Gao et Wang [15] ont réalisé une expérience avec une solidification de la solution aqueuse ($\text{NH}_4\text{Cl}-\text{H}_2\text{O}$) partant depuis la paroi supérieure de la cellule (voir figure I. 13). Ces auteurs ont constaté que l'ensemencement du bain liquide est le résultat d'un fort mouvement convectif au début de la solidification. Les particules solides détachées du front colonnaire, chutent en direction du bain liquide et suivent un mouvement non rectiligne. Ces auteurs ont estimé la taille initiale d'un fragment cristallin à environ 20 μm et ils ont constaté qu'une élévation de la concentration engendrait des densités de fragments plus importantes.

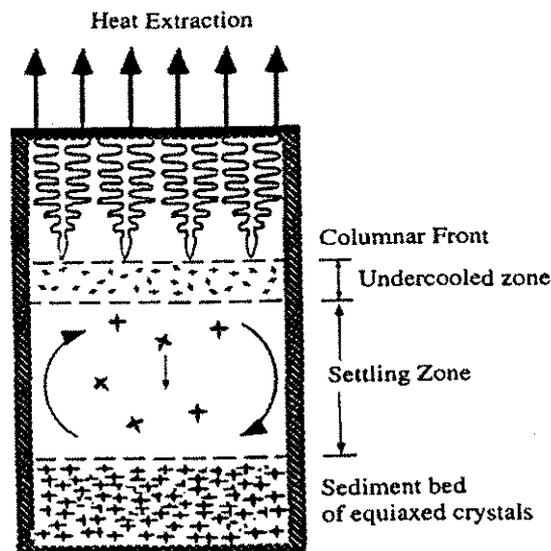


figure I. 13 : Cellule de solidification (Gao et Wang [15])

Sato et Kurz [14] ont créé des situations de refusion et de croissance, dans une étude expérimentale sur le détachement des branches dendritiques.

L'alliage étudié est le SCN-Camphre. Ces auteurs ont caractérisé la densité de fragments par le rapport entre le nombre de bras secondaires détachés et le nombre maximal de bras secondaires qu'un bras primaire peut contenir. Le dispositif expérimental est schématisé sur la figure I. 14. Il est constitué d'une cellule mobile (bande mince), d'une résistance fixe et d'un microscope.

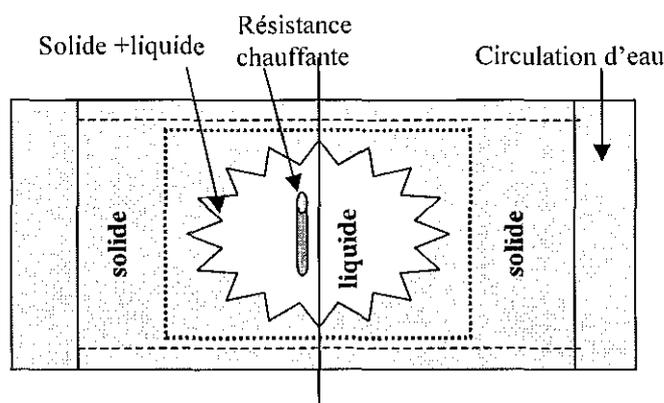


figure I. 14 : Dispositif expérimental (Sato et Kurz [14])

Les parois externes de la cellule sont refroidies par une circulation externe d'eau froide qui assure la solidification. La refusion est induite par une résistance chauffante. La visualisation et le comptage sont assurés par un microscope. Ce dernier permet la visualisation de la refusion des bras secondaires le long des bras primaires.

Les auteurs ont quantifié le nombre de bras secondaires qui se détachaient suivant leurs positions sur le tronc primaire à différents instants en fonction de la vitesse de refusion, de la vitesse de croissance et du gradient thermique (voir figure I. 15).

Les résultats obtenus montrent que le nombre de branches détachées varie d'une position à une autre sur le bras primaire. Il se trouve que le détachement de fragments est plus important dans les zones 1 à 6 loin de la pointe du bras primaire qu'au voisinage de cette dernière (zones 7 à 9). En effet, il est possible que les branches qui se trouvent au voisinage des pointes croissent lentement et présentent des conditions d'interfaces moins favorables à la refusion.

La figure I. 16 regroupe les différents résultats de vitesses de refusion étudiées dans cette expérience, pour une vitesse de croissance donnée et fixée à $31\mu\text{m/s}$ dans leur étude. On constate qu'il y a moins de branches dendritiques détachées dans le cas où la vitesse de refusion est la plus élevée ($31\mu\text{m/s}$).

Pour les faibles vitesses de refusion ($3.4\mu\text{m/s}$), l'évolution de la densité des dendrites détachées est différente suivant leurs positions sur le bras primaire. Cette constatation est due selon les auteurs, à une disparition rapide des branches détachées dans les zones 6 à 1 avant leur comptage.

Enfin, une vitesse de refusion intermédiaire de $11\mu\text{m/s}$ est la plus favorable au détachement de branches dendritiques, pour la vitesse de croissance étudiée.

Les auteurs ont montré que pour une vitesse de refusion imposée, le nombre de branches dendritiques détachées augmente en fonction de la vitesse de croissance.

Enfin, ils ont constaté que le nombre de branches détachées d'un bras primaire augmente avec la concentration. Ceci, confirme encore une fois que plus la concentration en éléments d'alliage est élevée et plus la densité de fragments formée est importante.

Les principaux résultats de cette étude sont :

Il existe sur les bras primaires des zones préférentielles propices au détachement de bras secondaires.

La vitesse de solidification est un paramètre influant sur la densité de bras détachés.

L'augmentation de la teneur en élément d'alliage conduit à des structures dendritiques plus ramifiées avec des branches de tailles plus faibles ; la densité de fragments détachés est alors plus forte.

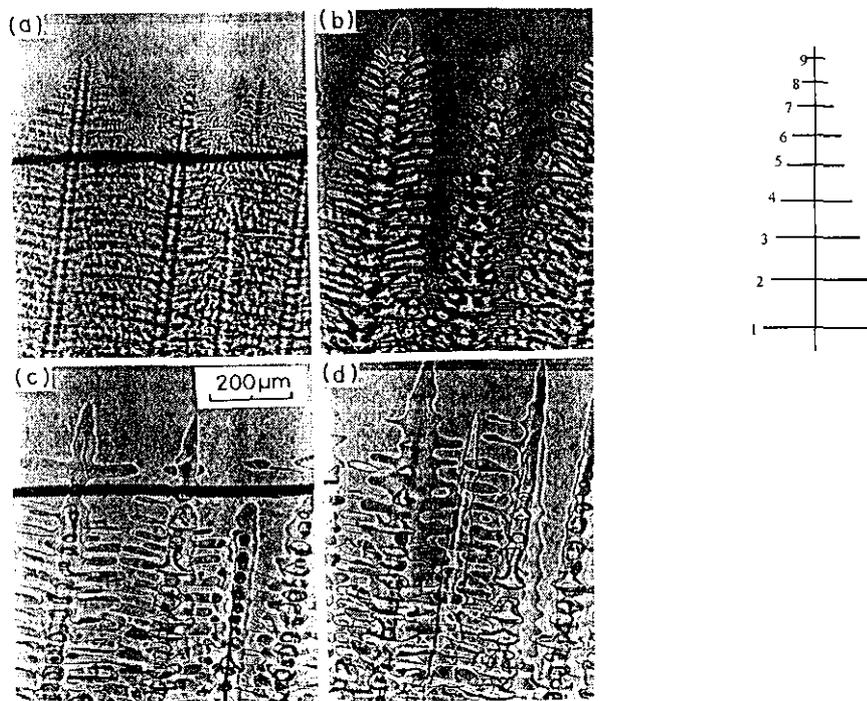


figure I. 15 : croissance et refusion des dendrites, la vitesse de croissance est de $31\mu\text{m/s}$, la vitesse de refusion est $11\mu\text{m/s}$ le gradient thermique est $G=2430\text{K/m}$ (en refusion)
(Sato et Kurz [14])

- (a) : Croissance des dendrites dans la zone 6 (bande noire).
 Bande noire : ombre du thermocouple
- (b) : Dendrites atteignant la position 9, juste avant la refusion.
- (c) et (d) : Refusion et détachement des dendrites dans les zones 6 et 7
- Les temps correspondants à (a) sont approximativement de 87s à 323s. Ceux qui correspondent à (c) et (d) sont respectivement 541s et 637s

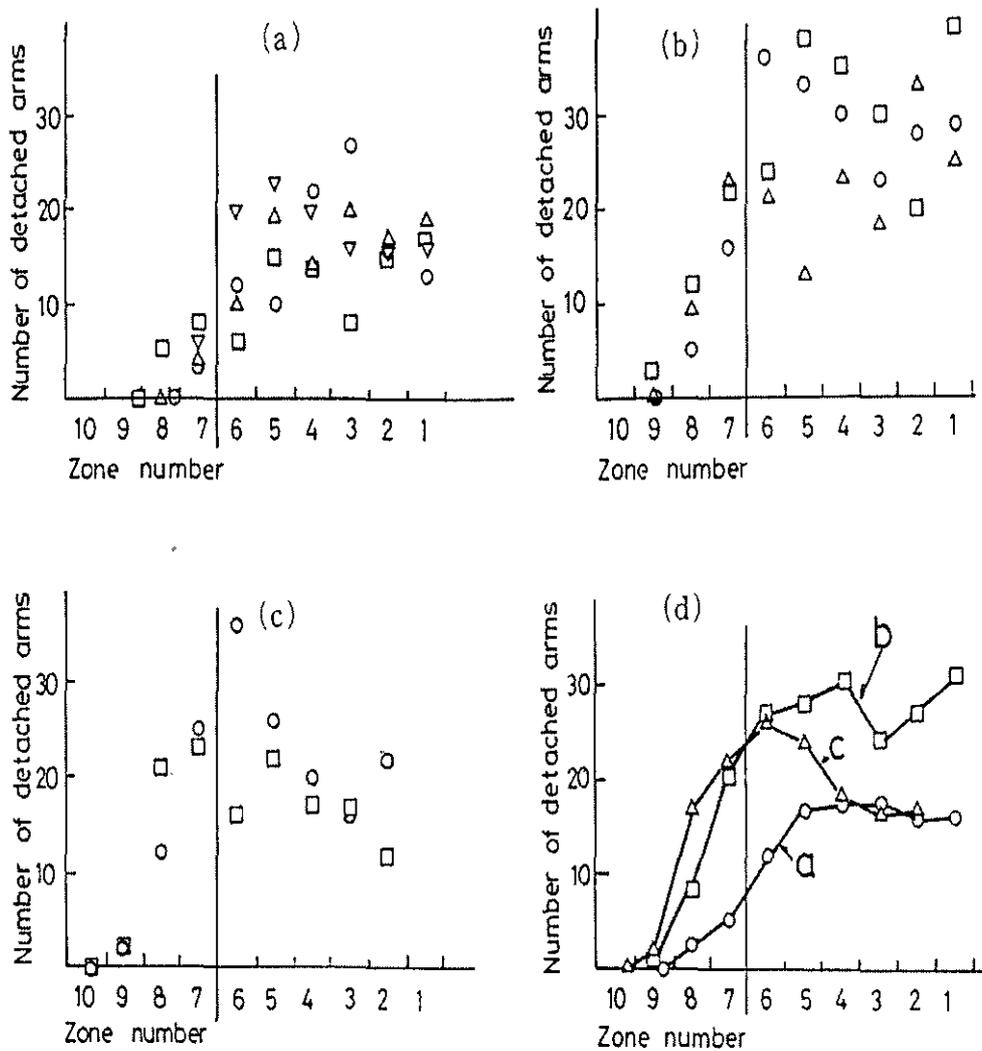


figure I. 16 : Le nombre de branches détachées pour une concentration de 4.7% de camphre, quand la vitesse de croissance est de $31\mu\text{m/s}$ et les vitesses de refusion sont respectivement :
 (a) $31\mu\text{m/s}$, (b) $11\mu\text{m/s}$ et (c) $3.4\mu\text{m/s}$. (d) : Courbes des valeurs moyennes.
 (Sato et Kurz [14])

Esaka et coll. [7] ont estimé la densité de grains équiaxes issue de la fragmentation, dans une expérience en convection forcée sur du Succinonitrile (SCN) à 98 % de pureté et 2% d'impureté. Le dispositif expérimental, d'un volume de 0,5 litre, est schématisé sur la figure I. 17. Il est constitué d'un creuset et d'un doigt brasseur. Un refroidissement par une circulation d'eau froide est appliqué sur les parois internes du creuset, de telle sorte qu'une solidification

colonnaire démarre sur ces parois. La gamme de vitesse de brassage étudiée est comprise entre 0 et 0.47 m.s^{-1} . La taille et la densité de grains ont été mesurées à l'aide d'une fibre optique immergée dans le bain liquide.

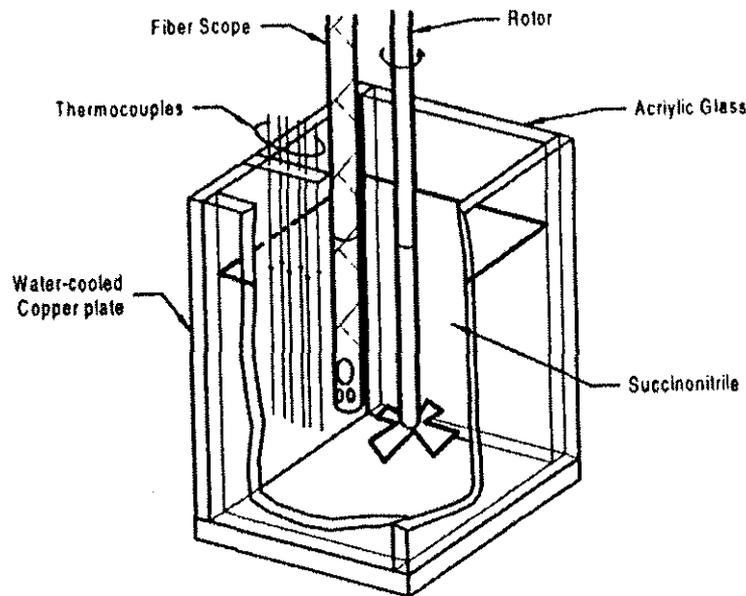


figure I. 17 : Dispositif expérimental (Esaka [7])

La figure I. 18 (a) présente le nombre de grains équiaxes mesuré en fonction du temps. Le temps initial correspond à l'apparition des premiers grains équiaxes. On constate que la densité des grains équiaxes augmente en fonction du temps. Ceci confirme une fois de plus le rôle important de la convection dans la fragmentation. L'évolution du diamètre moyen des grains au cours du temps est représentée sur la figure I. 18 (b). Les auteurs remarquent que les grains croissent régulièrement en fonction du temps et que, pour les faibles vitesses de brassage, de fortes fluctuations du diamètre moyen sont observées. Ils les ont attribuées au mouvement de grains de fort diamètre présent lors des essais à faible vitesse de brassage.

A partir des résultats obtenus dans cette étude expérimentale, les auteurs ont modélisé l'évolution de la densité volumique de grains par une loi de la forme :

$$N_e = K_1 * t^{2.5}$$

: nombre de grains par unité de volume

t : temps courant

K_1 : constante dépendante de la vitesse tangentielle du fluide, comme le montre la figure I. 19.

La loi d'évolution en puissance de la densité de grains équiaxes en fonction du temps, présentée ci-dessus, peut s'expliquer par les phénomènes de refusion et de fragmentation des grains équiaxes qui se produisent pendant la solidification et multiplient ainsi la quantité de grains dans le puits liquide.

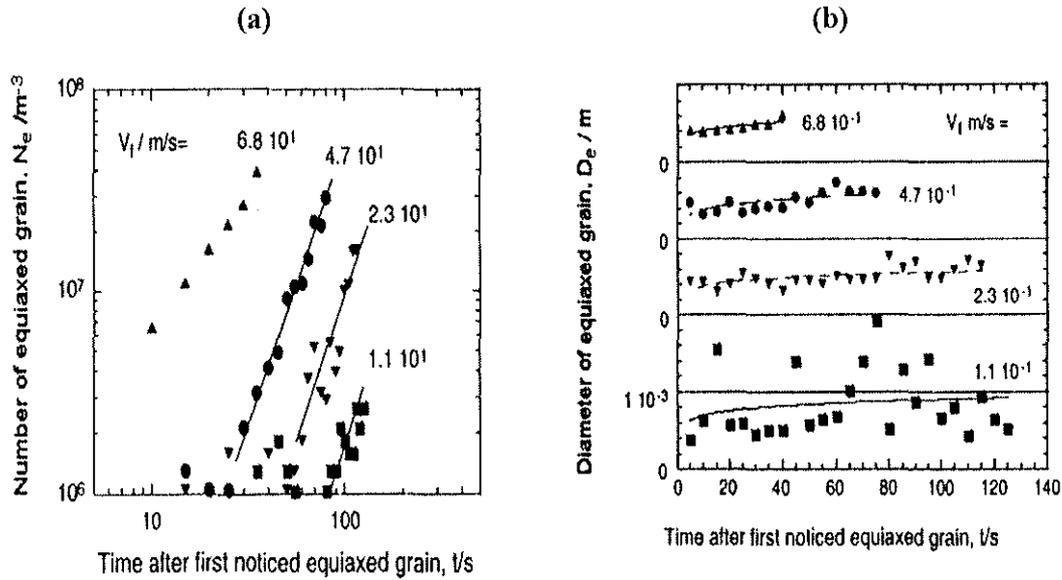


figure I. 18 : Variation de la densité et du diamètre moyen des grains équiaxes au cours du temps en fonction de l'intensité du brassage. (Esaka [7])

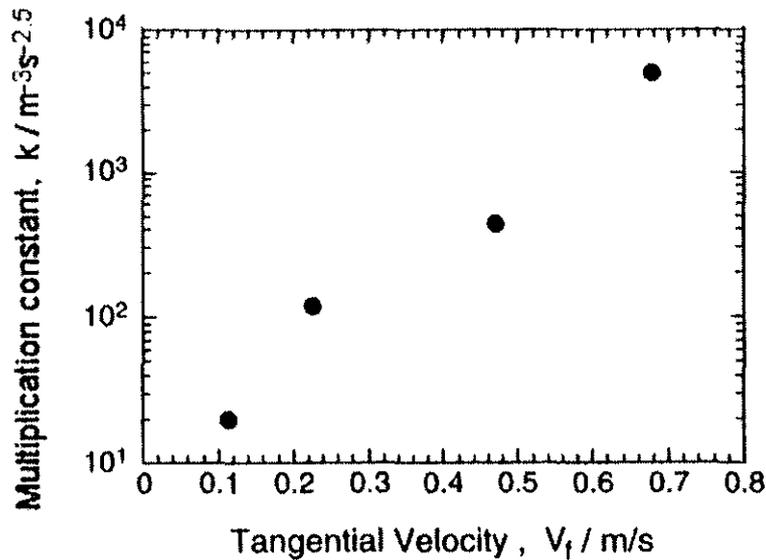


figure I. 19 : variation du coefficient de corrélation en fonction de la vitesse du liquide (Esaka [7])

I - 5.2. Conclusion :

Les différentes études expérimentales présentées dans cette partie montrent que les principaux phénomènes physiques responsables de la fragmentation du tissu dendritique sont : les effets de courbure interfaciale, la décélération du front colonnaire et la convection. Quelques tendances ont pu être dégagées concernant les éléments favorisant la formation de fragments cristallins:

- Plus l'alliage est riche en éléments d'alliage et plus on a tendance à détacher des fragments (hormis les résultats de Paradies [11]).
- L'augmentation de la vitesse du fluide (convection) favorise la fragmentation du tissu dendritique.

En partant toujours de l'hypothèse que la germination hétérogène est négligeable, les différentes étapes de la formation d'une structure équiaxe à partir de fragments générés par un tissu dendritique, peuvent être résumées comme suit :

1. La structure dendritique colonnaire est capable de générer une grande quantité de bras dendritiques. Une certaine densité de fragments (dendrites) se détachent sous les effets de courbure interfaciale, de la décélération du front colonnaire et de la convection.
2. Les fragments détachés sont transportés dans le bain liquide.
3. Certains fragments survivent et d'autres refondent. Ceci, dépendra des conditions thermiques et physico-chimiques du bain liquide, de la taille des grains et de la densité de flux de fragments détachés.
4. Les fragments qui survivent, croissent et sédimentent.

Les différents travaux de recherches présentés dans cette partie ont montré qu'il était possible de caractériser le nombre de fragments détachés par une **densité de flux de fragments** définie par un **nombre** de fragments par **unité de surface** du front colonnaire et **unité de temps**.

Enfin, des ordres de grandeur approximatifs de la densité de flux de fragments rapportés par la littérature sont présentés dans le Tableau I.1 et présentés sur la figure I.20. Cependant, peu de données quantitatives sur cette grandeur sont connues, surtout dans le cas des alliages métalliques. C'est pourquoi, nous avons effectué une détermination de cette densité de flux à partir des expériences de Moukassi [3]. Les résultats de cette étude sont présentés dans le chapitre III.

La figure I.21 regroupe les valeurs des rayons moyens des fragments cristallins rapportées dans la littérature. On note une dispersion entre les valeurs de cette grandeur. Malgré cette dispersion, ces valeurs permettent de fixer une fourchette pour cette grandeur qui est un paramètre important dans la modélisation que nous mettons en place visant à décrire la formation du cône de sédimentation.

AUTEURS	Type d'expérience	Vitesse $m.s^{-1}$	Alliage : Composition chimique	Taille moyenne des grains Rayon (μm)	Densité Volumique $N_v [grains.m^{-3}]$	Densité de flux de fragments $\dot{n}_s [frag.m^{-2}.s^{-1}]$	Observations
G.Lesoult, P.Neu and J.P.Birat [6] (1982)	CC acier	0,01 à 0,4	Acier	≈ 150		4.10^4 à 8.10^4	Estimation de la densité de flux de cristaux à partir de la mesure de la taille des grains dans le produit solide (Modèle)
Moukassi [3] (1988)	Brassage circulaire mécanique	0,2 à 0,8 0,2 à 1	Pb-2%mass Sb Pb-4%mass Sb	40 à 60 20 à 40		4.10^6 $2,5.10^7$	Suivi de nombre de cristaux ,de la taille de cristaux, de la fraction solide, de la température en fonction du temps en cours de solidification (Modèle)
Salvadori [13] (1990)	Brassage circulaire mécanique	0,56 0,56 1,3 1,3	Acier 0,8 % mass C 0,35 %mass C 0,8 %mass C 0,35 %mass C	100 à 150 100 à 150 100 à 150 100 à 150			Suivi de nombre de cristaux ,de la taille de cristaux, de la fraction solide, de la température en fonction du temps en cours de solidification (Modèle)

Paradies et coll [10] et [11] (1992) (1997)	<i>Ecoulement axial dans un tube axisymétrique</i>	10^{-3} à 5.10^{-3}	Succinonitrile (SCN) - Acétone 1,3% } Acétone 6,1% }	20 à 40		10^6 à 6.10^6	Mesure du nombre de fragments arrachés en fonction de la vitesse du fluide (expérience)
Hansen et coll [9] (1996)	<i>solidification dirigée la verticale avec inversion de la densité volumique du liquide</i>		NH_4Cl-H_2O	20 à 40		$\geq 10^5$	Estimation du nombre de fragments transportés dans le puits liquide (modèle)
Sato [14] (1987)	<i>Observation sous microscope dans une cellule mince horizontale</i>	0	SCN-camphre				Observation de la refusion et du détachement de bras dendritique individuels (expérience)
Gao et Wang [15] (1999)	<i>Solidification dirigée verticale avec chute gravitaire de cristaux</i>	stokes	NH_4Cl-H_2O	$\approx 20 \mu m$			Observation de la trace indiquant le parcours suivi par de grain durant sa chute
Esaka [7] (2000)	<i>Brassage circulaire mécanique</i>	0 à $0,5 m.s^{-1}$	SCN à 98% pureté	≥ 100	10^6 à 10^8 grains équiaxes/ m^3		Nombre de grains, taille de grains en fonction du temps (modèle et expérience)

Tableau I.1 : Tableau récapitulatif des principaux résultats rapportés dans la littérature

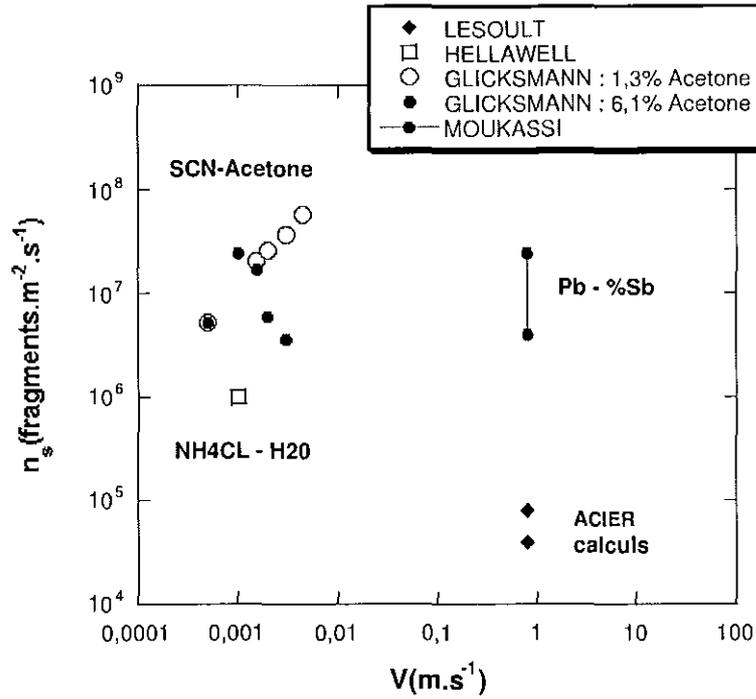


figure I. 20 : graphe récapitulatif des principales estimations rapportées dans la littérature sur la densité de flux de fragments cristallins

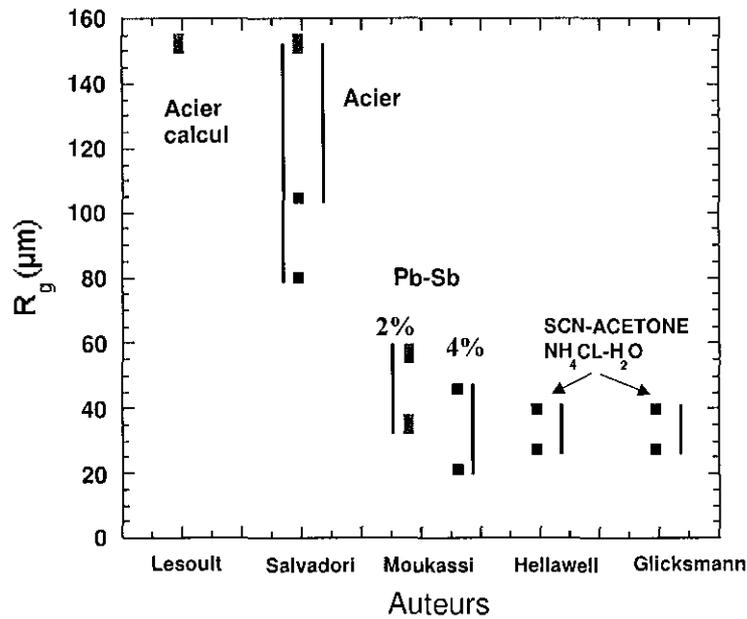


figure I. 21 : graphe récapitulatif des principaux résultats rapportés dans la littérature sur la taille des fragments cristallins

CHAPITRE II

**PRESENTATION DU MODELE
DIPHASIQUE**

II - PRESENTATION DU MODELE DIPHASIQUE

II - 1. INTRODUCTION :

Durant une opération de solidification, les fragments cristallins détachés des structures dendritiques par la fragmentation, sont transportés par les mouvements de convection dans le puits liquide au sein duquel ils croissent ou refondent. La description des évolutions de ces derniers dans la zone pâteuse, fait appel aux phénomènes de transferts couplés de chaleur, de soluté et de quantité de mouvement, associés à la thermodynamique. Les différentes équations de conservation à mettre en place doivent décrire la formation de la zone équiaxe comprenant son origine (détachement de fragments), le transport et le développement (croissance/refusion) des grains.

Ainsi, la modélisation d'une opération de solidification avec la prise en compte du mouvement et de la croissance des grains équiaux nécessite un couplage entre deux échelles : microscopique et macroscopique.

II - 2. BIBLIOGRAPHIE SUR LES MODELES DIPHASIQUES :

La recherche bibliographique entreprise sur les travaux de modélisation des milieux diphasiques a révélé que deux approches numériques sont utilisées pour décrire la mécanique des milieux continus et la complexité géométrique de la zone pâteuse. La première est basée sur la théorie des mélanges. Cette approche assimile un milieu diphasique (mélange du liquide et du solide) à un milieu monophasique ou à une seule phase pseudo-fluide. Elle est utilisée entre autre par le groupe de recherche d'Incropera [16-20]. La deuxième approche est basée sur la théorie de prise de moyenne. Cette dernière méthode fait la distinction entre les phases liquide et solide en les traitant séparément et en tenant compte des interconnexions entre ces dernières. Suivant cette approche, avec la définition d'un volume élémentaire représentatif (V.E.R) (voir figure II. 1), la zone équiaxe est décrite comme un milieu continu fictif équivalent. A l'échelle du volume élémentaire représentatif, les phénomènes sont décrits en moyenne par des lois de conservation, établies par une procédure de prise de moyennes des équations de conservation à l'échelle microscopique. L'intérêt de cette méthode réside dans le fait qu'elle permet de s'abstraire des problèmes d'interfaces entre le puits liquide et la zone pâteuse et entre la zone pâteuse et le solide. De plus, c'est une approche qui permet de décrire les mouvements des deux phases, ainsi que les transferts thermiques et solutaux.

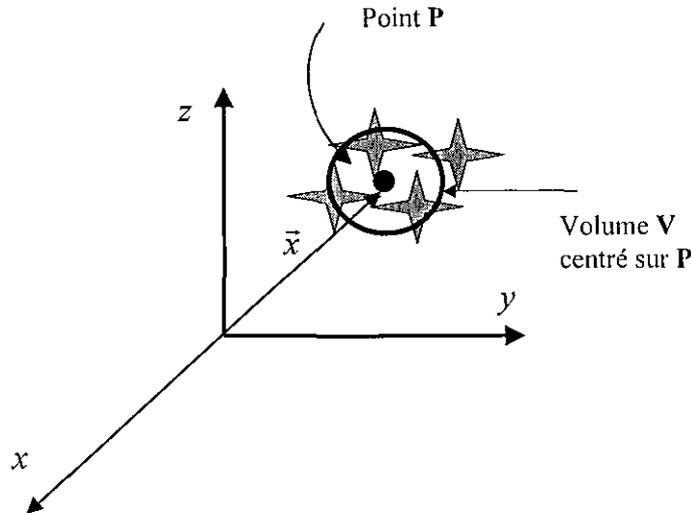


figure II. 1 : volume utilisé pour faire des prises de moyennes d'une grandeur définie à l'échelle microscopique

II - 2.1. Présentation de la méthode de prise de moyenne :

Avant de présenter la méthode de prise de moyenne et son application à une équation aux dérivées partielles, voici quelques rappels sur les grandeurs moyennées dans la zone pâteuse.

II - 2.1.1. Définition des diverses moyennes :

Soit une grandeur physique Ψ définie sur la phase α , sa moyenne $\langle \Psi^\alpha \rangle$ sur un volume élémentaire représentatif (V.E.R) est calculée suivant l'intégration :

$$\langle \Psi^\alpha \rangle = \frac{1}{V_0} \int_{V_0} \Psi^\alpha \gamma^\alpha dV \tag{II. 1}$$

avec: V_0 : le volume élémentaire représentatif (V.E.R)

et γ^α fonction de phase définie comme suit :

$$\begin{cases} \gamma^\alpha = 1 & \text{dans la phase } \alpha \\ \gamma^\alpha = 0 & \text{en dehors de la phase } \alpha \end{cases}$$

La moyenne $\langle \Psi^\alpha \rangle$ ne correspond pas à la valeur usuelle de la moyenne, on définit également une moyenne dite moyenne intrinsèque de phase, notée $\langle \Psi^\alpha \rangle^\alpha$:

$$\langle \Psi^\alpha \rangle^\alpha = \frac{1}{V^\alpha} \int_{V^\alpha} \Psi^\alpha dV \tag{II. 2}$$

V^α : volume occupé par la phase α à l'intérieur du volume V_0

$$V^\alpha = \int_{V_0} \gamma^\alpha dV \tag{II. 3}$$

La relation entre la moyenne de phase et la moyenne intrinsèque est exprimée à travers la fraction volumique de la phase α :

$$\langle \psi^\alpha \rangle = g^\alpha \langle \psi^\alpha \rangle^\alpha \text{ avec } g^\alpha = \frac{V^\alpha}{V_0} \quad \text{II. 4}$$

Moyenne intrinsèque à l'interface :

$$\langle \Psi^\alpha \rangle^* = \frac{1}{A^*} \int_{A^*} \psi^\alpha dA \quad \text{II. 5}$$

Du fait que les valeurs de $\langle \psi^\alpha \rangle$ varient localement d'un point à un autre de la phase α dans le V.E.R, nous noterons comme suit la déviation de $\langle \psi^\alpha \rangle$ par rapport à la moyenne intrinsèque de phase :

$$\psi^\alpha = \Psi^\alpha - \langle \psi^\alpha \rangle^\alpha \quad \text{II. 6}$$

II - 2.1.2. Relation entre grandeurs macroscopiques et microscopiques :

Les lois qui régissent les phénomènes à l'échelle microscopique dans les phases liquide et solide sont généralement décrites mathématiquement par des équations aux dérivées partielles. Lorsque l'on cherche à établir les lois macroscopiques locales par les prises de moyenne sur les équations microscopiques, on est conduit à utiliser des relations entre les dérivées des grandeurs macroscopiques et celles des grandeurs microscopiques correspondantes. Etant donné que, dans la plupart des cas, les grandeurs microscopiques qui caractérisent un phénomène ne sont pas continues, c'est au sens des distributions que doivent être appliquées les formules de dérivation des grandeurs moyennes sur le V.E.R. Pour une fonction $\langle \psi^\alpha \rangle$ continûment différentiable dans la phase α , mais discontinue sur l'interface $A^{\alpha/i}$, les opérations de dérivation s'écrivent alors en valeur moyenne :

$$\langle \bar{\nabla} \Psi^\alpha \rangle = \bar{\nabla} \langle \Psi^\alpha \rangle + \frac{1}{V_0} \int_{A^{\alpha/i}} \Psi^\alpha \cdot \vec{n}^{\alpha/i} \cdot dA^* \quad \text{II. 7}$$

$$\bar{\nabla} = \vec{i} \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial}{\partial z} \quad \text{II. 8}$$

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial t} \Psi^\alpha \right\rangle = \frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi^\alpha \rangle - \frac{1}{V_0} \int_{A^{\alpha/i}} \Psi^\alpha \cdot \vec{\nu}^* \cdot \vec{n}^{\alpha/i} \cdot dA^* \quad \text{II. 9}$$

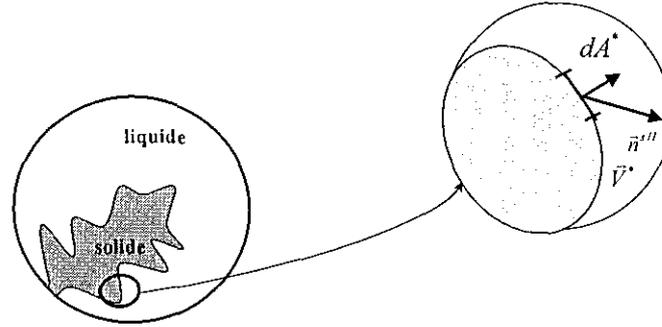


figure II. 2 : Orientation de la normale à une interface α/i , dans le cas particulier où la phase α est la phase solide (s) et où la phase i est la phase liquide (l)

II - 2.1.3. Application de la méthode des prises de moyenne sur un bilan de conservation :

Nous présentons ci-dessous le principe de la méthode de prise de moyenne sur une équation de conservation dans la phase liquide. Son application à une équation de conservation prise dans la phase solide suit exactement le même principe.

La loi de conservation de la grandeur à l'échelle microscopique dans la phase liquide est donnée par la relation suivante :

$$\frac{\partial(\rho^i \Psi^i)}{\partial t} + \bar{\nabla}(\rho^i \bar{v}^i \Psi^i) = 0 \quad \text{II. 10}$$

La prise de moyenne sur un V.E.R de cette loi de conservation conduit à une nouvelle forme de loi de conservation. La prise de moyenne de l'équation (II.10) permet d'écrire :

$$\frac{1}{V_0} \int_{V_0} \frac{\partial(\rho^i \Psi^i)}{\partial t} \gamma^i dV + \frac{1}{V_0} \int_{V_0} \bar{\nabla}(\rho^i \Psi^i \bar{v}^i) \gamma^i dV = 0 \quad \text{II. 11}$$

soit encore :

$$\left\langle \frac{\partial(\rho^i \Psi^i)}{\partial t} \right\rangle + \left\langle \bar{\nabla}(\rho^i \Psi^i \bar{v}^i) \right\rangle = 0 \quad \text{II. 12}$$

l'équation II.9 permet d'écrire le membre de gauche de l'équation II.12 comme suit :

$$\left\langle \frac{\partial(\rho^i \Psi^i)}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial}{\partial t} \langle (\rho^i \Psi^i) \rangle - \frac{1}{V_0} \int_{A^{i/s}} \rho^i \Psi^i \bar{v}^i \cdot n^{i/s} dA^* \quad \text{II. 13}$$

En tenant compte de la relation entre la moyenne de phase et la moyenne intrinsèque donnée par la relation II.4, l'équation II.13 s'écrit comme suit :

$$\left\langle \frac{\partial(\rho^i \Psi^i)}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial}{\partial t} (g^i \rho^i \langle \Psi^i \rangle^i) - \frac{1}{V_0} \int_{A^{i/s}} \rho^i \Psi^i \bar{v}^i \cdot n^{i/s} dA^* \quad \text{II. 14}$$

l'équation II.7 permet d'écrire le terme de divergence de l'équation II.10 comme suit :

$$\left\langle \bar{\nabla}(\rho^i \Psi^i \langle \bar{v}^i \rangle^i) \right\rangle = \bar{\nabla}(\langle \rho^i \Psi^i \bar{v}^i \rangle) + \frac{1}{V_0} \int_{A^{i/s}} (\rho^i \bar{v}^i) \cdot n^{i/s} dA^* \quad \text{II. 15}$$

L'équation II.15 peut s'écrire, moyennant l'hypothèse que la variation de la masse volumique de la phase liquide est négligeable à l'échelle microscopique ($\rho^l = 0$)

$$\left\langle \bar{\nabla}(\rho^l \Psi^l \cdot \langle \bar{v}^l \rangle^l) \right\rangle = \bar{\nabla}(g^l \rho^l \langle \Psi^l \rangle^l \langle \bar{v}^l \rangle^l) + \frac{1}{V_0} \int_{A^{l/s}} (\rho^l \Psi^l \bar{v}^l) \cdot n^{l/s} dA^* \quad \text{II. 16}$$

l'équation II.10 s'écrit alors comme suit :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(g^l \rho^l \langle \Psi^l \rangle^l) - \frac{1}{V_0} \int_{A^{l/s}} \rho^l \Psi^l \bar{v}^* \cdot n^{l/s} dA^* \\ & + \bar{\nabla}(g^l \rho^l \langle \Psi^l \rangle^l \langle \bar{v}^l \rangle^l) + \frac{1}{V_0} \int_{A^{l/s}} (\rho^l \Psi^l \bar{v}^l) \cdot n^{l/s} dA^* = 0 \end{aligned}$$

$$\text{d'où : } \frac{\partial}{\partial t}(g^l \rho^l \langle \Psi^l \rangle^l) + \bar{\nabla}(g^l \rho^l \langle \Psi^l \rangle^l \langle \bar{v}^l \rangle^l) + \frac{1}{V_0} \int_{A^{l/s}} \rho^l \Psi^l (\bar{v}^l - \bar{v}^*) \cdot n^{l/s} dA^* = 0 \quad \text{II. 17}$$

II - 2.1.4. Application sur un bilan de conservation globale de la masse :

En prenant comme variable extensive la fonction de phase (γ^l), on obtient à partir de l'équation II.17, l'équation moyennée de conservation de la masse dans la phase liquide :

$$\frac{\partial}{\partial t}(g^l \rho^l) + \bar{\nabla}(g^l \rho^l \cdot \langle \bar{v}^l \rangle^l) + \frac{1}{V_0} \int_{A^{l/s}} \rho^l (\bar{v}^l - \bar{v}^*) \cdot n^{l/s} dA^* = 0 \quad \text{II. 18}$$

de même pour la phase solide, l'équation de conservation de la masse s'écrit de façon similaire :

$$\frac{\partial}{\partial t}(g^s \rho^s) + \bar{\nabla}(g^s \rho^s \cdot \langle \bar{v}^s \rangle^s) + \frac{1}{V_0} \int_{A^{s/l}} \rho^s (\bar{v}^s - \bar{v}^*) \cdot n^{s/l} dA^* = 0 \quad \text{II. 19}$$

$$\text{ou : } \frac{\partial}{\partial t}(g^s \rho^s) + \bar{\nabla}(g^s \rho^s \cdot \langle \bar{v}^s \rangle^s) - \frac{1}{V_0} \int_{A^{s/l}} \rho^s (\bar{v}^s - \bar{v}^*) \cdot n^{s/l} dA^* = 0 \quad \text{II. 20}$$

En additionnant (II.19) et (II.20) on obtient :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(g^l \rho^l + g^s \rho^s) + \bar{\nabla}(g^l \rho^l \cdot \langle \bar{v}^l \rangle^l + g^s \rho^s \cdot \langle \bar{v}^s \rangle^s) + \\ & \frac{1}{V_0} \int_{A^{l/s}} [\rho^l (\bar{v}^l - \bar{v}^*) - \rho^s (\bar{v}^s - \bar{v}^*)] \cdot n^{l/s} dA^* = 0 \end{aligned} \quad \text{II. 21}$$

Dans un système où il n'y a pas d'accumulation à l'interface, le bilan de matière à l'interface s'écrit comme suit :

$$[\rho^l (\bar{v}^l - \bar{v}^*) - \rho^s (\bar{v}^s - \bar{v}^*)] \cdot n^{l/s} = 0 \quad \text{II. 22}$$

Le bilan global de conservation de la masse sur les phases liquide et solide s'écrit alors comme suit :

$$\frac{\partial}{\partial t}(g^l \rho^l + g^s \rho^s) + \bar{\nabla}(g^l \rho^l \langle \bar{v}^l \rangle^l + g^s \rho^s \langle \bar{v}^s \rangle^s) = 0 \quad \text{II. 23}$$

II - 2.2. Présentation du modèle diphasique de Beckermann :

Dans une étude antérieure (1993), Ni et Beckermann [21] ont mis au point un modèle diphasique suivant l'approche de prises de moyenne. Ce modèle permet de décrire les transferts macroscopiques de masse, de chaleur et de quantité de mouvement ainsi que les évolutions (croissance-refusion) de grains équiaxes de **morphologie globulaire** dans un puits liquide en cours de solidification. Ils ont ainsi mis au point un modèle à deux phases (solide et liquide), où les deux phases sont mobiles avec une vitesse propre associée à chaque phase. Les différents bilans de transfert macroscopique et microscopique du modèle diphasique sont les suivants :

➤ Bilan de conservation sur les populations de cristallites :

Le bilan de conservation de la densité volumique de cristallites est donné par la relation suivante :

$$\frac{\partial(N_v)}{\partial t} + \text{div}(N_v \cdot \langle \vec{V}^s \rangle^s) = \dot{n} \quad \text{II. 24}$$

\dot{n} : correspond à une densité volumique de cristallites qui ont germé par unité de temps.

➤ Bilan de conservation de la masse sur la phase α :

Le bilan de masse sur les phases liquide ou solide est donné par la relation suivante :

$$\frac{\partial(g^\alpha \rho^\alpha)}{\partial t} + \text{div}(g^\alpha \rho^\alpha \cdot \langle \vec{V}^\alpha \rangle^\alpha) = \Gamma_\alpha \quad \text{II. 25}$$

avec Γ_α : masse de la phase α qui est formée ou qui a disparu par unité de temps et de volume.

Pour des grains équiaxes de forme globulaire (sphérique), le terme Γ_α est donné par la relation suivante :

$$\Gamma_s = 4\pi R_g^2 N_v \rho^s \frac{dR_g}{dt} \quad \text{II. 26}$$

R_g : rayon moyen des grains équiaxes

➤ Bilan de conservation de la masse aux interfaces l/s :

Le bilan de conservation aux interfaces l/s est donné comme suit :

$$\Gamma_s + \Gamma_l = 0 \quad \text{II. 22}$$

➤ Bilan de conservation de la masse sur le constituant i dans la phase α :

Le bilan de conservation de la masse sur le constituant i dans la phase α (l ou s) prenant en compte la croissance des grains, les échanges de matière aux interfaces (l/s) et les mouvements de convection, s'écrit comme suit :

$$\frac{\partial(g^\alpha \rho^\alpha \langle w_i^\alpha \rangle^\alpha)}{\partial t} + \text{div}(g^\alpha \rho^\alpha \langle w_i^\alpha \rangle^\alpha \langle \bar{v}^\alpha \rangle) = \text{div}(D_i^\alpha g^\alpha \rho^\alpha \bar{\nabla}(\langle w_i^\alpha \rangle^\alpha)) + \langle w_i^\alpha \rangle^* \Gamma_\alpha + \frac{S_v \rho^\alpha D^\alpha}{\delta_i^\alpha} (\langle w_i^\alpha \rangle^* - \langle w_i^\alpha \rangle^\alpha) \quad \text{II. 27}$$

➤ **Bilan de conservation de la masse sur le constituant i à l'interface liquide-solide :**

Le bilan de conservation de la masse pour le constituant i à interface liquide-solide est le suivant :

$$(\langle w_i^l \rangle^* - \langle w_i^s \rangle^*) \Gamma_s = \frac{S_v \rho^l D_i^l}{\delta_i^l} (\langle w_i^l \rangle^* - \langle w_i^l \rangle^l) + \frac{S_v \rho^s D_i^s}{\delta_i^s} (\langle w_i^s \rangle^* - \langle w_i^s \rangle^s) \quad \text{II. 28}$$

➤ **Bilan de l'énergie dans la phase α :**

Suivant la même méthode le bilan d'énergie sur la phase α s'écrit :

$$\frac{\partial(g^\alpha \rho^\alpha \langle h_i^\alpha \rangle^\alpha)}{\partial t} + \text{div}(g^\alpha \rho^\alpha \langle h_i^\alpha \rangle^\alpha \langle \bar{v}^\alpha \rangle) = \text{div}(\lambda^\alpha g^\alpha \bar{\nabla}(T^\alpha)) + \langle h^\alpha \rangle^* \Gamma_\alpha + \frac{S_v \lambda^\alpha}{\delta_{th}^\alpha} (\langle T^\alpha \rangle^* - \langle T^\alpha \rangle^\alpha) \quad \text{II. 29}$$

➤ **Bilan de conservation de l'énergie aux interfaces l/s :**

Le bilan de conservation d'énergie aux interfaces l/s est donné par la relation suite :

$$(\langle h^l \rangle^* - \langle h^s \rangle^*) \Gamma_s = \frac{S_v \lambda^l}{\delta_{th}^l} (\langle T^l \rangle^* - \langle T^l \rangle^l) + \frac{S_v \lambda^s}{\delta_{th}^s} (\langle T^s \rangle^* - \langle T^s \rangle^s) \quad \text{II. 30}$$

➤ **Equilibre thermodynamique aux interfaces liquide/solide:**

Les relations données en supposant l'équilibre thermodynamique aux interfaces l/s sont les suivantes :

$$\begin{cases} T - T_L = \sum_i m_i (w_i^* - w_i^l) & \text{II. 31} \\ w_i^{s*} = k_i w_i^{l*} & \text{II. 32} \end{cases}$$

avec :

w_i^{l*} : titre massique à l'interface solide/liquide du coté liquide

w_i^{s*} : titre massique à l'interface solide/liquide du coté solide

w_i^l : titre massique du liquide à l'infini

➤ **Bilan de conservation de la quantité de mouvement sur la phase α :**

Le bilan de conservation de la quantité de mouvement sur la phase α (l ou s) est donné par la relation suivante :

$$\frac{\partial(\rho^\alpha g^\alpha \langle \vec{v}^\alpha \rangle^\alpha)}{\partial t} + \nabla(\rho^\alpha g^\alpha \langle \vec{v}^\alpha \rangle^\alpha \cdot \langle \vec{v}^\alpha \rangle^\alpha) = \nabla \left[\eta^\alpha \rho^\alpha \bar{\nabla}(g^\alpha \langle \vec{v}^\alpha \rangle^\alpha) \right] + M_d^\alpha + \vec{V}^* \Gamma_\alpha - g^\alpha \bar{\nabla} p + g^\alpha \rho^\alpha \cdot \vec{g}$$

II.33

avec : $\eta^\alpha = \frac{\mu^\alpha}{\rho^\alpha}$: viscosité cinématique

$$\frac{\partial(\rho^\alpha g^\alpha \langle \vec{v}^\alpha \rangle^\alpha)}{\partial t} + \nabla(\rho^\alpha g^\alpha \langle \vec{v}^\alpha \rangle^\alpha \cdot \langle \vec{v}^\alpha \rangle^\alpha) = \frac{D(\rho^\alpha g^\alpha \langle \vec{v}^\alpha \rangle^\alpha)}{Dt} : \text{forces inertielles macroscopiques.}$$

$\nabla \left[\eta^\alpha \rho^\alpha \bar{\nabla}(g^\alpha \langle \vec{v}^\alpha \rangle^\alpha) \right]$: forces visqueuses, Beckermann propose d'utiliser une loi de comportement de type Newtonien également pour la phase solide avec une viscosité qui dépend de la fraction solide.

M_d^α : forces générées aux interfaces l/s.

$\vec{V}^* \Gamma_\alpha$: terme de croissance.

$g^\alpha \bar{\nabla} p$: gradient de pression.

$g^\alpha \rho^\alpha \cdot \vec{g}$: terme de gravité.

$$M_d^s = -M_d^l = \frac{3}{4} \frac{g^s}{d_s} \rho^l C_d \left| \langle \vec{v}^l \rangle^l - \langle \vec{v}^s \rangle^s \right| \left(\langle \vec{v}^l \rangle^l - \langle \vec{v}^s \rangle^s \right) \quad \text{II.33.1}$$

$$\text{où : } C_d = \frac{48 C_{ke} (1 - g^l)}{R_e} + C_{ie} \quad \text{II.33.2}$$

$$\text{si } g^l \leq 0.5 \quad C_{ke} = 25/6 \quad C_{ie} = 7/3$$

$$\text{sinon } g^l > 0.5 \quad C_{ke} = \frac{1}{2} \frac{g^{l^3}}{(1 - g^l)} \frac{1 + 4.7(1 - g^l)}{1 - 1.83(1 - g^l)} \quad C_{ie} = \frac{24(10^E - 1)}{Re \left[1 - 0.9(g^l - 0.25)^{1/3} (1 - g^l)^{2/3} \right]^3}$$

$$\text{et : } E = 0.261 R_e^{0.369} - 0.105 R_e^{0.431} - \frac{0.124}{1 + (\log_{10} R_e)^2}$$

$$R_e = \frac{g^l}{\eta^l} \left| \langle \vec{v}^l \rangle^l - \langle \vec{v}^s \rangle^s \right| d_s \quad \text{avec : } d_s = 2R_g : \text{diamètre moyen des grains} \quad \text{II.33.3}$$

Dans le cas $g^l \leq 0.5$, on peut écrire :

$$C_d = \frac{48(25/6)(1 - g^l)}{\frac{g^l}{\eta^l} \left| \langle \vec{v}^l \rangle^l - \langle \vec{v}^s \rangle^s \right| d_s} = \frac{200 g^s}{\left| \langle \vec{v}^l \rangle^l - \langle \vec{v}^s \rangle^s \right| d_s} \frac{\eta^l}{g^l} \quad \text{II.33.4}$$

La combinaison de cette équation (II.33.4) avec l'équation II.33.1 permet d'écrire :

$$M_d^s = -M_d^l = \frac{3}{4} \frac{(g^s)^2}{d_s^2 g^l} \left[\frac{200}{\left| \langle \vec{v}^l \rangle^l - \langle \vec{v}^s \rangle^s \right|} \mu^l \right] \left| \langle \vec{v}^l \rangle^l - \langle \vec{v}^s \rangle^s \right| \left(\langle \vec{v}^l \rangle^l - \langle \vec{v}^s \rangle^s \right)$$

$$\text{d'où : } M_d^s = 150 \frac{g^s}{d_s^2 g^l} \mu^l (\langle \bar{v}^l \rangle^l - \langle \bar{v}^s \rangle^s) \quad \text{II.33.5}$$

Cette équation peut s'écrire aussi comme suit :

$$M_d^s = \frac{(g^l)^2}{d_s^2 (g^l)^3} \mu^l (\langle \bar{v}^l \rangle^l - \langle \bar{v}^s \rangle^s) \\ \frac{150(1-g^l)^2}{150(1-g^l)^2}$$

$$\text{d'où : } M_d^s = \frac{g^l}{K_m} \mu^l (\langle \bar{v}^l \rangle^l - \langle \bar{v}^s \rangle^s) \quad \text{II.33.6}$$

$$\text{avec : } K_m = \frac{d_s^2 (g^l)^3}{150(1-g^l)^2} \quad \text{II.33.7}$$

La relation II.33.6 montre que le terme M_d devient proportionnel à la différence de vitesse entre les phases liquide et solide. Ainsi, lorsque $g^l < 0,5$ on retrouve un terme de frottement de type Darcy, avec une perméabilité donnée par l'équation II.33.7 qui correspond à une loi de type Carman-Koseny.

Les longueurs de diffusion thermique et chimique dans les phases liquide et solide sont données par les relations établies par Rowe et Claxton [22] et Ni et Beckermann [23] :

$$\left\{ \begin{array}{l} \delta_i^{th} \text{ (or } \delta_i^l) = \left[\frac{1}{\frac{1}{1-g^s/3} + \frac{1}{3g^l} \text{Pr}^{1/3} \text{ (or } \text{Sc}^{1/3}) Re^a} \right] R_g \text{ avec } a = \frac{2 \text{Re}^{0,28} + 4,65}{3(\text{Re}^{0,28} + 4,65)} \\ \delta_s^{th} \text{ (or } \delta_i^s) = R_g / 5 \end{array} \right. \quad \text{II.34.1}$$

Ces corrélations montrent que les longueurs de diffusion thermiques et chimiques sont pondérées par la convection. Sur la figure II 3 (a) nous avons représenté l'évolution du rapport de la longueur de la diffusion chimique dans la phase liquide au rayon d'un grain sphérique en fonction de la fraction de solide pour différentes valeurs de la vitesse d'écoulement. Cette figure montre que la longueur de diffusion chimique diminue lorsque la fraction de solide augmente et qu'elle est inversement proportionnelle à la convection. En effet, la convection a pour effet de diminuer l'épaisseur des couches limites qui se forment aux interfaces d'un grain ou d'une dendrite, et une fraction de solide élevée réduit les espaces entre les grains.

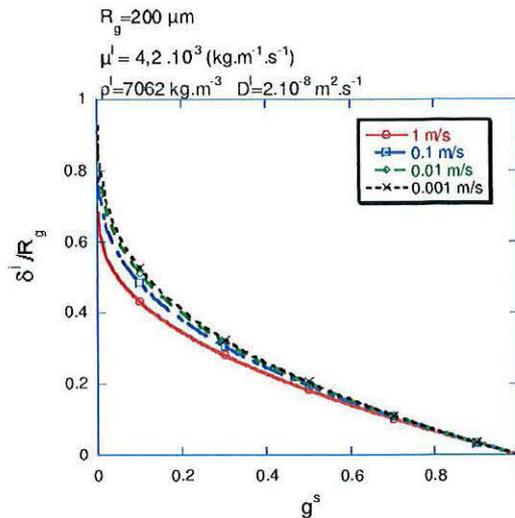
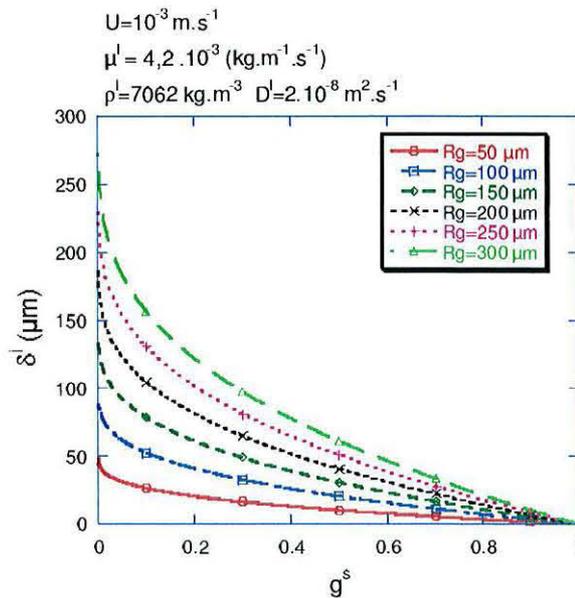


figure II 3 : Evolution en fonction de la fraction de solide du rapport de la longueur de diffusion chimique au rayon du grain pour différentes vitesses du liquide

La figure II 4 présente l'évolution de la longueur de diffusion chimique dans la phase liquide en fonction de la fraction de solide pour différentes tailles de grains globulaires et pour une vitesse donnée. On constate que, lorsque la fraction de solide est faible, la longueur de diffusion chimique est proportionnelle au rayon des grains. Lorsqu'on approche de la fin de la solidification, cette longueur de diffusion devient très faible quelle que soit la taille du grain.



(a)

figure II 4 : Evolution de la longueur de diffusion chimique en fonction de la fraction de solide pour différentes tailles de grains globulaires.

Une loi de viscosité de la phase solide qui depend de la fraction volumique solide a été établie par Ni et Beckermann [23] :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mu_s^* = \frac{[1 - g^s / g^{sp}]^{-2.5g^{sp}} - g^l}{g^s} \mu_l \\ \mu_l^* = \mu_l \end{array} \right. \quad \text{II.35}$$

Lorsque cette dernière atteint une valeur limite fixée à $g^{sp} = 0,637$, la viscosité tend vers l'infini (voir figure II 5). A cet instant, la phase solide est bloquée.

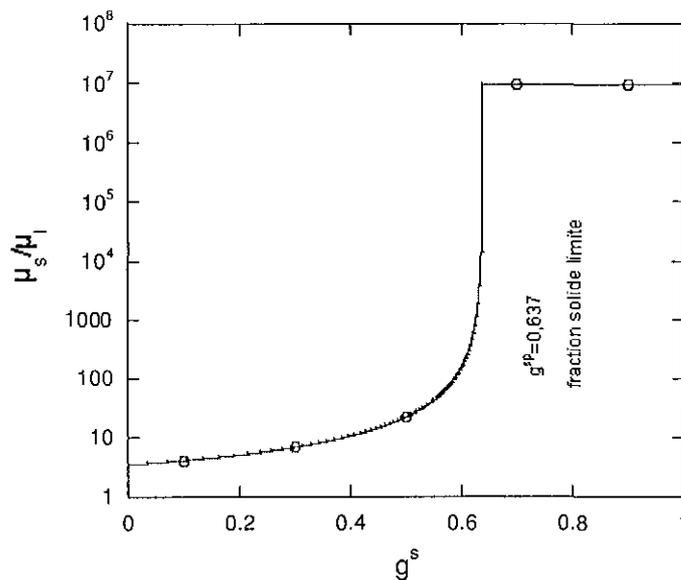


figure II 5 : Evolution en fonction de la fraction solide du rapport de la viscosité de la phase solide à la viscosité du fluide

La surface spécifique de l'interface liquide/solide est donnée par :

$$S_v = \frac{1}{V_0} \int_{A^{ls}} dA^*$$

Pour les grains équiaxes de morphologie globulaire (sphérique), la surface spécifique est donnée par la relation suivante :

$$S_v = 4\pi R_g^2 N_l \quad \text{II.36}$$

II - 3. CONCLUSION :

Cette étude constitue l'approche mathématique utilisée dans plusieurs études présentées plus loin, pour étudier la mécanique des milieux continus et la complexité géométrique de la zone pâteuse. Un modèle diphasique constitué d'un système d'équations établies par Ni et Beckermann pour étudier le mouvement de grains équiaxes globulaires dans un puits liquide en cours de solidification a été présenté.

II - 4. APPLICATION DU MODELE ET RESULTATS NUMERIQUES :

Ni et Beckermann [21] ont appliqué leur modèle diphasique à un lingot d'aluminium (Al-4%Cu) de géométrie cartésienne et de taille 10 cm de hauteur par 5 cm de largeur (voir figure II. 6). Cela leur a permis d'étudier l'évolution de grains équiaxes globulaires et l'incidence sur la macroségrégation. Le code de calcul utilisé est PHOENICS basé sur la méthode des volumes finis.

La résolution de ce type de problème diphasique a conduit ces auteurs à imposer un certain nombre d'hypothèses. Ils considèrent que les grains équiaxes sont de forme globulaire et les cristallites germent en volume instantanément à la température de liquidus suivant la loi :

$$\dot{n} = K_1$$

où K_1 : représente un nombre de germes/m³

Les résultats de l'analyse numérique réalisée ont montré l'importance de la prise en compte du mouvement de la phase solide sur la carte de macroségrégation finale. Les auteurs ont conclu que lorsque la fraction de solide est inférieure à la fraction de solide limite fixée à 0,637 (fraction de cohérence du squelette solide), l'intensité du mouvement de la phase solide est proportionnelle à la taille des grains et à la vitesse de la phase liquide. Il a été constaté que les grains ont plutôt tendance à sédimenter près de la paroi refroidie où la vitesse de la phase solide est plus forte que celle de la phase liquide. Au contraire, loin de cette dernière, ils sont transportés par le mouvement du liquide. Lorsque la fraction de solide est égale ou dépasse la fraction de solide limite (0,637), la phase solide est immobilisée par l'effet de la viscosité qui atteint dans ce cas des valeurs très grandes (figure II 5).

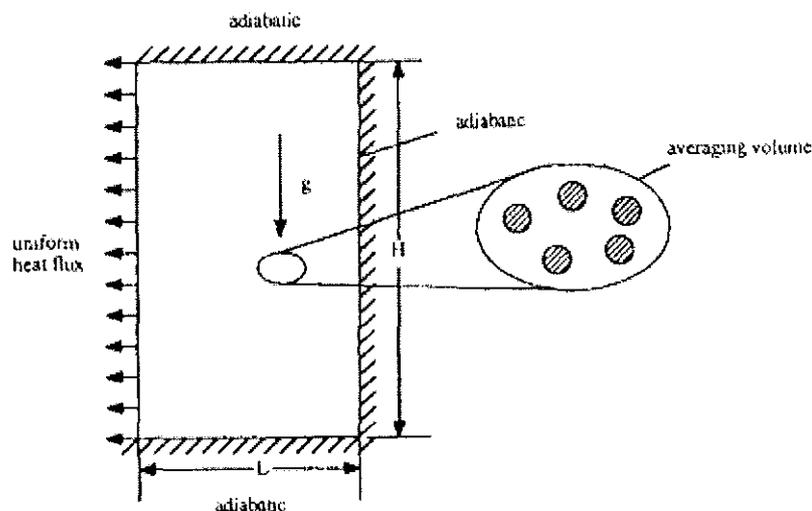


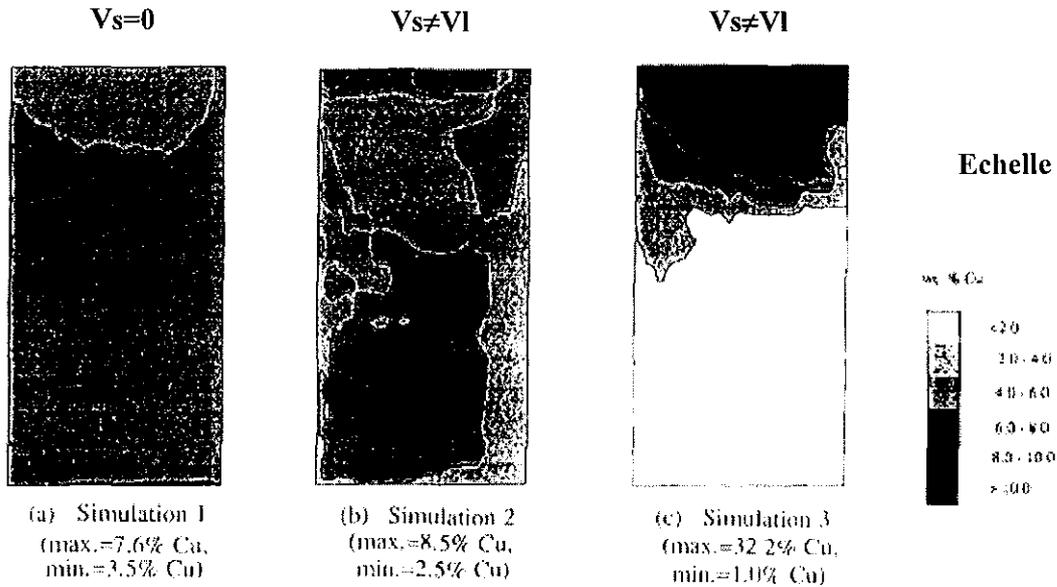
figure II. 6: schématisation du système physique [21]

Les macroségrégations négatives maximales sont obtenues aux voisinages de la paroi refroidie où les densités volumiques de grains obtenues sont importantes. Ce résultat s'explique par une accumulation importante et rapide de grains pauvres en élément d'alliage dans ces zones.

En 1996, Beckermann et Ni [24] ont repris cette étude, pour cette fois, étudier par la simulation numérique l'influence de la sédimentation de grains globulaires. Un des paramètres physiques mis en valeur dans cette étude et qui joue un rôle non négligeable sur la macroségrégation, est la densité volumique de cristallites (germes). Trois simulations numériques ont été réalisées (voir figure II. 7). Deux simulations ont été effectuées en supposant les grains mobiles et une troisième en supposant les grains fixes. Ces simulations correspondent à deux valeurs de densité volumique de cristallites germés : 10^9 et 10^{11} cristallites/m³ lorsque les grains sont en mouvement et à une densité de 10^{11} cristallites/m³ lorsque les grains sont immobiles. La taille initiale d'un cristallite est imposée égale à 1 µm.

Les résultats de l'analyse numérique montrent l'influence de la densité volumique de cristallites et de la prise compte du mouvement de la phase solide sur les cartes de macroségrégation finale. Lorsque les grains sont immobiles, une macroségrégation négative est obtenue en tête du lingot et une positive dans le reste de ce dernier (voir figure II. 7 (a)). Lorsque les grains sont en mouvement, ces auteurs ont constaté que lorsque la densité volumique de germes est égale à 10^9 cristallites/m³, une macroségrégation positive est obtenue en tête du lingot jusqu'à une hauteur d'environ 1/3 du sommet et une négative dans le reste de ce dernier (voir figure II. 7 (c)), ils attribuent cela à la sédimentation initiale des grains pauvres en élément d'alliage.

Lorsque la densité volumique de germes est de $10^{11}/m^3$ (voir figure II. 7 (b)), Ni et Beckermann trouvent des résultats des deux précédentes simulations, avec une macroségrégation négative au voisinage de la paroi refroidie, due à une forte densité volumique de grains accumulés à cause du blocage de la phase solide qui atteint rapidement la fraction solide limite (critique) dans ces endroits.



$\dot{n} = 10^{11}$ cristallites / m^3 / s $\dot{n} = 10^{11}$ cristallites / m^3 / s $\dot{n} = 10^9$ cristallites / m^3 / s
(grains immobiles)

figure II. 7 : cartes de ségrégations finales dans les trois simulations [24]

Concernant la distribution de tailles de grains à la fin de la solidification ($g^s = 1$), ces auteurs ont constaté que lorsque les grains sont fixes, comme la densité volumique est constante, la taille moyenne des grains est constante et égale à environ 134 μm . Dans le cas où les grains sont en mouvement, les tailles minimales obtenues sont de 134 μm pour une densité de $10^{11}/m^3/s$ (voir figure II. 8 (a)) et de 620 μm pour une densité de 10^9 cristallites / m^3/s (voir figure II. 8 (b)).

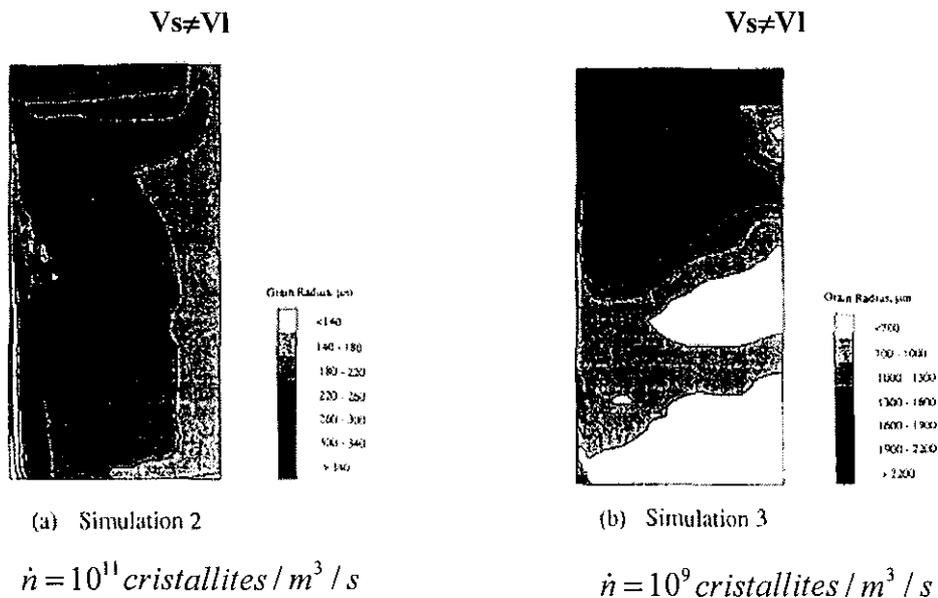


figure II. 8 : cartes finales des tailles des grains équiaxes globulaires [24]

Lorsque la densité volumique de germes est de $10^{11}/m^3$, les tailles minimales sont obtenues au voisinage de la paroi refroidie à cause de la forte densité de grains accumulés dans ces endroits par la sédimentation et le blocage rapide de la phase solide. Pour la densité de germination de $10^9/m^3$, les tailles minimales sont obtenues au pied du lingot jusqu'à mi-hauteur près de la paroi refroidie, pour les mêmes causes que celles évoquées précédemment.

En 1996, Wang et Beckermann [25] ont repris cette étude numérique en intégrant cette fois la morphologie dendritique dans la croissance des grains équiaxes. Ainsi, de nouvelles équations ont été établies pour compléter le modèle diphasique présenté précédemment. Ces équations traduisent cette morphologie dendritique par le bilan sur la fraction d'enveloppe des grains dendritiques, les bilans de masse pour les solutés dans les phases liquides intra et extra-dendritiques.

Trois simulations ont été réalisées (voir figure II. 9 (a), (b) et (c)). La première simulation correspond à un calcul avec une densité volumique de 10^9 germes/ m^3 et la phase solide fixe. Les deuxième et troisième simulations correspondent aux deux densités volumiques de germes 10^9 et 10^{11} germes/ m^3 et avec la prise en compte du mouvement propre de la phase solide.

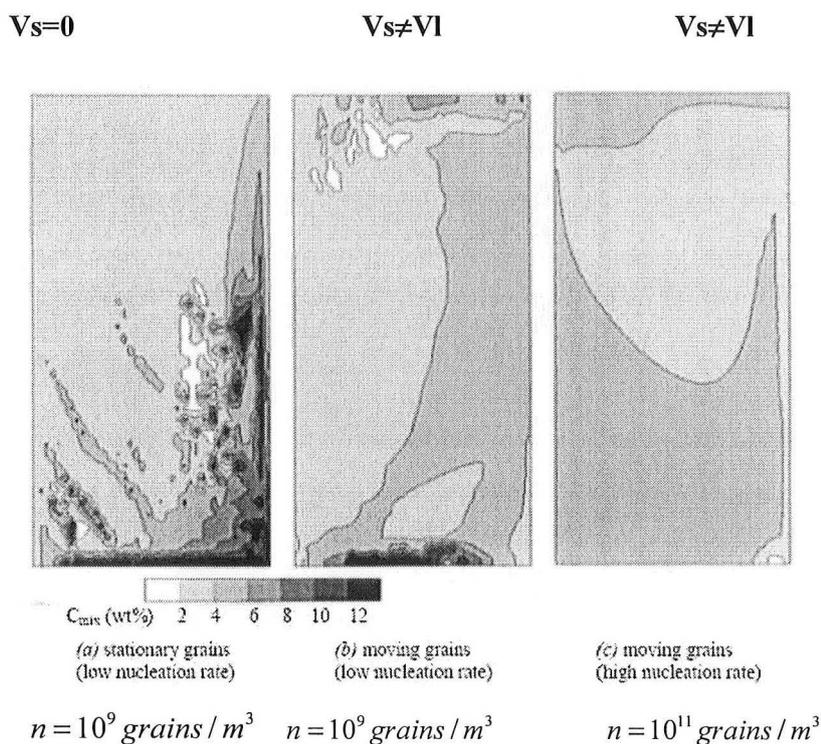


figure II. 9 : cartes finales de la macroségrégation [25]

Les figures II.10 (a), (b) et (c) présentent les cartes finales de composition moyenne de Cu. Elles montrent l'influence de la densité volumique de germes et le rôle important du mouvement de la phase solide sur la macroségrégation.

Les auteurs ont constaté que lorsque les grains sont immobiles (voir figure II. 9 (a)), les ségrégations sont formées près de la paroi refroidie par laquelle la solidification démarre et au pied du domaine. Par contre, dans les deux autres cas (voir figures II 10 (b) et (c)), le transport macroscopique des grains dans le domaine de solidification va jouer un rôle important pour modifier complètement cette carte de macroségrégation. Lorsque les grains sont immobiles, la macroségrégation positive obtenue au voisinage de la paroi refroidie et au pied du domaine est due à la forte croissance des grains dans ces endroits à cause de la présence d'une forte surfusion et à l'apport par le liquide du soluté riche en éléments d'alliage, contrairement au reste du domaine de solidification où la surfusion est faible. D'autre part, ces auteurs ont constaté que des canaux de ségrégation se sont formés pendant la solidification. Cette forme de ségrégation est associée par les auteurs à la refusion locale de la phase solide.

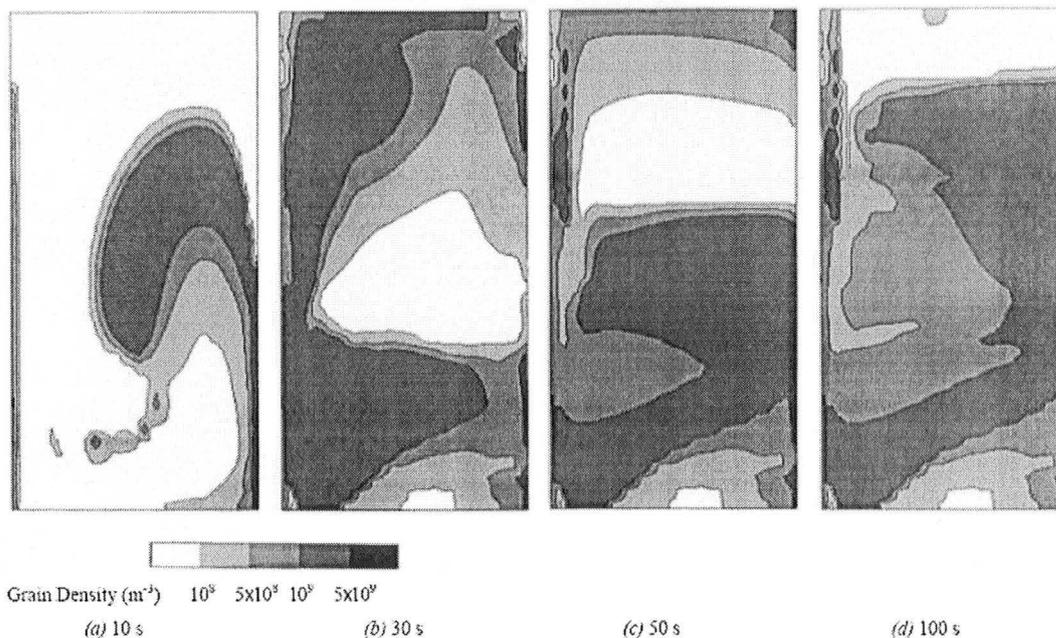


figure II. 10 : carte de densité volumique à différents instants pour une densité volumique de germination hétérogène de $10^9/\text{m}^3$ [25]

Lorsque la phase solide est en mouvement (voir figure II. 9 (b)), pour la même densité volumique de germes (10^9 grains/ m^3) que dans le cas où la phase solide est immobile, il a été constaté que les canaux de ségrégation n'existent plus et la carte finale de composition obtenue suit la distribution de la densité volumique finale de grains dans le domaine (voir figure II. 10). Ces auteurs ont conclu que la macroségrégation positive obtenue en pied du lingot est le résultat d'une densité volumique moins importante où les grains auront tendance

à croître suivant une morphologie dendritique avec l'enrichissement en soluté du liquide extradendritique. Lorsque la densité volumique de grains utilisée est importante (voir figure II. 9 (c)), les grains ont tendance à croître suivant une morphologie globulaire. Dans ce cas, ils sont de petite taille, par rapport au cas précédent (grains dendritiques), leur sédimentation engendre une macroségrégation négative au pied du lingot au voisinage de la paroi refroidie.

Ludwig et coll [26] ont étudié par la modélisation, l'influence de la convection et du mouvement des grains équiaxes globulaires sur la solidification de l'alliage Al-4%Cu dans une cavité rectangulaire (voir figure II. 11).

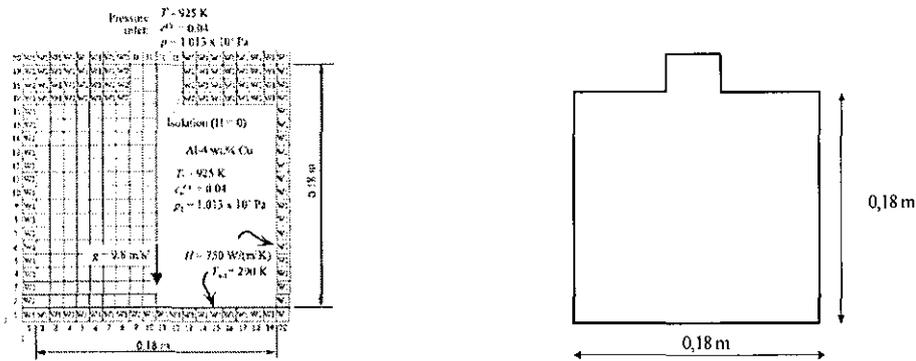


figure II. 11 : schématisation du système physique [26]

Par rapport au modèle mis en place par le groupe de recherche de Beckermann, les auteurs ont introduit de nouveaux développements :

La loi de germination utilisée est donnée par la relation suivante [27] :

$$\dot{n} = \frac{d\Delta T}{dt} \frac{n_{\max}}{\sqrt{2\pi}\Delta T_{\sigma}} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta T - \Delta T_N}{\Delta T_{\sigma}}\right)^2\right)$$

Avec :

n_{\max}	10^{14} germes/m ³
ΔT_{σ}	4 K
ΔT_N	10 K

ΔT : la surfusion (K)

ΔT_{σ} : déviation standard de la distribution Gaussienne (K)

ΔT_N : taux maximal de nucléation (germination) (K)

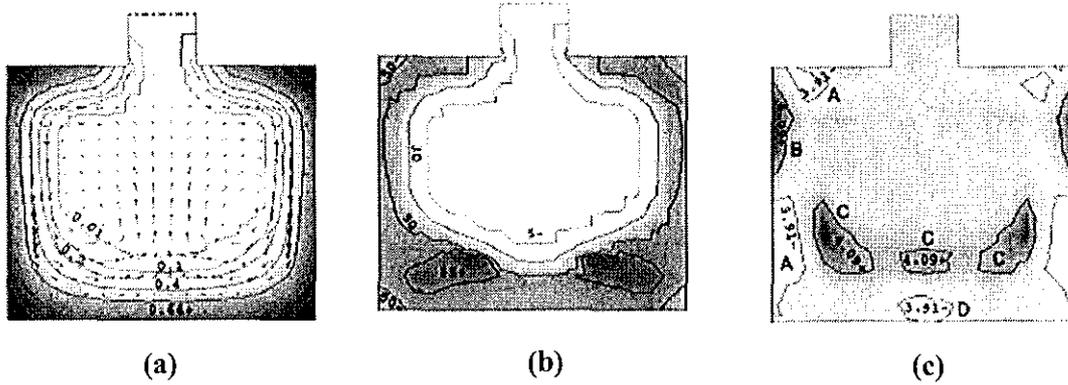


figure II. 12 : Résultats de la simulation après 40 s (a) vitesse débitante de la phase liquide (m), (b) diamètre (μm) et (c) titre massique (% mass Cu) [26]

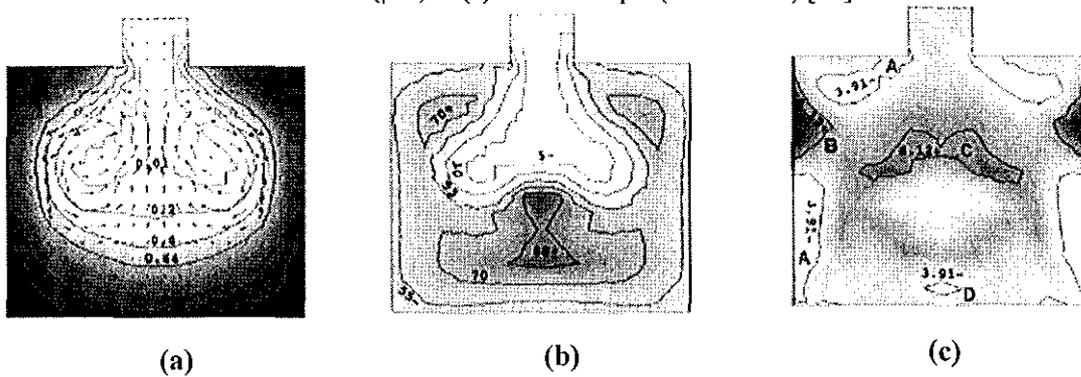


figure II. 13 : Résultats de la simulation après 80 s (a) vitesse débitante de la phase liquide (m), (b) diamètre (μm) et (c) titre massique (% mass Cu) [26]

La deuxième simulation réalisée est obtenue avec l'hypothèse que la phase solide est fixe. Il a été constaté que les grains commencent à germer aux coins et sur les parois refroidies. Ceci a conduit aux ségrégations obtenues (voir figure II 14), différentes de celles où les grains sont transportés dans le puits liquide. Cette différence est aussi observée dans l'évolution de la température. Ces auteurs ont constaté que les isothermes sont légèrement différentes entre les deux simulations (voir figure II 15).

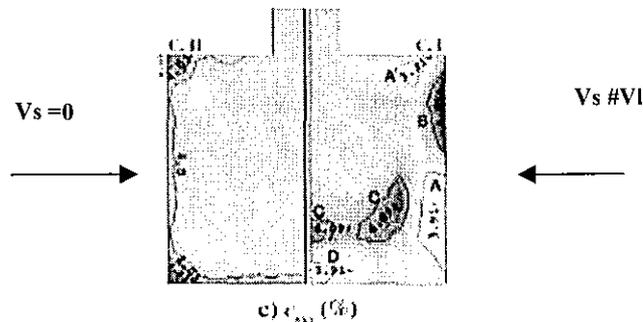


figure II 14 : comparaison de cartes de macroségrégations obtenues après 40 s de calcul [26]

La figure II 15 montre que l'isotherme 921 K obtenue dans le cas $V_s=0$ est légèrement inférieure à celle obtenue dans le cas $V_s \neq 0$. Selon les auteurs, dans le cas où les grains seraient en mouvement, leur sédimentation le long des parois fait remonter le centre chaud vers le haut.

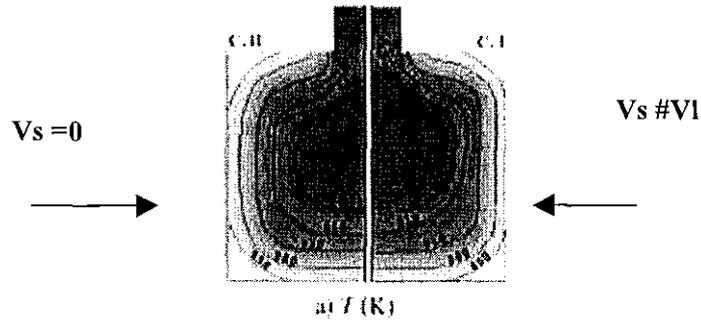


figure II 15 : comparaison de cartes de températures obtenues après 40 s de calcul [26]

Dans la troisième simulation réalisée, en plus de l'hypothèse $V_s \neq 0$, les auteurs ont tenu compte du phénomène de retrait à la solidification et des conditions de glissement aux frontières. Cette fois, les grains qui germent en tête du domaine sont libres de descendre dans le puits liquide, par conséquent, le mouvement des grains est plus fort que dans le cas où le retrait est négligé (voir figure II 16). Ils ont constaté en effet que la vitesse maximale est de 17,13 mm/s dans le cas avec retrait alors que dans le cas contraire, elle n'est que de 9,75 mm/s. La conséquence de cette forte sédimentation de grains conduit aux macroségrégations obtenues au pied du lingot (voir figure II 17).

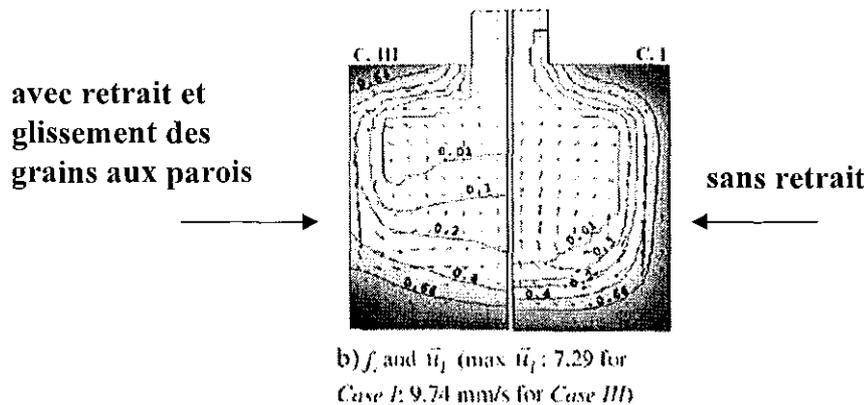


figure II 16 : comparaison des champs de vitesses obtenus après 40 s de calcul [26]

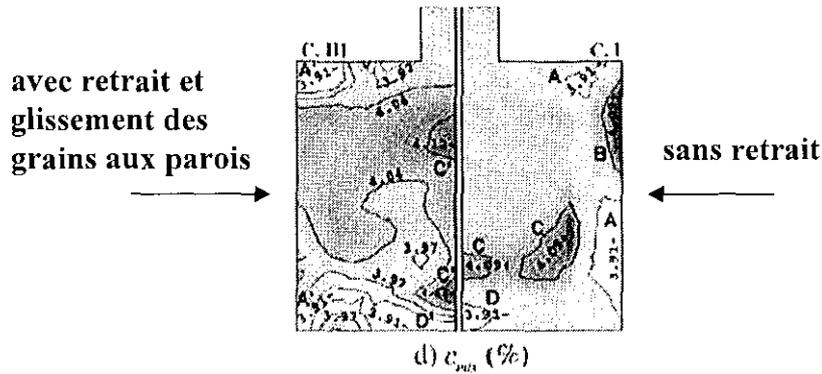


figure II 17 : comparaison de cartes de macroségrégations obtenues après 40 s de calcul [26]

Krane [28] a réalisé une étude numérique suivant l'approche de la théorie des mélanges, sur la solidification d'un alliage ternaire Pb-5%Sb-35%Sn et en prenant en compte le mouvement de la phase solide. Cette étude s'inscrit dans la suite des travaux réalisés avec Incropera [16-20]. Le domaine utilisé dans cette étude est présenté sur la figure II. 18.

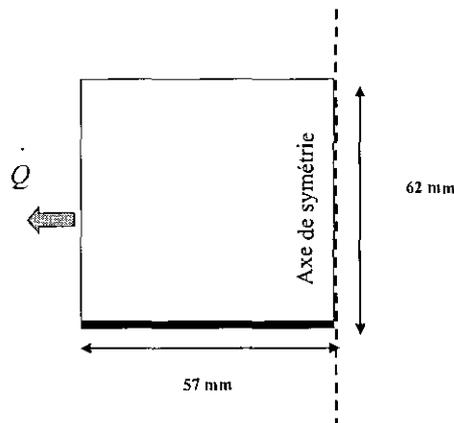


figure II. 18 : domaine utilisé dans l'analyse numérique

Les conditions aux limites imposées sont : une condition d'adiabaticité au pied du domaine et une condition de refroidissement par une circulation d'eau froide sur la paroi verticale. Le haut du domaine est traité comme une surface libre. La résolution numérique est réalisée avec le code fluent, suivant un maillage de 75X65 et un axe de symétrie (paroi verticale droite).

Les équations aux dérivées partielles qui constituent le modèle diphasique ont été établies avec l'hypothèse que l'inertie de la phase solide est négligeable et le modèle de perméabilité isotrope de Blake-Kozeny est utilisé pour prendre en compte les interactions solide-liquide lorsque la fraction de solide (g^s) est inférieure à une fraction de solide limite (g^{sp}).

Selon l'auteur, le mouvement propre de la phase solide suit la relation suivante :

$$\bar{V}_S - \bar{V}_L = \frac{(1 - g_s)}{18\mu} (\rho_s - \rho_L) d^2 g$$

avec d : diamètre effectif moyen des grains équiaxes.

Dans cette étude, deux paramètres du modèle considérés comme inconnus ont été étudiés. Ces paramètres sont le diamètre effectif des grains équiaxes et la fraction solide critique qui correspond à la valeur limite à partir de laquelle la phase solide est considérée immobile. Le diamètre effectif est choisi de telle sorte qu'il soit inférieur à un diamètre expérimental ($\approx 130 \mu\text{m}$). La gamme de la fraction de solide limite de blocage du mouvement de la phase solide étudiée varie entre 0 et 0,3, alors que dans la littérature la valeur souvent utilisée est de 0,637. La solidification de l'alliage ternaire Pb-5%Sb-35%Sn commence par la cristallisation primaire de Pb en α et se termine au point péritectique P.

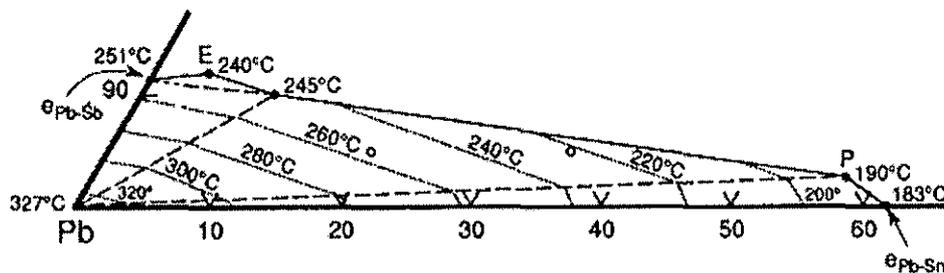


figure II. 19 : Linéarisation du diagramme de phase Pb-Sb-Sn [28]

Dans un premier temps, un ensemble de calculs a été réalisé avec une fraction de solide de blocage de 0,2 et une gamme de diamètre effectif de 5 à 100 μm . Il a été constaté en faisant varier le diamètre effectif qu'aucune différence n'est perceptible sur le déroulement de la solidification et sur la macroségrégation finale. Ainsi, dans la suite de cette étude, un diamètre de 100 μm a été imposé. Les trois valeurs de la fraction de solide de blocage (g^{sp}) de la phase solide étudiée dans la suite de cette étude sont : 0; 0,1; 0,3.

Lorsque la fraction de solide limite est égale à 0, la phase solide est fixe. La solidification de l'alliage conduit au rejet des éléments d'alliage Sb et Sn dans le liquide par la diffusion. La figure II. 20 montre que des canaux de ségrégation se forment près du front colonnaire, que l'auteur explique par de petites instabilités qui existent dans cet endroit à cause de la refusion locale de la phase solide. Ces canaux de ségrégation deviennent ensuite le chemin préférentiel du liquide qui refondra encore plus le solide.

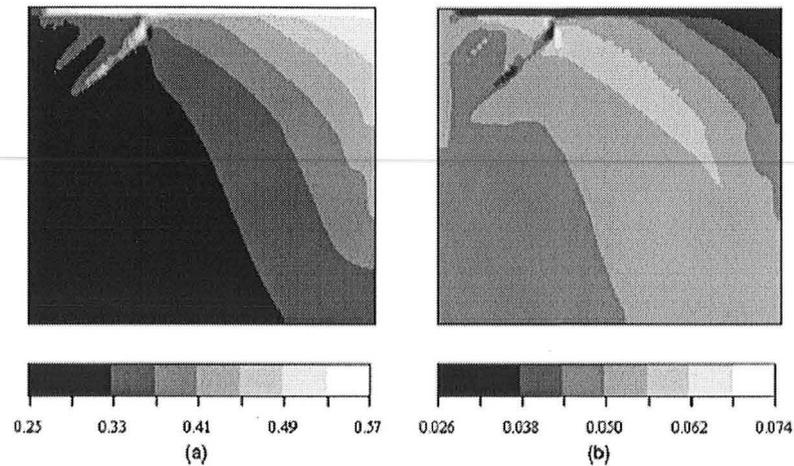


figure II. 20 : cartes de macroségrégations finales (a) Sn et (b) Sb, $g^{sp}=0$, $V_s=0$ [28]

Lorsque la fraction de solide de blocage est égale à **0,1**, la phase solide est en mouvement tant que la fraction solide est inférieure à cette valeur limite. La figure II. 21 présente la carte de macroségrégation finale dans le domaine de solidification. Il a été constaté qu'avec la prise en compte du mouvement de la phase solide, les canaux de ségrégation n'existent plus. Cependant, le fait de bloquer rapidement le mouvement de la phase solide, conduit à une carte finale de macroségrégation proche du cas précédent où la phase solide est fixée dès le départ. Lorsque le mouvement de la phase solide est bloqué plus tard ($g^{sp}=0,3$), il a conclu que la carte finale de macroségrégation est complètement modifiée (figure II. 22).

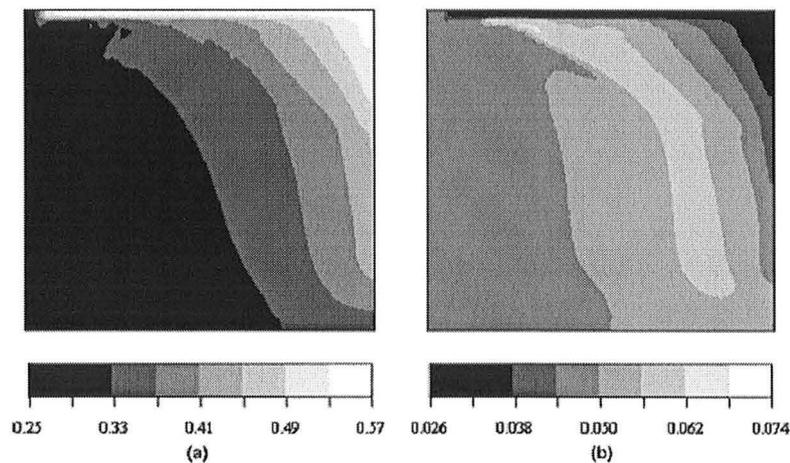


figure II. 21 : cartes de macroségrégations finales (a) Sn et (b) Sb, $g^{sp}=0,1$, $V_s \neq 0$ [28]

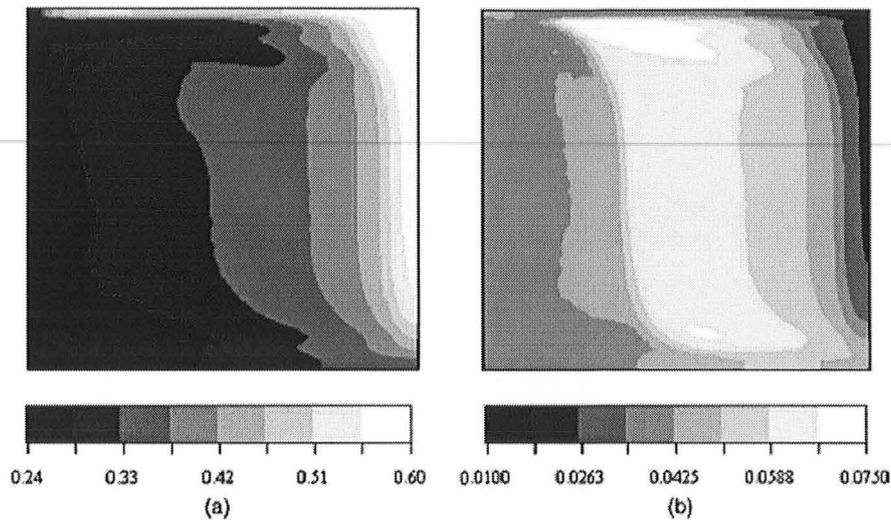


figure II. 22 : cartes de macroségrégations finales (a) Sn et (b) Sb, $g^{sp}=0,3$, $V_s \neq 0$ [28]

En conclusion, l'étude paramétrique réalisée dans cette étude numérique sur la solidification d'un alliage ternaire a permis à l'auteur de mettre en évidence l'importance du mouvement de la phase solide et de l'intervalle de fraction de solide où la phase solide est en mouvement, sur la carte finale de macroségrégation.

II - 5. CONCLUSIONS :

Le modèle diphasique mis en place par l'équipe de Beckermann [21] suivant l'approche de prise de moyenne permet de traiter numériquement les transferts de masse, de quantité de mouvement et d'énergie à l'échelle macroscopique, couplés aux évolutions qui se produisent à l'échelle microscopique des grains. Les simulations numériques ont mis en évidence le rôle important du mouvement des grains sur la carte finale de taille de grains et sur les macroségrégations. Des paramètres très sensibles comme la densité de germes et la fraction limite de blocage des grains ont été dégagés. Ce qui montre l'intérêt de ce type de modèle, mais également les limites actuelles car ces paramètres sont encore mal connus. La morphologie des grains joue également un rôle important. Cette étude bibliographique nous a également permis de mettre en évidence qu'il y a encore peu de travaux dédiés à ce sujet, notamment l'aspect numérique spécifique à la résolution de ce type de problème n'est pratiquement pas abordé par les auteurs. Le calcul couplé des mouvements propres des phases solide et liquide est donc un champ de recherche qui est encore à explorer et à approfondir.

CHAPITRE III :

**MODELISATION DES EXPERIENCES
DE MOUKASSI A L'AIDE DU
MODELE DIPHASIQUE**

III - MODELISATION DES EXPERIENCES DE MOUKASSI A L'AIDE DU MODELE DIPHASIQUE

III - 1. INTRODUCTION

Pour comprendre l'évolution des grains équiaxes et la thermique du bain liquide, Moukassi [3] a réalisé une étude expérimentale de la solidification des alliages métalliques (Pb-2%Sb et Pb-4%Sb) en présence de brassage mécanique. Cette étude a été consacrée à l'influence de la convection forcée (brassage) sur les évolutions de la thermique dans le puits liquide et sur l'ensemencement de ce dernier par des fragments cristallins détachés des structures dendritiques colonnaires. Il a été constaté que lorsque la vitesse de brassage est importante, la température dans le puits liquide est abaissée rapidement et la quantité de cristallites détachés des structures dendritiques est importante (voir figure I. 6 et figure I. 7). Cette étude expérimentale a montré aussi que les structures dendritiques génèrent plus de fragments cristallins lorsque l'alliage est riche en élément d'alliage que dans le cas contraire. D'autre part, cette étude expérimentale a permis d'établir que des populations de cristallites peuvent survivre dans le puits liquide même avec une surchauffe (voir figure I. 8).

En conclusion, l'ensemble des résultats expérimentaux obtenus dans cette étude, permettent d'avancer que, d'une part, la convection et la charge en élément d'alliages sont deux paramètres favorables au détachement de fragments cristallins des structures colonnaires et d'autre part, que des cristallites peuvent survivre dans les zones liquides qui se trouvent en situation de surchauffe.

Pour étudier et comprendre ces résultats, nous avons mis en place un modèle numérique.

III - 2. MISE EN PLACE DU MODELE DIPHASIQUE ET APPLICATION :

Les différents bilans de conservation mis au point par Ni et Beckermann [21] ont été établis pour décrire les évolutions (croissance-refusion et mouvements) de grains équiaxes. Pour modéliser l'expérience de Moukassi, nous avons utilisé le modèle de Beckermann avec l'hypothèse suivante :

- Le brassage est supposé parfait notamment les phases liquide et solide sont supposées à température uniforme et égale, de composition moyenne également uniforme dans la zone équiaxe.

III - 2.1. Etablissement des bilans de conservation pour l'expérience Moukassi :

Dans la partie revue bibliographique, nous avons rapporté les résultats de l'analyse expérimentale réalisée par Moukassi sur les figures I.6 à I.8. Dans cette partie, nous avons exploité ces résultats expérimentaux dans le but de remonter aux densités de flux de fragments cristallins qui se détachent au cours du temps des structures dendritiques colonnaires.

La densité de cristallites mesurée expérimentalement représente un nombre de cristaux par unité de surface de l'échantillon prélevé. Le calcul à partir de cette densité surfacique, d'une densité de flux de fragments détachés par unité de surface de front colonnaire et par unité de temps, peut se faire à l'aide d'un bilan sur la population de grains.

Avant de présenter le bilan établi sur la densité volumique de cristallites, nous avons schématisé par la figure III. 1 le dispositif expérimental utilisé.

➤ **Dispositif expérimental :**

La figure III. 1 présente une schématisation du dispositif expérimental qui montre le déroulement de l'opération de solidification avec le détachement de fragments cristallins.

La surface du front colonnaire et le volume global du puits liquide sont calculés comme suit :

$$S = 2\pi HR_1(t)$$

$$V = \pi H(R_{ext}^2 - R_1^2) + \pi(H_{max} - H)R_{ext}^2$$

avec : $R_1 = R_{int} + \text{épaisseur}(t)$

R_1 : position radiale du front colonnaire à un instant donné.

Epaisseur : mesurée expérimentalement. Elle suit une évolution linéaire (annexe A.I).

R_{int} : rayon du doigt refroidisseur (cylindre interne)

R_{ext} : rayon du creuset (cylindre externe)

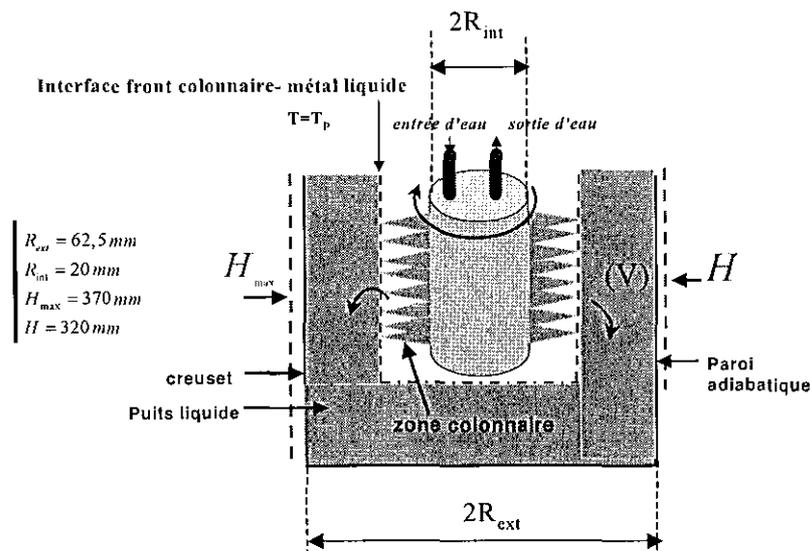


figure III. 1 : Dispositif expérimental et principe de l'expérience de solidification avec un brassage mécanique de l'alliage métallique Pb-Sb

➤ *Bilan de conservation de la densité volumique moyenne de grains :*

Le bilan de conservation de la densité volumique de grains, mis en place par Beckermann et présenté dans le chapitre II, est le suivant :

$$\frac{\partial N_v}{\partial t} + \text{div}(N_v \cdot \langle \vec{V}^s \rangle^s) = \dot{n} \quad \text{III.1}$$

Pour obtenir la densité de flux de fragments cristallins détachés des structures colonnaires, nous avons fait les hypothèses suivantes :

- Il n'y a pas de fragments qui se forment à l'intérieur de la structure équiaxe. Les fragments sont supposés être des bras dendritiques qui sont détachés de la structure colonnaire.
- Les fragments ne refondent pas dans le puits liquide.
- Le front colonnaire qui avance piège les cristaux équiaxes qui sont à son niveau.
- La sédimentation et l'agglomération de cristaux sont supposées négligeables.

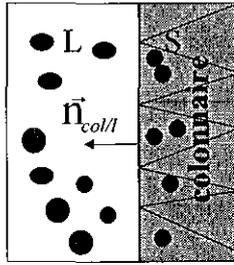


figure III. 2 : schéma de l'avancée du front colonnaire

L'intégration de l'équation III.1 sur le système constitué par le puits liquide s'écrit comme

suit :

$$\int_{V(t)} \left(\frac{\partial(N_v)}{\partial t} + \text{div}(N_v \cdot \langle \vec{V}^s \rangle^s) \right) dV = \int_{V(t)} \dot{n} dV \quad \text{III.1.1}$$

Sachant que :

$$\frac{d}{dt}(\bar{N}_v V) = \frac{d}{dt} \int_{V(t)} N_v dV = \int_{V(t)} \frac{\partial(N_v)}{\partial t} dV + \int_{S(t)} N_v^* \vec{U}^* \cdot \vec{n}_{l/col} ds \quad \text{III.1.2}$$

avec :

\bar{N}_v : la valeur moyenne de la grandeur N_v dans un volume V représentatif du puits liquide.

col : indice pour définir la zone colonnaire.

\vec{U}^* : vitesse de l'interface zone colonnaire/puits liquide.

$\vec{n}_{l/col}$: vecteur normale à l'élément de surface de l'interface liquide/colonnaire

$$\text{alors : } \int_{V(t)} \frac{\partial(N_v)}{\partial t} dV = \frac{d}{dt}(\bar{N}_v V) - \int_{S(t)} N_v^* \vec{U}^* \cdot \vec{n}_{l/col} \cdot ds \quad \text{III.1.3}$$

avec :

L'équation III.1.3 s'écrit aussi comme suit en supposant N_v^* uniforme :

$$\int_{V(t)} \frac{\partial(N_v)}{\partial t} dV = \frac{d(\bar{N}_v V)}{dt} - N_v^* \frac{dV}{dt} \quad \text{III.1.4}$$

Comme hypothèse, nous considérons que : $N_v^* = \bar{N}_v$ (brassage parfait).

$$\text{On obtient : } \int_{V(t)} \frac{\partial(N_v)}{\partial t} dV = V \frac{dN_v}{dt}$$

Le terme convectif de l'équation III.1.1 peut s'écrire :

$$\int_{V(t)} \text{div}(N_v \langle \vec{V}^s \rangle^s) = \iint_{S(t)} N_v \langle \vec{V}^s \rangle^s \cdot \vec{n}_{l/col}$$

On suppose que $\langle \vec{V}^s \rangle^s$ est nul sur l'interface puits liquide/zone colonnaire, donc :

$$\int_{V(t)} \text{div}(N_v \langle \vec{V}^s \rangle^s) = 0$$

Enfin, le bilan de conservation de la densité de fragments cristallins s'écrit comme suit :

$$V \frac{d\bar{N}_v}{dt} = \int_{V(t)} \dot{n} \cdot dV \quad \text{III.1.5}$$

La création de fragments n'a lieu que sur l'interface puits liquide/zone colonnaire, donc :

$$\int_{V(t)} \dot{n} \cdot dV = \int_{S(t)} \dot{n}_s \cdot dS \quad \text{III.1.6}$$

$$\text{d'où : } V \frac{d\bar{N}_v}{dt} = \dot{n}_s S \quad \text{III.1.7}$$

La densité de flux de fragments cristallins détachés par unité de surface du front colonnaire est calculée alors comme suit :

$$\dot{n}_s = \frac{V}{S} \frac{d\bar{N}_v}{dt} \quad \text{III.1.8}$$

On retrouve ainsi l'équation simple déjà proposée dans la thèse de Moukassi [3].

Avec :

\bar{N}_v : nombre moyen de cristallites présents dans le puits liquide par unité volume.

V : volume du bain liquide ou volume global.

S : surface du front colonnaire.

\dot{n}_s : nombre de fragments cristallins détachés du front colonnaire par unité de surface et par unité de temps (densité de flux de fragments détachés par unité de surface du front colonnaire).

Après avoir établi le bilan sur les densités volumiques de grains, nous avons mis en œuvre le modèle diphasique en intégrant les bilans différentiels sur le puits liquide pour établir cette fois les bilans de conservation de la masse, de la masse de soluté et de l'énergie. Il est alors possible de calculer les grandeurs physiques comme : la fraction de solide, l'évolution de la température du puits liquide et le rayon moyen des grains. Ces résultats seront ensuite comparés avec les mesures.

➤ *Bilan moyen de conservation de la masse dans la phase solide :*

Le bilan de masse dans la phase solide avec la prise en compte de l'injection de fragments dans le bain liquide s'écrit comme suit :

$$\frac{\partial(g^s \rho^s)}{\partial t} + \text{div}(g^s \rho^s \cdot \langle \vec{V}^s \rangle^s) = \Gamma_s + \dot{n} \rho^s V_s^0 \quad \text{III.2}$$

Suite à quelques manipulations mathématiques (voir annexe A.III), cette équation s'écrit comme suit :

$$V \frac{d}{dt} (\bar{g}^s \rho^s) = \bar{\Gamma}_s V + \dot{n}_s S \rho^s V_s^0 \quad \text{III.2.5}$$

Connaissant la fraction de solide, fraction de liquide est calculée comme suit :

$$g^l = 1 - g^s \quad \text{III.3}$$

➤ *Bilan moyen de conservation de la masse à l'interface :*

Le bilan de conservation de la masse à l'interface est donné par la relation suivante :

$$\bar{\Gamma}_s + \bar{\Gamma}_l = 0 \Rightarrow \bar{\Gamma}_l = -\bar{\Gamma}_s \quad \text{III.4}$$

➤ *Bilan moyen de conservation de la masse du constituant i dans la phase liquide :*

Le bilan moyen de masse du constituant i dans la phase liquide est donné par la relation suivante :

$$\frac{\partial(g^l \rho^l \langle w_i^l \rangle^l)}{\partial t} + \text{div}(g^l \rho^l \langle w_i^l \rangle^l \cdot \langle \vec{V}^l \rangle^l) = \text{div}(D_i^l g^l \rho^l \bar{\nabla}(\langle w_i^l \rangle^l)) + \langle w_i^l \rangle^* \Gamma_l + \frac{S_v \rho^l D_i^l}{\delta_i^l} (\langle w_i^l \rangle^* - \langle w_i^l \rangle^l) \quad \text{III.5}$$

Suite à quelques manipulations mathématiques et la prise en compte de l'injection de fragments dans le bain liquide (voir annexe A.III), cette équation s'écrit comme suit :

$$\rho^l V \frac{d(\bar{g}^l \bar{w}_i^l)}{dt} = -\bar{w}_i^{l*} \bar{\Gamma}_s V + \frac{S_v \rho^l D_i^l}{\delta_i^l} (\bar{w}_i^{l*} - \bar{w}_i^l) V - \bar{w}_i^l \dot{n}_s S \rho^s V_s^0 \quad \text{III.5.2}$$

➤ **Bilan moyen de conservation de la masse du constituant i dans la phase solide :**

Le bilan moyen de masse du constituant i dans la phase solide est donné par la relation suivante :

$$\frac{\partial(g^s \rho^s \langle w_i^s \rangle^s)}{\partial t} + \text{div}(g^s \rho^s \langle w_i^s \rangle^s \cdot \langle \vec{V}^s \rangle) = \text{div}(D_i^s g^s \rho^s \vec{\nabla}(\langle w_i^s \rangle^s)) + \langle w_i^s \rangle^* \Gamma_s + \frac{S_v \rho^s D^s}{\delta_i^s} (\langle w_i^s \rangle^* - \langle w_i^s \rangle^s) \quad \text{III.6}$$

Suite à quelques manipulations mathématiques et la prise en compte de l'injection de fragments dans le bain liquide (voir annexe A.III), cette équation s'écrit comme suit :

$$\rho^s V \frac{d(\bar{g}^s \bar{w}_i^s)}{dt} = \bar{w}_i^{s*} \bar{\Gamma}_s V + \frac{S_v \rho^s D_i^s}{\delta_i^s} (\bar{w}_i^{s*} - \bar{w}_i^s) V + \bar{w}_i^{s \text{ in } j} \dot{n}_s S \rho^s V_s^0 \quad \text{III.6.2}$$

➤ **Bilan moyen de conservation de la masse du constituant i aux interfaces l/s :**

Le bilan moyen de masse du constituant aux interfaces l/s est donné par relation suivante :

$$(\bar{w}_i^{l*} - \bar{w}_i^{s*}) \bar{\Gamma}_s = \frac{S_v \rho^l D_i^l}{\delta_i^l} (\bar{w}_i^{l*} - \bar{w}_i^l) + \frac{S_v \rho^s D_i^s}{\delta_i^s} (\bar{w}_i^{s*} - \bar{w}_i^s) \quad \text{III.7}$$

➤ **Bilan moyen de conservation de l'énergie :**

En tenant compte du transfert thermique par convection du liquide vers le front colonnaire et des échanges de la chaleur liquide-solide devant le front colonnaire qui est le résultat du flux de chaleur apporté par la fraction de solide qui entre dans le puits liquide et de celui qui est perdu à cause de la fraction liquide qui sort de ce dernier, le bilan d'énergie s'écrit comme suit (voir annexe A.III) :

$$\rho V \frac{d\bar{h}}{dt} = K_{conv} S (T_p - \bar{T}) + \rho S \dot{n}_s V_s^0 (h^s - h^l) \quad \text{III.8.1}$$

avec :

$$\left\{ \begin{array}{l} V_s^0 = \frac{4}{3} \pi R_{fg}^0 \\ \bar{h} = c_p \bar{T} + (1 - g^s) L \\ h^s = c_p T_p \\ h^l = c_p \bar{T} + L \\ K_{conv} : \text{coefficient de transfert à l'interface colonnaire/puits liquide.} \\ T_p : \text{température de pointes de dendrites colonnaires.} \\ \bar{T} : \text{Température moyenne du puits liquide (zone équiaxe).} \end{array} \right.$$

➤ *Equilibre thermodynamique aux interfaces liquide/solide:*

Les relations données en supposant l'équilibre thermodynamique aux interfaces liquide/solide sont les suivantes

$$\begin{cases} T - T_i = \sum_i m_i (w_i^{**} - w_i') & \text{II. 31} \\ w_i^{**} = k_i w_i' & \text{II. 32} \end{cases}$$

Les autres variables nécessaires dans la résolution couplée des équations présentées ci-dessus sont :

➤ *La surface spécifique :*

La surface spécifique de grains équiaxes globulaires est donnée par la relation suivante :

$$S_v = 4\pi R_g^2 N_v$$

➤ *Les longueurs de diffusion chimique :*

Les longueurs de diffusion chimique dans les phases liquide et solide :

$$\delta_i^l = \delta_i^s = R_g$$

➤ *Calcul de la température des pointes de dendrites colonnaires :*

Le bilan d'énergie donné par l'équation III.8.1 est une fonction de la température de pointes des dendrites colonnaires (T_p) et du coefficient de transfert par convection (K_{conv}).

Le coefficient de transfert par convection imposé dans nos calculs est une donnée rapportée dans la thèse Moukassi (abaque obtenue suite aux mesures expérimentales (annexe A.I)). La température de pointes de dendrites est calculée par un code de calcul développé par Appolaire pendant sa thèse [29] en se basant sur les travaux de Ananth et Gill [30], qui ont résolu les équations de transport couplé (quantité de mouvement et température) autour d'un paraboloïde de révolution. Ce programme permet de calculer la vitesse d'avance des pointes de dendrites en fonction de la surfusion chimique (voir figure III. 3). Dans notre code de calcul, nous avons utilisé le code Appolaire pour calculer la température de pointes de dendrites en connaissant la vitesse d'avance du front colonnaire.

Sur les figures III.3 (a) et (b) nous avons tracé la surfusion chimique calculée par le modèle d'Appolaire en fonction de la vitesse des pointes des dendrites, en prenant en compte la convection ou sans prendre en compte cette dernière. Les résultats obtenus montrent que la convection est un phénomène qui limite fortement la surfusion chimique. En effet, les mouvements de convection autour du paraboloïde de révolution réduisent les couches limites thermique et solutale.

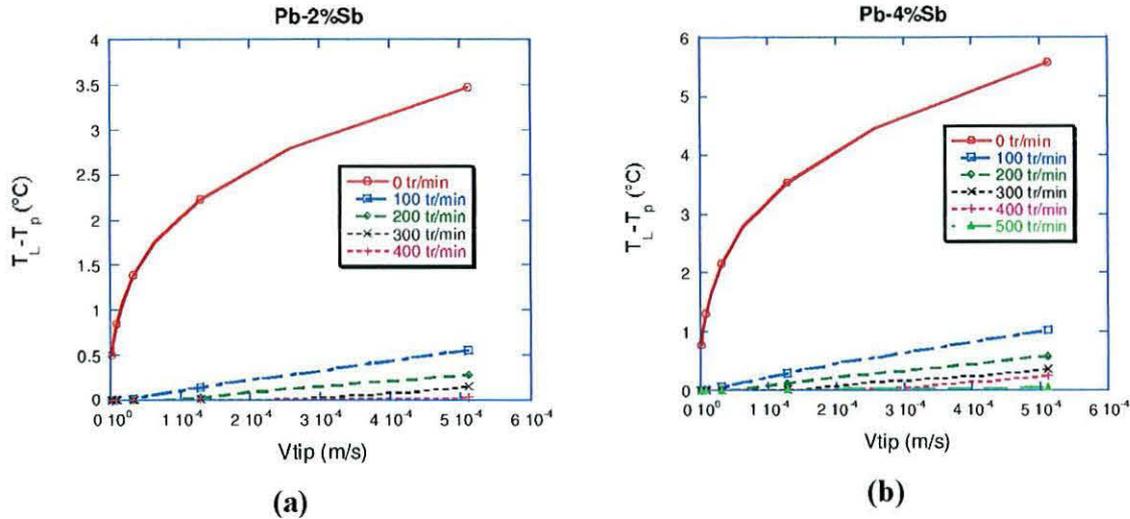


figure III. 3 : Evolution de la surfusion chimique en fonction de la vitesse de pointes de dendrites colonnaires

➤ *Algorithme de résolution :*

Les équations de conservations moyennées (III.1 à III.8.1) associées aux relations d'équilibre thermodynamique constituent un modèle décrivant l'évolution des grains globulaires dans le puits liquide. Cet ensemble d'équations a été résolu en discrétisant les équations en temps selon une méthode de type explicite. L'ensemble des équations discrétisées est présenté (annexe B.III).

La figure III. 4 présente l'algorithme général mis en place pour résoudre les différentes équations présentées ci-dessus. Cet algorithme est présenté en détail en annexe C.III. La démarche suivie pour résoudre ce système d'équations est la suivante :

Après l'injection des fragments dans le puits liquide, nous calculons la densité volumique de grains (II.24), les fractions de solide et de liquide (III.2.5), le rayon moyen des grains sphériques et la température du puits liquide (III.8.1), sans tenir compte de la croissance et de la refusion des grains. Ensuite, nous résolvons le système d'équations (A.III.8) pour calculer les variables $w_i^{l*}, w_i^{s*}, \Gamma_s, g^s, g^l, T$ en prenant en compte cette fois la croissance et la refusion des grains. Enfin, nous calculons les titres massiques des phases liquide et solide et le rayon moyen des grains.

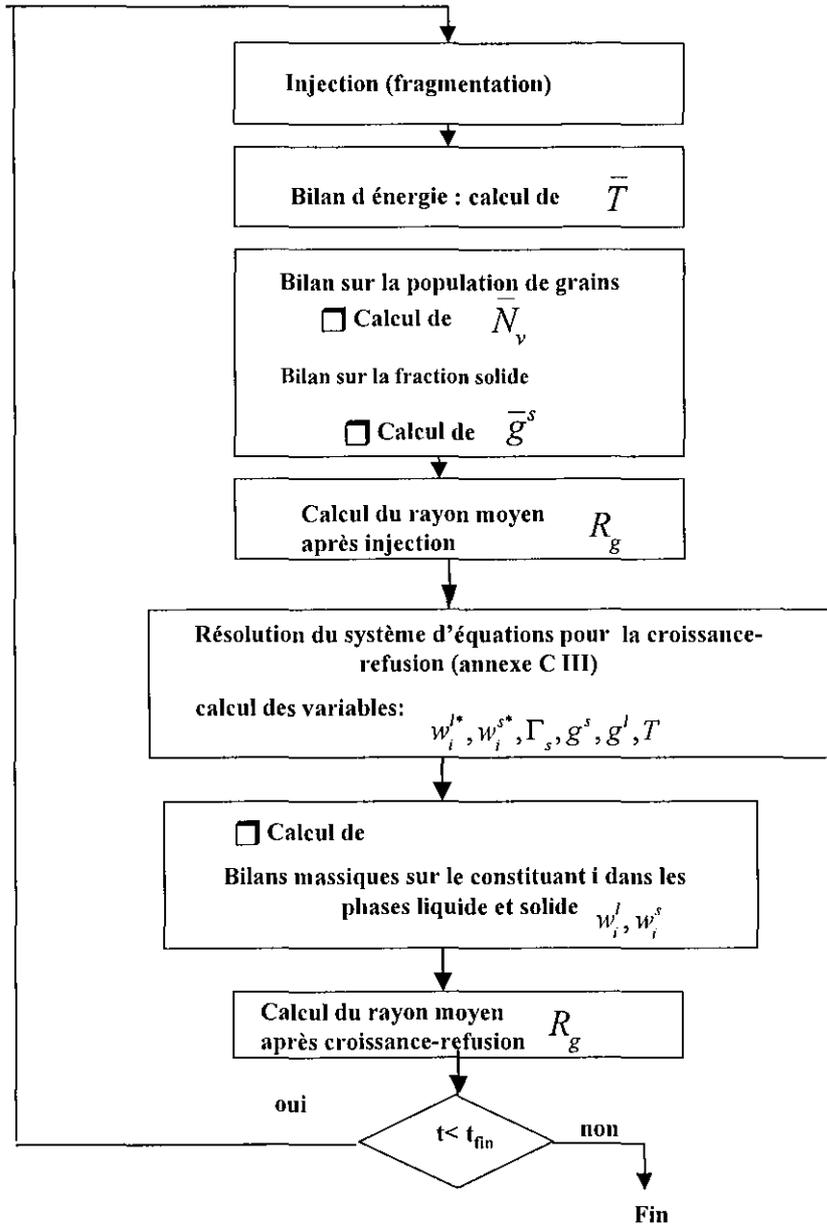


figure III. 4 : Algorithme de résolution

Remarque :

Dans la suite de cette étude, le modèle obtenu après les développements réalisés sur le modèle diphasique de Beckermann, est appelé : **modèle diphasique moyenné**.

III - 3. DETERMINATION DES DENSITES DE FLUX DE FRAGMENTS CRISTALLINS :

Du fait de l'hypothèse de non refusion des fragments présents dans le puits liquide, tout au moins pendant la phase ascendante des courbes d'évolution mesurées de la densité de grains, il est possible de remonter à une densité de flux de fragments par unité de surface du front colonnaire (relation III.1.8). Pour calculer la densité de flux de fragments (\dot{n}_s) donnée par l'équation III.1.8, il faut calculer auparavant la densité volumique de cristaux (N_v) à partir de la densité surfacique mesurée (n_{surf}) :

➤ *Densité volumique de cristaux globulaires :*

La densité volumique de cristaux peut être estimée à partir de la densité surfacique mesurée (n_{surf}) [31] :

$$N_v = \sqrt{\frac{\pi}{6f^s}} n_{surf}^{3/2} \quad \text{III.9}$$

Ce premier calcul permet de passer d'une densité surfacique à une densité volumique, en considérant la fraction de solide surfacique égale à la fraction de solide volumique, étant donné que les prélèvements ont été réalisés dans la zone brassée supposée homogène et que la structure de grains peut être considérée isotrope.

Les autres données nécessaires pour calculer \dot{n}_s à l'aide de l'équation III.1.8, à savoir : la surface du front colonnaire et le volume du puits liquide, sont calculées à partir des résultats expérimentaux de l'épaisseur solidifiée en fonction du temps.

➤ *Méthode mise en œuvre pour l'exploitation des résultats expérimentaux :*

Pour calculer les densités de flux de fragments détachés du front colonnaire, nous avons :

- Défini les intervalles de temps utilisés pour déterminer les densités de flux de fragments qui correspondent à la phase ascendante de la courbe d'évolution des densités de cristallites au cours du temps pour les deux nuances d'alliage étudiées. Ces deux intervalles sont :
 - ◆ Pour la nuance d'alliage Pb-2%Sb, l'intervalle de temps utilisé est compris entre **120 s** et **240 s**
 - ◆ Pour la nuance d'alliage Pb-4%Sb, l'intervalle de temps utilisé est compris entre **60 s** et **180 s**
- Etabli des approximations linéaires pour la variation dans le temps des densités de cristallites expérimentales (n_{surf}) obtenues par Moukassi.
- Etabli des approximations linéaires pour la variation dans le temps de la fraction de solide expérimentale (f^s) obtenues par Moukassi

➤ *Calcul des rayons réels des cristaux :*

Les rayons moyens mesurés sont reliés aux rayons réels des cristaux par la relation suivante [30] :

$$R_{réel} = \frac{4}{\pi} R \tag{III.10}$$

Avec : R : Rayon mesuré

III - 3.1. CAS Pb-2%Sb :

III - 3.1.1. Résultats du modèle et discussions :

La figure III. 5 présente l'évolution au cours du temps de la densité volumique de cristaux. Pour les phases d'évolution de chacun des essais, on retrouve sur cette figure, l'influence du brassage déjà commentée précédemment sur l'évolution de la densité volumique de grains.

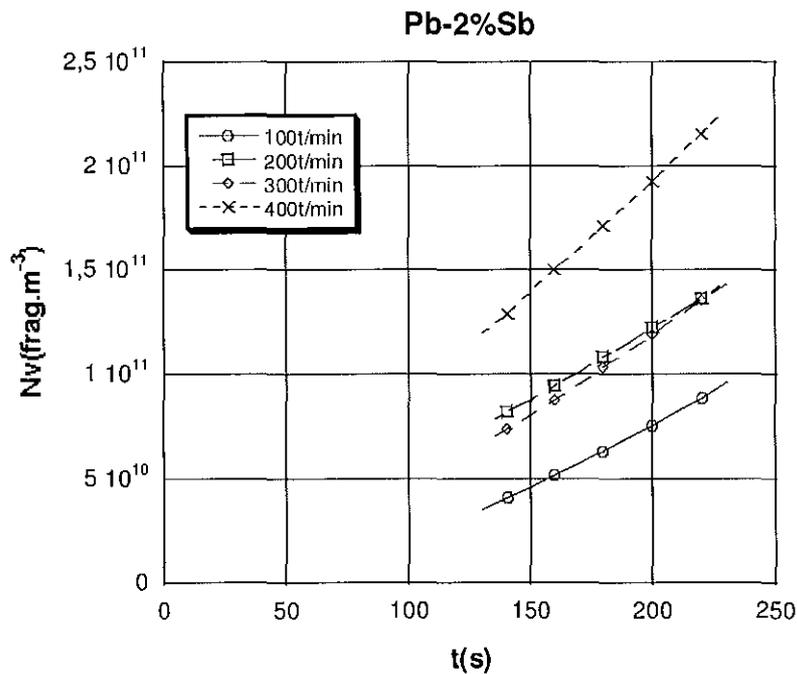


figure III. 5 : Evolution de la densité volumique de grains en fonction du temps après sélection de la période ascendante

La figure III. 6 présente l'évolution au cours du temps de la dérivée de la densité volumique de cristaux. On constate que cette grandeur évolue linéairement une pente similaire, quelle que soit la vitesse de brassage étudiée.

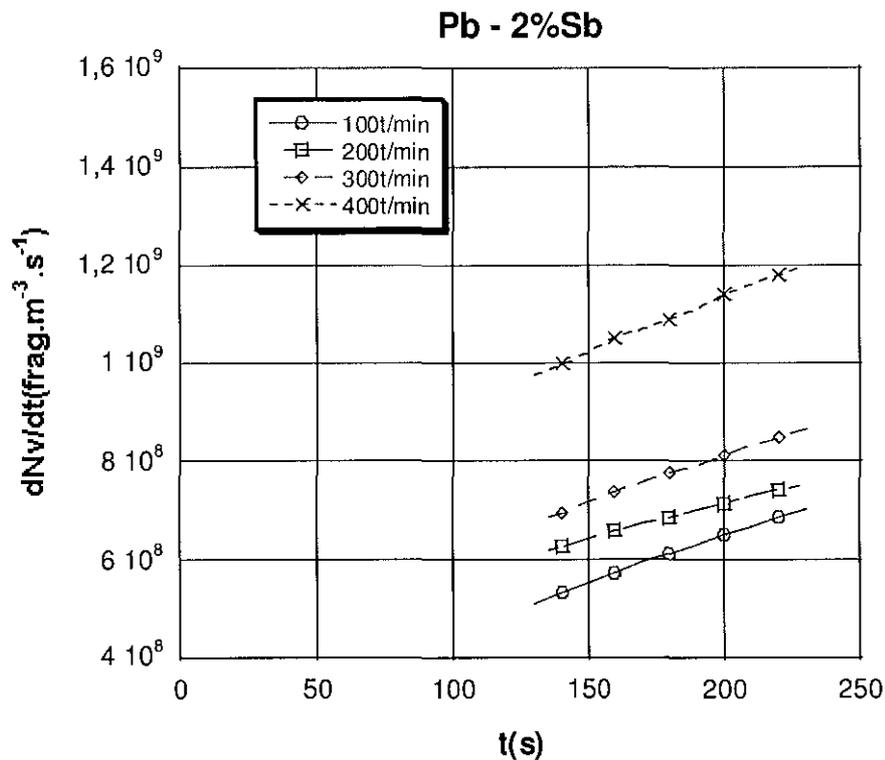


figure III. 6 : Evolution de la dérivée temporelle de la densité volumique des grains au cours du temps

La figure III. 7 présente l'évolution au cours du temps de la densité de flux de fragments par unité de surface du front colonnaire. On note une décroissance au cours du temps de cette densité de flux. L'évolution inverse de \dot{n}_v par rapport à $\frac{dN}{dt}$ est due à l'effet des variations du volume du puits liquide et de la surface du front colonnaire. L'épaisseur de la zone colonnaire augmente au cours du temps et la vitesse de rotation du doigt étant fixée, la vitesse du brassage au niveau de l'interface puits liquide/zone colonnaire augmente. On pourrait ainsi penser que la densité de flux de fragments détachés augmente au cours du temps. Ce résultat peut s'expliquer d'une part, par des phénomènes non abordés par notre modèle, comme l'agglomération, la sédimentation et les évolutions au cours du temps des structures dendritiques et d'autre part, par les incertitudes expérimentales.

Cette figure montre que la densité moyenne de flux de fragments augmente avec la vitesse du fluide, par comparaison entre les différents essais. Cependant, on remarque que sa valeur instantanée diminue au cours du temps pendant un même essai, alors que la vitesse instantanée du fluide augmente. Il est possible que, plus la solidification avance dans le temps et plus il est difficile de détacher des fragments du front colonnaire qui devient de moins en moins riche en dendrites.

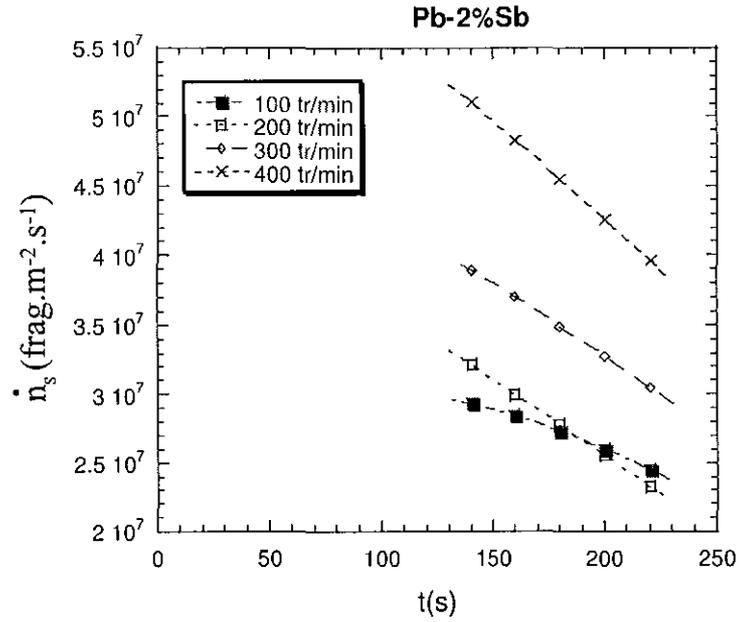


figure III. 7 : Evolution de la densité de flux de fragments détachés du front colonnaire au cours du temps

La figure III. 8 présente la variation de la densité de flux de fragments en fonction de la vitesse instantanée du fluide pour les quatre essais expérimentaux. Cette figure confirme encore une fois que la convection forcée est un paramètre physique qui joue un rôle important dans le détachement des fragments cristallins.

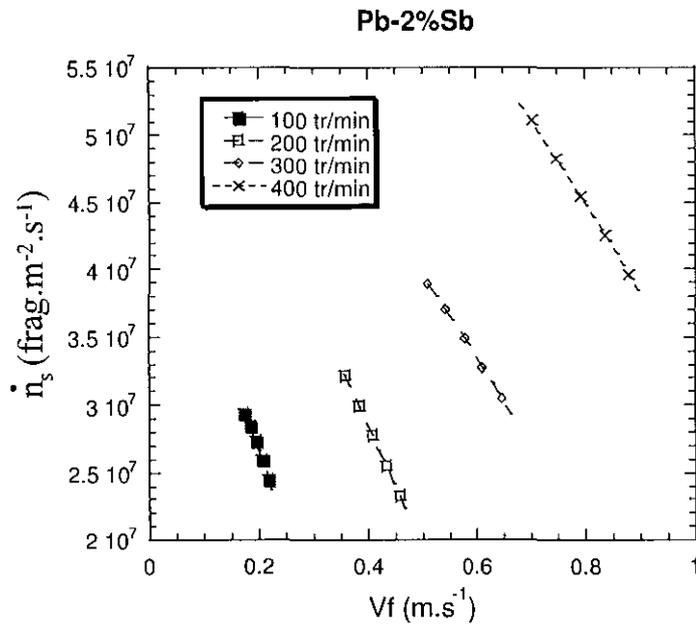


figure III. 8 : Evolution de la densité de flux de fragments détachés du front colonnaire en fonction de la vitesse instantanée du fluide devant le front colonnaire

La figure III 9 présente l'évolution de la densité moyenne de flux de fragments détachés du front colonnaire en fonction de la vitesse moyenne tangentielle du fluide devant le front colonnaire. Cette évolution peut être décrite par une corrélation linéaire.

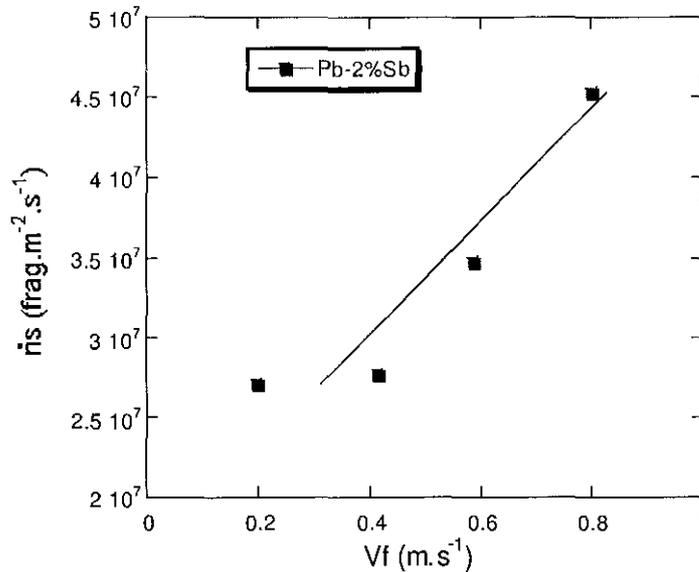


figure III 9 : Evolution de la densité moyenne de flux de fragments détachés du front colonnaire en fonction de la vitesse moyenne tangentielle du fluide devant le front colonnaire

Les conclusions que l'on peut faire sur cette partie sont les suivantes :

- Nous avons estimé l'ordre de grandeur des densités de flux de fragments qui se détachent du front colonnaire à environ **25 à 50 fragments par mm² et par seconde**.
- Nous avons montré l'influence de la convection sur la fragmentation. Sur ce point, on conclut que la densité moyenne de flux de fragments varie linéairement avec l'intensité de la convection.
- Plus on avance dans la solidification et moins on détache des fragments. En effet, les structures dendritiques deviennent de plus en plus lisses à cause du brassage imposé et génèrent ainsi moins de dendrites.

III - 3.2. CAS Pb-4%Sb :

III - 3.2.1. Resultats et discussions :

La figure III. 10 présente l'évolution au cours du temps de la densité volumique de grains. On constate que cette densité volumique mesurée croit en continu au cours du temps, rappelons que l'intervalle de temps de calcul, correspond à la phase ascendante de la densité surfacique de cristallites, comme pour le cas **Pb-2%Sb**.

La deuxième constatation concerne l'effet du brassage sur la densité volumique. On constate que l'augmentation de la vitesse de brassage conduit à l'augmentation de la densité volumique.

Ici aussi, comme nous l'avons déjà observé précédemment, la convection favorise la fragmentation.

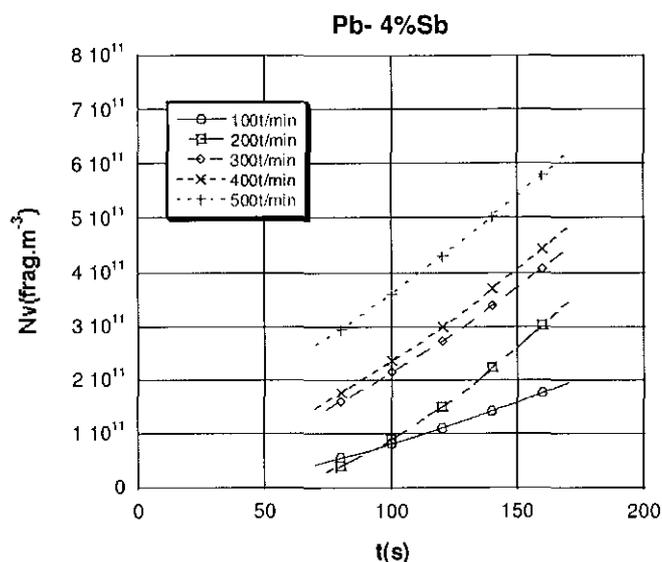


figure III. 10 :Evolution de la densité volumique au cours du temps

La densité volumique obtenue pour le **4%Sb** est différente en ordre de grandeur de celle obtenue pour du **2%Sb**. Par contre, dans son évolution, elle reste similaire à la précédente.

La figure III. 11 présente l'évolution au cours du temps de la dérivée temporelle de la densité volumique. On note à nouveau une évolution quasi linéaire de cette dérivée au cours du temps avec une pente identique pour toutes les vitesses de brassage hormis l'essai à 200 tr/min

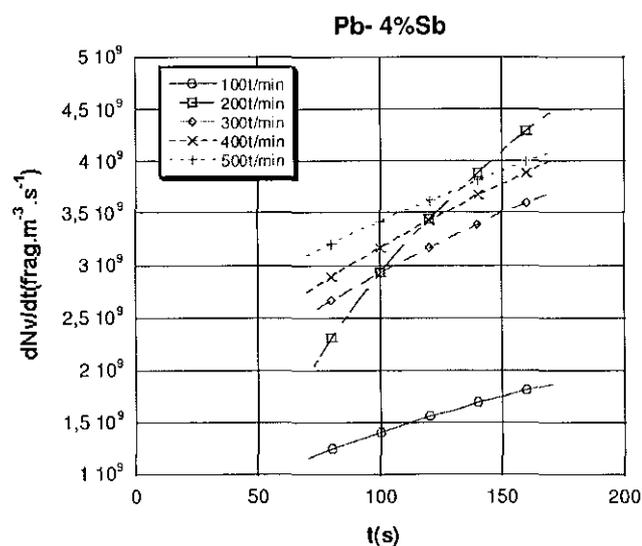


figure III. 11 : Evolution de la dérivée temporelle de la densité volumique des cristaux au cours du temps

La figure III. 12 présente l'évolution au cours du temps de la densité de flux de fragments. Comme on peut le constater, la densité de flux de fragments diminue au cours du temps comme dans le cas de l'alliage Pb-2%Sb, sauf pour l'essai à 200 tr/min.

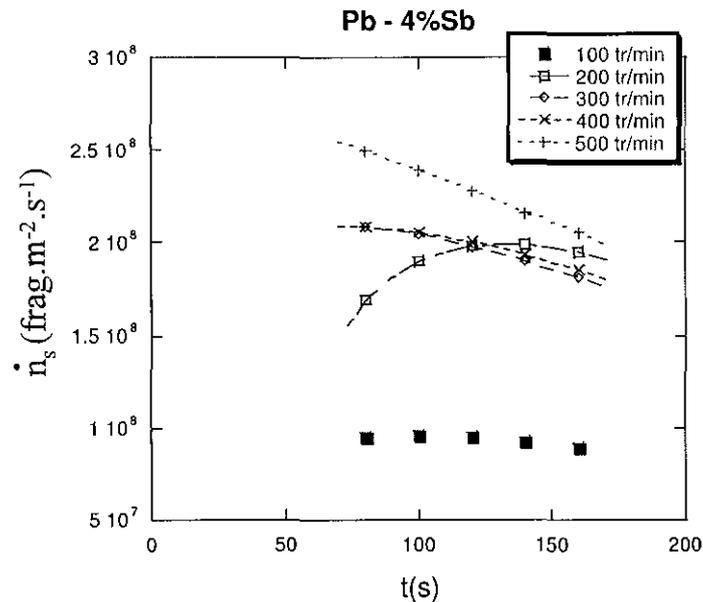


figure III. 12 : Evolution au cours du temps de la densité de flux de fragments détachés du front colonnaire

La figure III. 13 présente l'évolution de la densité de flux de fragments en fonction de la vitesse du fluide. Cette figure montre l'effet de la convection sur la fragmentation, comme le montre aussi bien la figure III. 14.

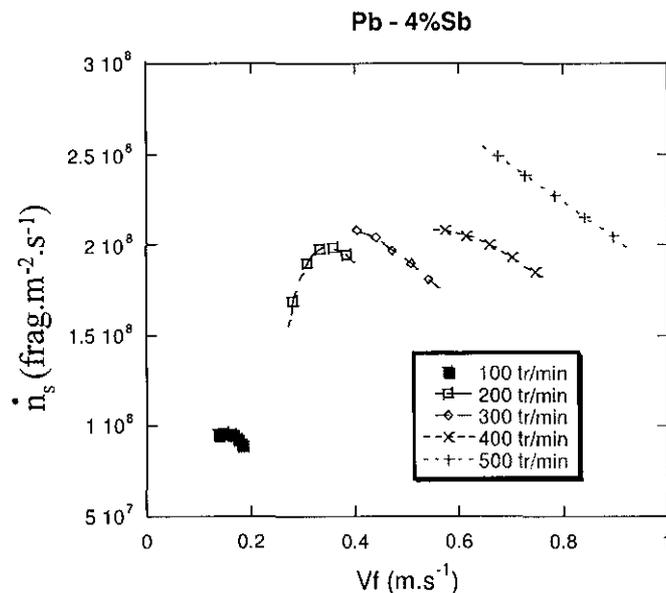


figure III. 13 : Evolution de la densité de flux de fragments détachés du front colonnaire en fonction de la vitesse du fluide devant le front colonnaire

Ces deux dernières figures donnent un ordre de grandeur de la densité de flux de fragments de 100 à 250 frag.mm⁻².s⁻¹, c'est à dire, 2 à 5 fois plus grand que pour l'alliage Pb-2%Sb.

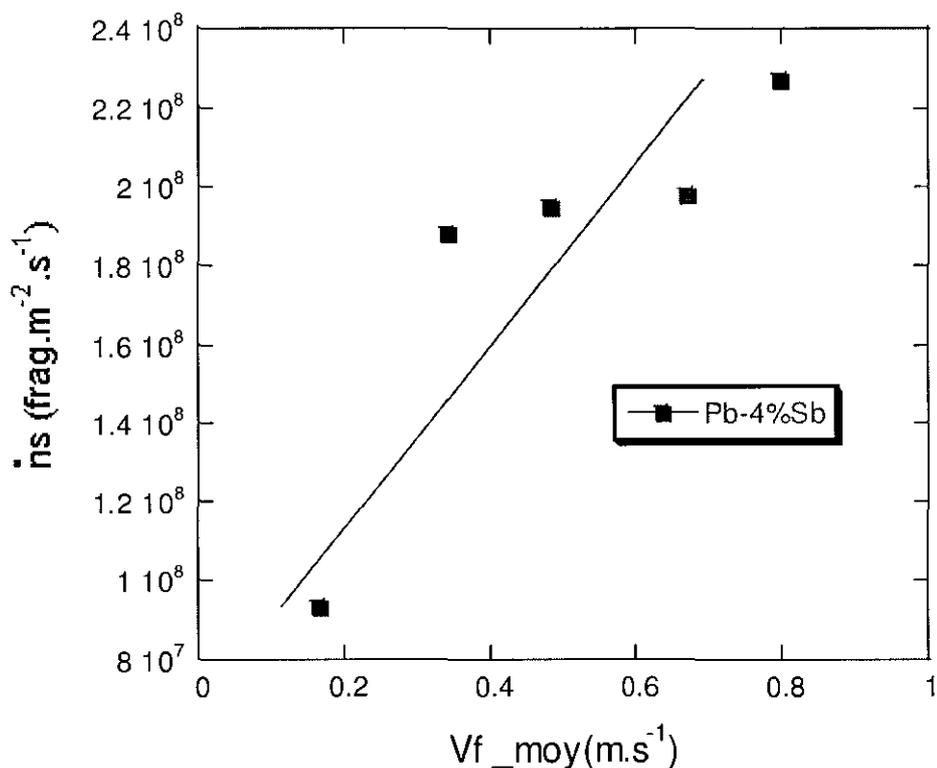


figure III. 14 : Evolution de la densité moyenne de flux de fragments détachés du front colonnaire en fonction de la vitesse moyenne tangentielle devant le front colonnaire

➤ *Synthèse des résultats obtenus et corrélations établies :*

La figure III. 15 regroupe les résultats relatifs à l'évolution de la densité moyenne de flux de fragments détachés du front colonnaire en fonction des vitesses de brassage et du fluide, pour les deux nuances d'alliage Pb-Sb étudiées. Elle met en lumière les ordres de grandeurs des densités de flux de fragments et montre clairement l'influence de la convection et de la charge en éléments d'alliages.

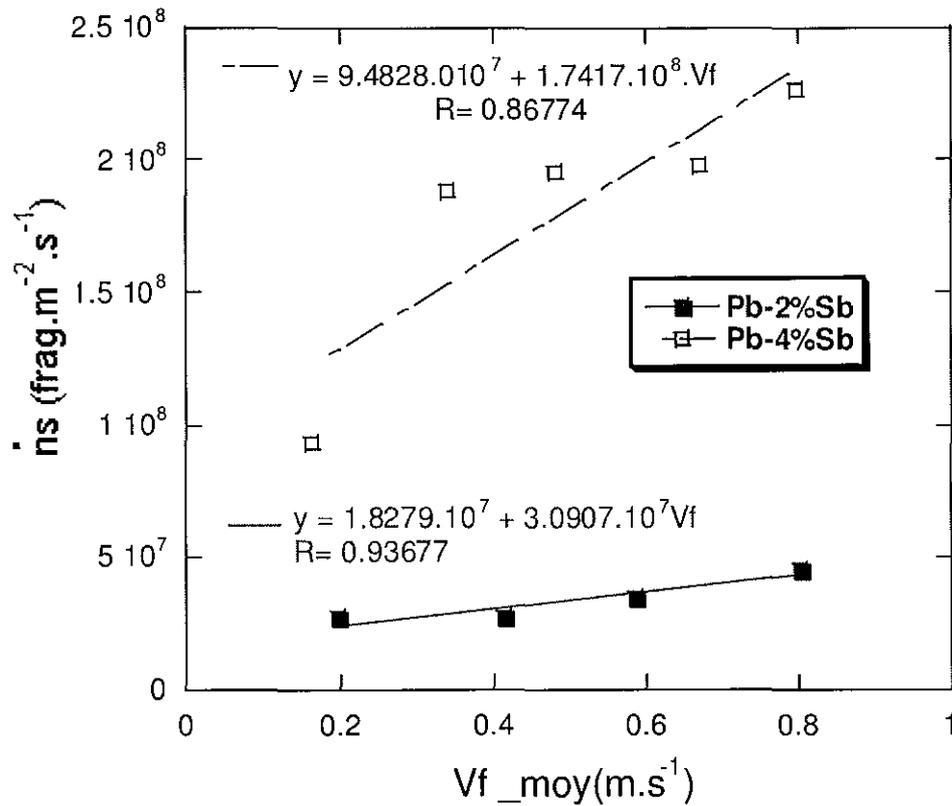


figure III. 15 : comparaison entre les densités moyennes de flux de fragments détachés du front pour les deux nuances de l'alliage étudié

Dans la deuxième partie de cette étude, nous avons réalisé des analyses numériques, avec le modèle diphasique moyenné, pour étudier entre autre l'évolution des grains équiaxes.

III - 3.3. Synthèses et conclusions sur l'exploitation des expériences de Moukassi :

Les calculs réalisés dans cette étude ont permis de remonter aux **densités de fragments cristallins** détachés du front colonnaire par unité de surface et unité de temps.

Nous avons mis en évidence les effets de la convection et de la teneur en éléments d'alliages sur la fragmentation. On a constaté en effet que la densité de flux de fragments détachés augmente lorsqu'on augmente l'intensité de la convection et lorsque la teneur en éléments d'alliages augmente.

Les différentes valeurs de la densité de flux de fragments que nous avons obtenues par calculs ou rapportées dans la littérature sont présentées dans la figure III. 16.

Il est visible sur cette figure qu'il existe une dispersion entre ces résultats, ceci n'est pas surprenant du fait des nombreux paramètres qui jouent un rôle, parmi les plus importants nous citerons :

- La composition nominale de l'alliage qui détermine avec les conditions thermiques, notamment le nombre de bras secondaires présents dans la zone pâteuse et la perméabilité de cette zone.
- L'intensité de la convection.

Par ailleurs, il ne faut pas perdre de vue que la variation de la vitesse d'avance du front colonnaire peut influencer la densité de flux de fragments cristallins détachés pendant la solidification.

Enfin, par comparaison avec les résultats de la littérature reportés sur la figure I.20, on retrouve les mêmes ordres de grandeurs de densités de flux de fragments obtenus par Moukassi pour la nuance Pb-2%Sb. Pour la nuance Pb-4%Sb, on trouve avec nos calculs, des densités de flux de fragments un peu plus grandes que celles obtenues par l'auteur. Dans notre étude, contrairement à Moukassi, nous avons tenu compte des variations au cours du temps du volume du bain liquide et de la surface du front colonnaire, ce qui peut expliquer cette différence.

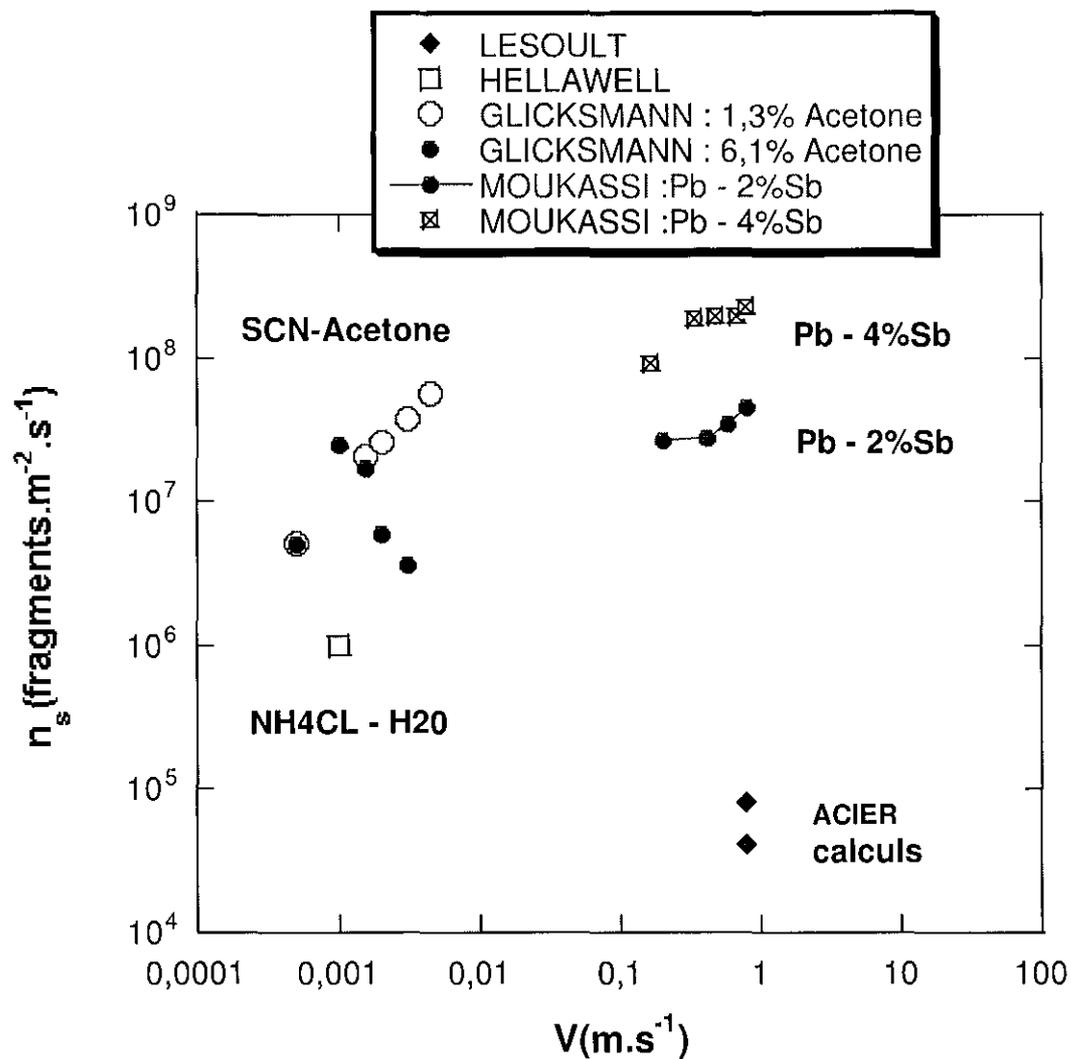


figure III. 16 : Principaux résultats relatifs à la densité de flux de fragments.

III - 4. APPLICATION DU MODELE DIPHASIQUE MOYENNE AUX EXPERIENCES DE BRASSAGE DE MOUKASSI :

Après avoir déterminé les densités de flux de fragments détachés du front colonnaire et estimé le rayon initial des fragments, il est maintenant possible d'appliquer le modèle diphasique moyenné présenté précédemment.

➤ **Données thermodynamiques des deux nuances d'alliage Pb-Sb :**

Le Tableau III.2 présente les propriétés thermophysiques utilisées pour nos calculs. Ces données proviennent de la thèse de Moukassi [3].

grandeurs physico-chimiques		Pb-2%Sb	Pb-4%Sb
Titre massique en antimoine (Sb) dans la phase liquide	w^{l0} (%)	2	4
Titre massique en antimoine (Sb) dans la phase solide qui arrive dans le puits liquide	w^{s0} (%)	0,7	1,4
Coefficient de partage	k	0,35	0,35
Pente de liquidus	m (K % ⁻¹)	-6,96	-6,96
Coefficient de diffusion de l'antimoine (Sb) dans la phase liquide	D^l (m ² s ⁻¹)	2.10 ⁻⁹	2.10 ⁻⁹
Coefficient de diffusion de l'antimoine (Sb) dans la phase solide	D^s (m ² s ⁻¹)	10 ⁻¹²	10 ⁻¹²
Température de liquidus	T_L (°C)	313	300
Température de fusion du Pb pur	T_f (°C)	361	361
Chaleur latente de fusion massique	L (J kg ⁻¹)	23073,2	23073,2
Capacité thermique massique	c_p (J kg ⁻¹ K ⁻¹)	130	130
masse volumique du plomb liquide	ρ^l (kg m ⁻³)	10150	10150

Tableau III.2 : données thermodynamiques des deux nuances d'alliages Pb-Sb

Pour réaliser des calculs numériques sur les essais expérimentaux de Moukassi présentés précédemment (figure I. 6 à figure I. 8), un code de calcul a été développé à partir de l'algorithme de calcul présenté à la figure III. 4. Les résultats numériques obtenus ont pour but de confronter les résultats du modèle diphasique moyenné avec les résultats expérimentaux et pour étudier et comprendre l'influence des principaux paramètres physico-chimiques et opératoires qui contrôlent le déroulement de ces expériences de solidification en brassage mécanique étudiées par l'auteur.

Dans la première partie de cette étude numérique, nous avons défini un cas de référence qui correspond à un des essais, obtenu avec une vitesse de rotation donnée et une nuance d'alliage donnée. Les autres données nécessaires dans le code de calcul sur ce cas de référence ont été imposées et définissent ainsi les conditions initiales référentielles pour une étude paramétrique réalisée dans la deuxième partie de cette étude. L'étude paramétrique obtenue a été réalisée dans le but d'étudier chacun des paramètres principaux qui peuvent influencer le déroulement de ces expériences.

III - 4.1. Définition d'un cas de référence pour la nuance d'alliage Pb- 4% Sb :

Le cas de référence correspond à l'essai simulé avec une vitesse de rotation de 500 tr.min^{-1} , une surchauffe initiale de 7°C , une taille initiale de fragments cristallins de $25 \mu\text{m}$, une densité de flux de fragments cristallins de $2,35.10^8 \text{ fragments.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ et une température des pointes dendritiques colonnaires (T_p) dépendante de la convection. La surchauffe initiale est choisie arbitrairement dans une gamme de 5 à 25°C où se situe la surchauffe initiale dans cet essai, la taille initiale de $25 \mu\text{m}$ est choisie dans la gamme des tailles de 20 à $45 \mu\text{m}$ qui est la gamme estimée pour les tailles initiales de fragments pour cette nuance d'alliage (voir figure I. 21), la densité de flux de fragments représente la densité de flux moyenne obtenue par le calcul lorsque la vitesse de rotation est de 500 tr.min^{-1} (voir figure III. 15) et enfin, la température des pointes dendritiques colonnaires est calculée en fonction de la convection (voir figure III. 3).

Le choix de cet essai à 500 tr/min est dicté par le fait que des écarts importants dans la variation de la fraction de solide en fonction de la température existent entre les résultats expérimentaux et les résultats obtenus par le modèle théorique de bras de levier et par notre modèle moyenné, par comparaison aux quatre autres résultats des essais étudiés (100 à 400 tr.min^{-1}) pour cette nuance d'alliage Pb-4%Sb.

La figure III 17 (a) présente l'évolution au cours du temps de la température obtenue par les mesures et par le modèle diphasique moyenné. Les résultats numériques montrent que la température suit deux phases d'évolution au cours du temps. Dans la première phase située dans les premiers cinquante secondes, le puits liquide se trouve dans une situation de surchauffe. Dans ce cas, en plus du flux de chaleur évacué à travers le front colonnaire, les fragments injectés se trouvent en situation de refusion (voir figure III 17 (b)) et consomment ainsi de l'énergie. Ceci explique l'abaissement rapide de la température dans le puits liquide. Dans la deuxième phase obtenue après l'évacuation de la surchauffe, les fragments injectés dans le puits liquide se trouvent en situation de croissance et libèrent de la chaleur latente, ce qui explique cette nouvelle évolution de la température obtenue dans cette phase.

La figure III 17 (b) montre que la croissance des grains équiaxes dans un bain liquide suit trois phases d'évolution. Une première phase de refusion, suivie d'une phase durant laquelle la taille moyenne des grains augmente rapidement. Cette deuxième phase est due à l'apport de nouveaux fragments qui ne refondent plus. Enfin, une phase où un régime d'équilibre s'installe entre la croissance et l'injection continue de fragments.

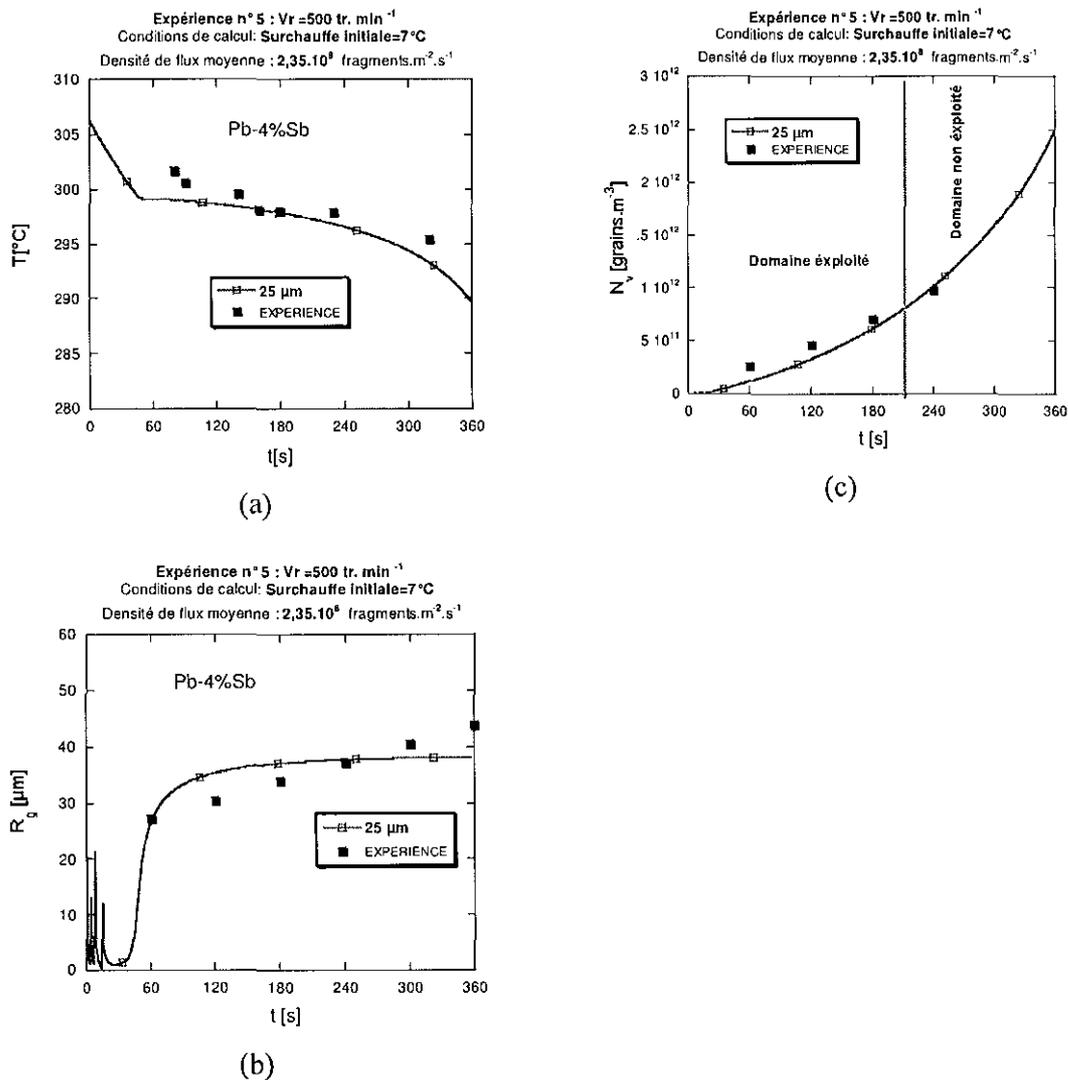


figure III 17 : Evolution au cours du temps de la température (a), du rayon (b) et de la densité volumique de grains (c)

Les figures III.19 (a-1) et (a-2) présentent l'évolution au cours du temps de la fraction de solide. Tant que le bain liquide est surchauffé (les premières 40 secondes), les calculs montrent (voir figure III 18 a-2) que la fraction de solide obtenue est négligeable mais non nulle (de

l'ordre de 10^{-5}) avec la densité moyenne de flux de fragments utilisée. Ce résultat permet de conclure que des grains peuvent survivre dans les zones surchauffées.

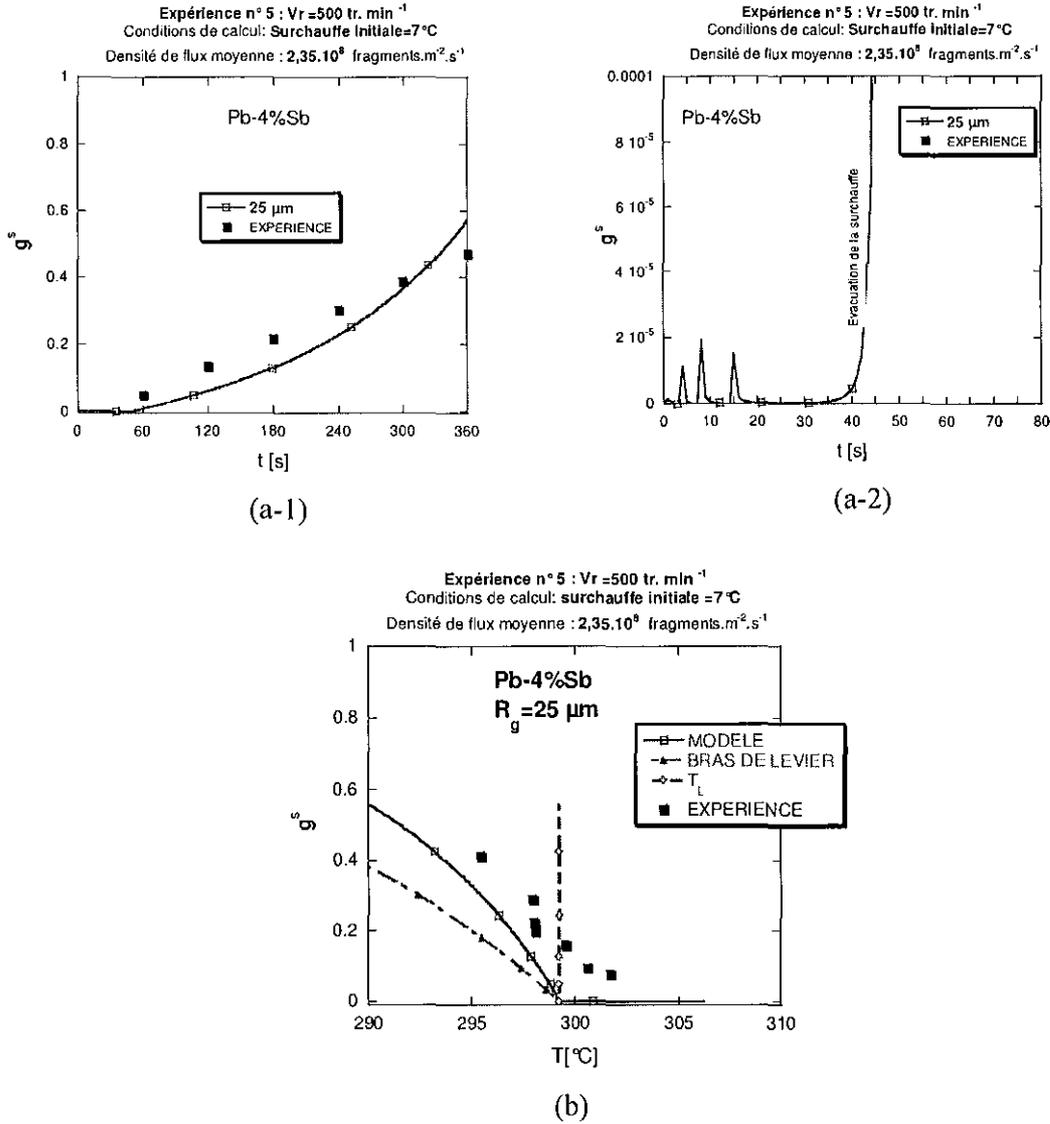


figure III 18 : Evolution au cours du temps de la fraction solide (a-1,a-2) et évolution de la fraction solide en fonction de la température (b)

La figure III 18 (b) présente l'évolution de la fraction de solide en fonction de la température obtenue par l'expérience, par le modèle diphasique moyenné et par le modèle des bras de levier en considérant l'équilibre entre les phases liquide et solide et en considérant que le titre massique moyen (\bar{w}_{moy}) constant est égal à 4%. Les résultats expérimentaux ont montré que la fraction de solide mesurée quand le bain liquide est surchauffé n'était pas négligeable. Ceci sous-entend que des grains existent et survivent pendant cette période, contrairement au modèle

des bras de levier qui considère qu'au-dessus de la température de liquidus, la fraction de solide est nulle. Pendant la phase de surchauffe, les résultats obtenus avec le modèle diphasique moyenné présentent des fractions de solide non nulles mais négligeables par rapport à celles mesurées. Après la phase d'évacuation de la surchauffe, la fraction de solide obtenue par le modèle diphasique moyenné est plutôt proche des résultats expérimentaux. Les valeurs de la fraction de solide calculées par le modèle diphasique se situent au-dessus de celles obtenues par le modèle des bras de levier. Ce résultat s'explique par le fait que les nouveaux fragments injectés ne vont plus refondre quand la température passera en dessous du liquidus, ce qui conduit à des fractions de solide au-dessus de la valeur d'équilibre relative à la composition initiale du bain liquide.

La figure III 19 présente les évolutions au cours du temps des titres massiques de chaque phase et du titre massique moyen. On constate que, dès l'instant où les grains ne refondent plus, l'injection en continu de fragments cristallins pauvres en éléments d'alliage appauvrit le puits liquide. Cet appauvrissement est d'autant plus important que la densité de flux utilisée est forte (500 tr/min).

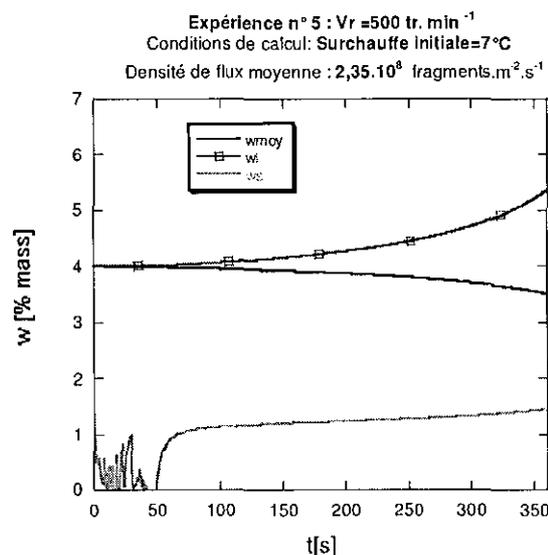


figure III 19 : Evolution des titres massiques au cours du temps dans le puits liquide

En conclusion, les premiers résultats obtenus avec le modèle montrent que pour un rayon initial de fragments cristallins de $25 \mu\text{m}$ et pour une densité moyenne de flux de fragments $2,35 \cdot 10^8 \text{ fragments.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ injectés en continu dans le puits liquide, on obtient des tailles de grains et des fractions de solide voisines de celles mesurées expérimentalement. Cette densité de flux de fragments correspond à la valeur moyenne donnée par la corrélation (voir figure III. 15).

Cependant, dans les zones en surchauffe, les fractions de solide calculées restent négligeables par rapport à celles mesurées expérimentalement.

Après avoir défini et étudié un cas de référence, nous avons réalisé dans une deuxième, une étude paramétrique dans le but d'améliorer la correspondance entre les calculs et l'expérience. Plusieurs paramètres physiques que nous avons définis comme des données d'entrées dans le code de calcul ont été étudiés.

III - 4.2. Etude paramétrique pour la nuance Pb-4%Sb :

Nous avons mené une étude numérique de façon à caractériser l'influence des paramètres suivants :

- la surfusion aux pointes de dendrites colonnaires,
- la taille initiale de fragments cristallins injectés dans le puits liquide,
- la surchauffe initiale : $(T - T_L)$,
- la densité moyenne de flux de fragments injectés dans le puits liquide,
- le temps d'injection de fragments.

III - 4.2.1. Influence de la surfusion aux pointes de dendrites colonnaires :

La figure III 20 (a) présente la comparaison entre deux façons de calculer l'évolution au cours du temps de la température par le modèle : dans le cas où la température des pointes de dendrites colonnaires est dépendante ou indépendante de la convection. Cette figure montre qu'après l'évacuation de la surchauffe dans le puits liquide, l'abaissement de la température est plus important lorsque la température des pointes dendritiques colonnaires est calculée indépendamment de la convection. En effet, dans ce cas, la surfusion aux pointes de dendrites est plus grande (voir figure III. 3) et conduit ainsi à une température des pointes de dendrites colonnaires (T_p) plus faible. Par conséquent, le transfert thermique entre le liquide et le solide devant le front colonnaire est plus important. La figure III 20 (b) montre que la surfusion du bain liquide est aussi plus importante lorsqu'on ne tient pas compte de l'effet de la convection dans le calcul de T_p que dans le cas contraire. Par conséquent, la croissance des grains équiaxes (voir figure III 20 (c)) sera plus forte et il en va de même pour le titre massique dans la phase liquide (figure III 20 (d)). Cette évolution du titre massique de la phase liquide peut expliquer l'abaissement important de la température (voir figure III 20 (a)).

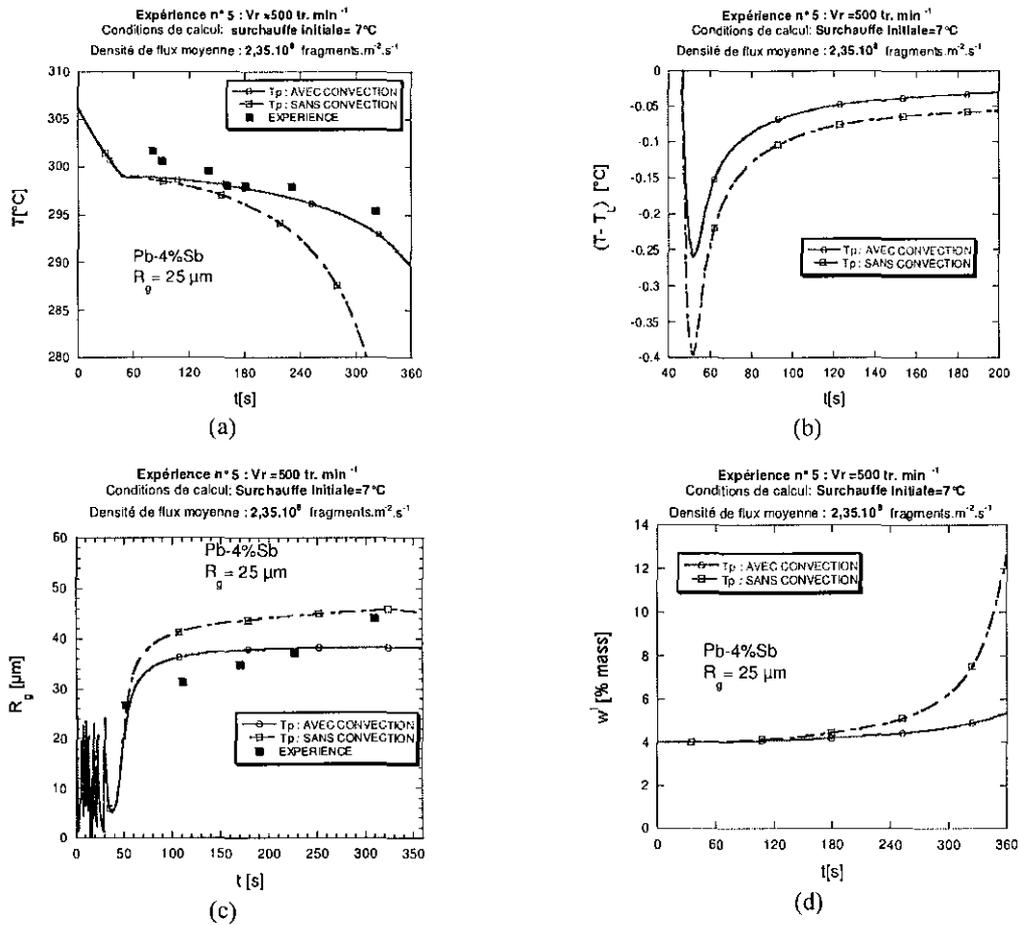


figure III 20 : Evolution au cours du temps de la température (a), de la surfusion (b), du rayon moyen (c) et du titre massique de la phase liquide (d)

III - 4.2.2. Influence de la taille initiale de fragments cristallins :

La figure III. 21 (a) présente l'évolution au cours du temps de la température du puits liquide, obtenue par le calcul pour trois rayons initiaux de 20 , 25 et $30 \mu\text{m}$, les autres données d'entrées du calcul étant celles du cas de référence précédent. La figure III. 21 (a) montre que la surchauffe est évacuée plus rapidement quand la taille initiale des fragments augmente. En effet, l'énergie nécessaire à la refusion complète des cristallites est proportionnelle à la masse de solide. Autrement dit, l'abaissement de la température du bain liquide est plus important lorsqu'on refond une masse plus grande de solide. Une fois la surchauffe évacuée, la taille des fragments est encore un paramètre très influent sur la variation de la température. Cette dernière diminue plus rapidement lorsque le rayon des fragments introduits est plus grand. L'évolution de la taille des grains en fonction du temps présentée sur la figure III. 21 (b) suit trois phases. Une première phase de refusion, suivie d'une phase durant laquelle la taille

moyenne des cristallites augmente rapidement. Cette phase est due à l'apport de nouveaux fragments qui ne refondent plus. Enfin, une phase où un régime d'équilibre s'installe entre une croissance et l'injection continue de fragments. La valeur asymptotique du rayon moyen des grains dépend de la taille des fragments injectés. Pour montrer l'influence de l'injection sur la taille des grains, nous avons comparé les masses de solide formées par unité de volume et unité de temps, obtenues par le modèle diphasique moyenné et par un modèle qui suppose une évolution stationnaire de la taille moyenne du grain équiaxe dans la zone d'équilibre entre l'injection et la croissance. Ce modèle est le suivant :

La fraction solide s'écrit comme suit :

$$g^s = N_v \left(\frac{4}{3} \pi R_g^3 \right) \quad \text{III.9}$$

$$d'où : \frac{dg^s}{dt} = \left(\frac{4}{3} \pi R_g^3 \right) \frac{dN_v}{dt} + N_v (4\pi R_g^2) \frac{dR_g}{dt} \quad \text{III.10}$$

Avec cette hypothèse de l'évolution stationnaire de la taille des grains, on écrit :

$$\frac{dR_g}{dt} = 0 \quad \text{III.11}$$

L'équation III.10 s'écrit alors comme suit :

$$\frac{dg^s}{dt} = \left(\frac{4}{3} \pi R_g^3 \right) \frac{dN_v}{dt} \quad \text{III.12}$$

La combinaison entre les équations III.2.5 et III.12 permet d'écrire que :

$$V \rho^s \left(\frac{4}{3} \pi R_g^3 \right) \frac{dN_v}{dt} = \bar{\Gamma}_s V + \dot{n}_s S \rho^s V_s^0 \quad \text{III.13}$$

Enfin, la combinaison entre les équations III.1.7 et III.13 permet d'écrire la relation suivante :

$$\bar{\Gamma}_s = \frac{4}{3} \frac{\rho^s \dot{n}_s S}{\nu} \pi (R_g^3 - R_{fR}^3) \quad \text{III.14}$$

La figure III 22 (b) montre que lorsque le rayon moyen des grains atteint un palier à 38 μm , les deux calculs aboutissent à la même masse de solide apportée par unité de volume et unité de temps dans le volume global du bain liquide. On conclut que la valeur asymptotique du rayon moyen des grains dépend plutôt de l'injection que de la croissance.

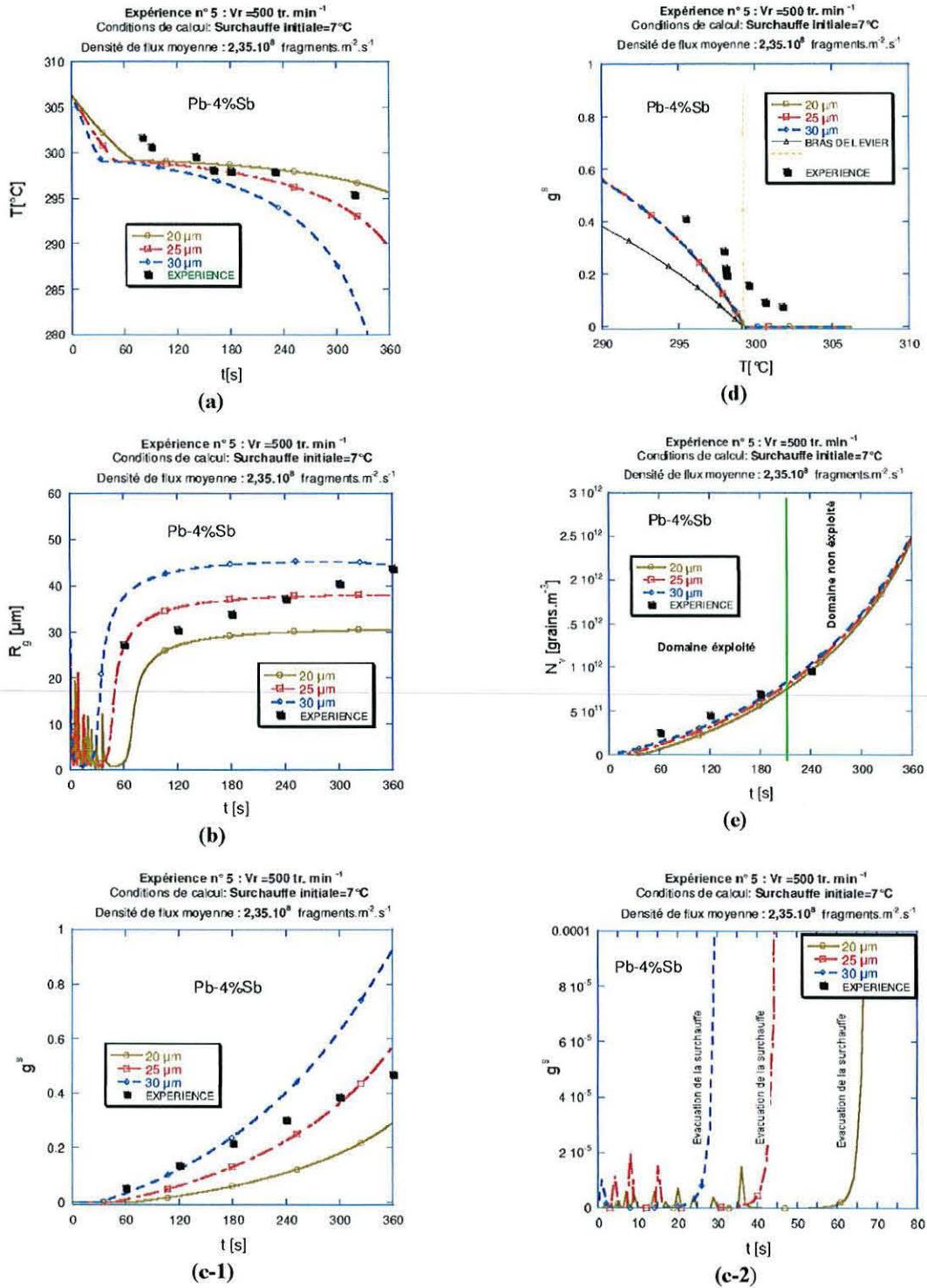


figure III. 21 : Evolution au cours du temps de la température (a), du rayon (b), de la fraction solide (c-1,c-2) et de densité volumique (c) ,évolution de la fraction solide en fonction de la température (d)

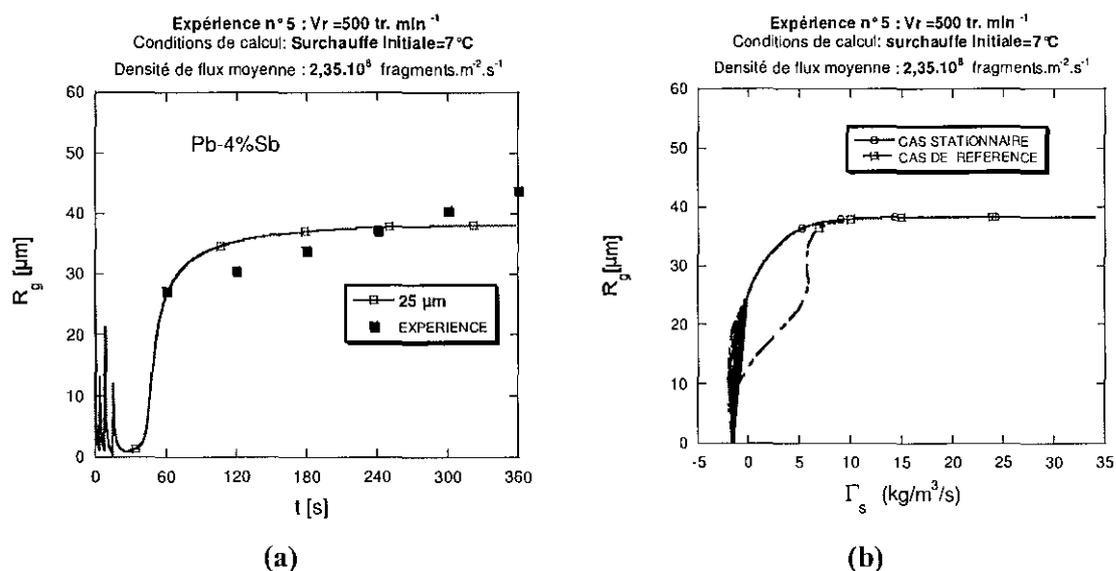


figure III 22 : Evolution de la masse de solide par unité de volume et unité de temps en fonction des rayons des grains (b)

Les figures III.22 (c-1) et (c-2) présentent l'évolution au cours du temps de la fraction de solide. Tant que le bain liquide est surchauffé, les calculs montrent (voir figure III. 21 c-2) que pour la densité moyenne de flux de fragments utilisée, les fractions de solide obtenues pour les trois rayons sont négligeables mais non nulles (de l'ordre de 10^{-5}).

La figure III. 21 (e) présente l'évolution au cours du temps de la densité volumique de grains, obtenue par le calcul et par l'expérience. Elle montre qu'avec la densité moyenne de flux de fragments de $2,35.10^8$ fragments.m⁻².s⁻¹, utilisée comme une donnée d'entrée dans le code de calcul, on retrouve les résultats expérimentaux.

La figure III. 21 (d) présente l'évolution de la fraction de solide en fonction de la température obtenue par l'expérience, par le modèle diphasique moyenné et par le modèle des bras de levier en considérant l'équilibre entre les phases liquide et solide et en considérant que le titre massique moyen (\bar{w}_{moy}) constant est égal à 4%. Les résultats du modèle moyenné pour les trois rayons étudiés montrent qu'avec les hypothèses imposées jusqu'à maintenant, il est difficile de retrouver les ordres des fractions de solide dans les zones en surchauffe.

En conclusion, les premiers résultats obtenus avec le calcul montrent que dans la gamme de rayons initiaux de fragments cristallins de 20 à 30 μm et pour une densité moyenne de flux de fragments $2,35.10^8$ fragments.m⁻².s⁻¹ injectés en continu dans le puits liquide, on obtient des tailles de grains et des fractions de solide voisines de celles mesurées expérimentalement. Cette densité de flux de fragments correspond à la valeur moyenne donnée par la corrélation (voir figure III. 15). Dans les zones en surchauffe, les fractions de solide calculées sont non nulles mais négligeables par rapport à celles mesurées expérimentalement.

III - 4.2.3. Influence de la surchauffe initiale :

Pour étudier l'influence de la surchauffe initiale, nous avons réalisé quatre calculs pour des valeurs de la surchauffe de 7, 15, 20 et 25°C. La figure III. 23 (a) montre que la température du puits liquide évolue suivant la même pente dans la zone surchauffée, quelle que soit la valeur de la surchauffe initiale utilisée. Cependant, le temps d'évacuation total de la surchauffe dans le puits liquide est une fonction croissante de la surchauffe. Au moment où la surchauffe est complètement évacuée du puits liquide, les cristallites commencent à croître (voir figure III. 23 (b)). Dans cette zone en situation de surfusion, on constate que la taille des grains est la même, quelle que soit la valeur de la surchauffe initiale utilisée. Ainsi la surchauffe influence seulement l'instant du début de la phase de croissance des grains.

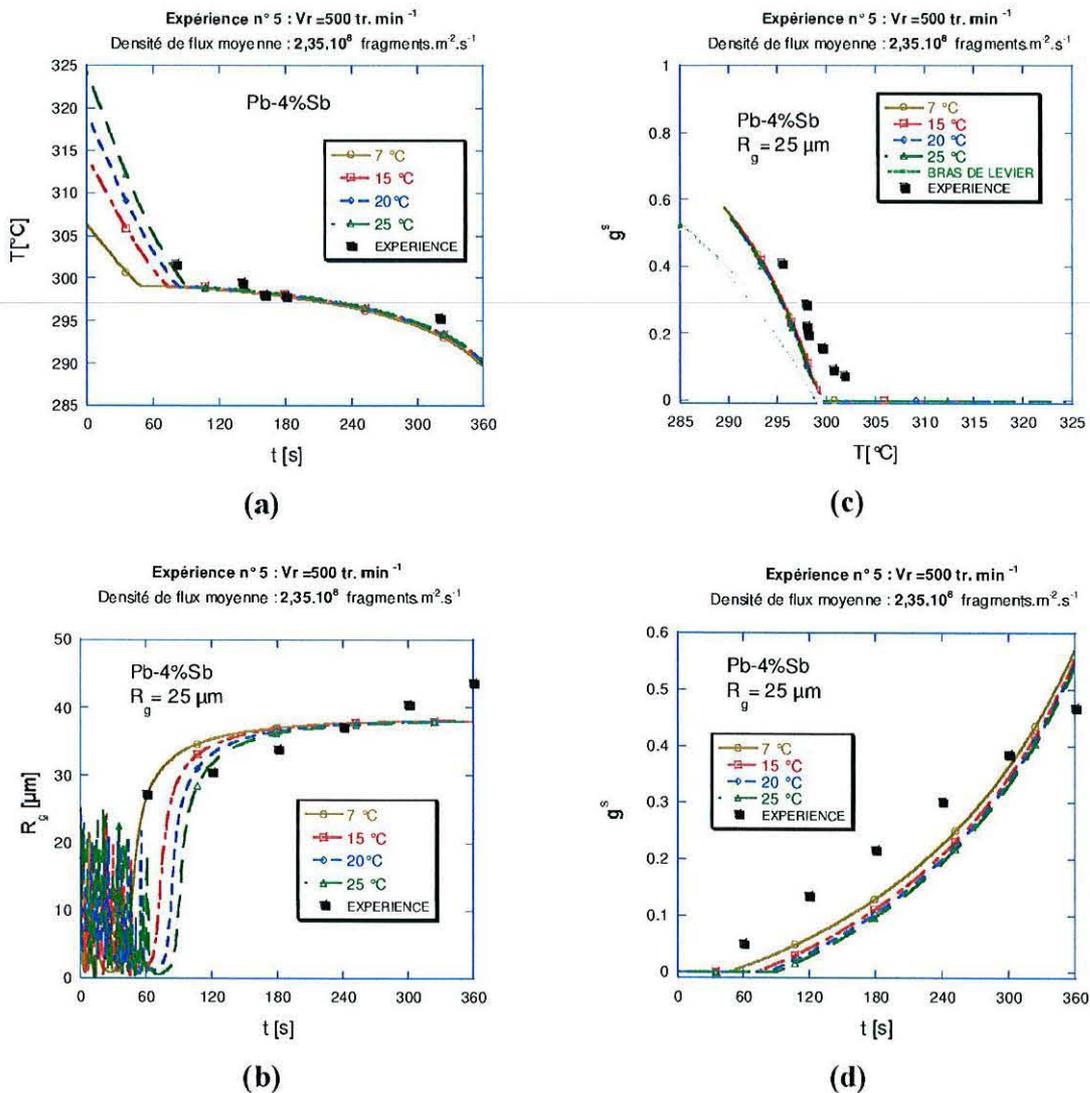


figure III. 23 :Influence de la surchauffe sur l'évolution de population de cristallites dans le liquide

Le fait que la surchauffe n'entraîne qu'un décalage dans le temps des courbes de tailles de grains et de fraction de solide, s'explique par la quasi-complète refusion des fragments pendant la période où le bain liquide est surchauffé. La variation de composition du bain liquide due à cette refusion étant faible, la valeur initiale de la surchauffe ne modifie ni la fraction de solide, ni la composition moyenne du bain liquide.

III - 4.2.4. Influence de la densité volumique initiale de cristallites dans le puits liquide :

Les fractions de solide obtenues expérimentalement dans les zones surchauffées laissent à penser qu'avec les tailles de grains mesurées dans ces endroits, les densités de flux de fragments qui se détachent initialement sont plus importantes que celles identifiées. En partant de cette réflexion, il est possible d'imaginer qu'une quantité importante de fragments pourrait se détacher de la structure dendritique colonnaire au démarrage de la solidification. Nous avons réalisé des simulations numériques avec l'hypothèse qu'en plus de la densité moyenne de flux de fragments générés continuellement par les structures colonnaires, une densité volumique imposée à 10^{12} grains.m⁻³ se trouve initialement déjà dans le puits liquide. Les résultats de calculs obtenus avec cette hypothèse sont présentés sur les figures III.25 (a), (b), (c), (d), (e) et (f). La figure III. 24 (a) montre que si cette densité initiale est générée par la zone colonnaire, la surchauffe sera évacuée rapidement. D'autre part, la figure III. 24 (b) montre que la refusion de cette phase solide initiale que nous supposons détachée du front colonnaire à une composition moyenne en équilibre avec la phase liquide ($\bar{w}^{s^{ini}} = k\bar{w}^{l^*}$) pauvre en élément de soluté, conduit à l'appauvrissement du bain liquide. Par ailleurs, les figures III 25 (c) et (d) montrent que les tailles de grains et les fractions de solide équivalentes obtenues, sont proches des résultats expérimentaux. Enfin, la figure III. 24 (e) montre qu'il est possible d'obtenir dans les zones surchauffées des fractions solides voisines de celles obtenues expérimentalement.

La figure III. 24 (f) d'évolution au cours du temps de la densité volumique présente l'écart de 10^{12} grains.m⁻³ entre les mesures et le calcul. En effet, avec cette hypothèse qu'une densité de grains importante est présente initialement dans le bain liquide, on obtient au cours temps des densités volumiques très grandes par rapport aux mesures.

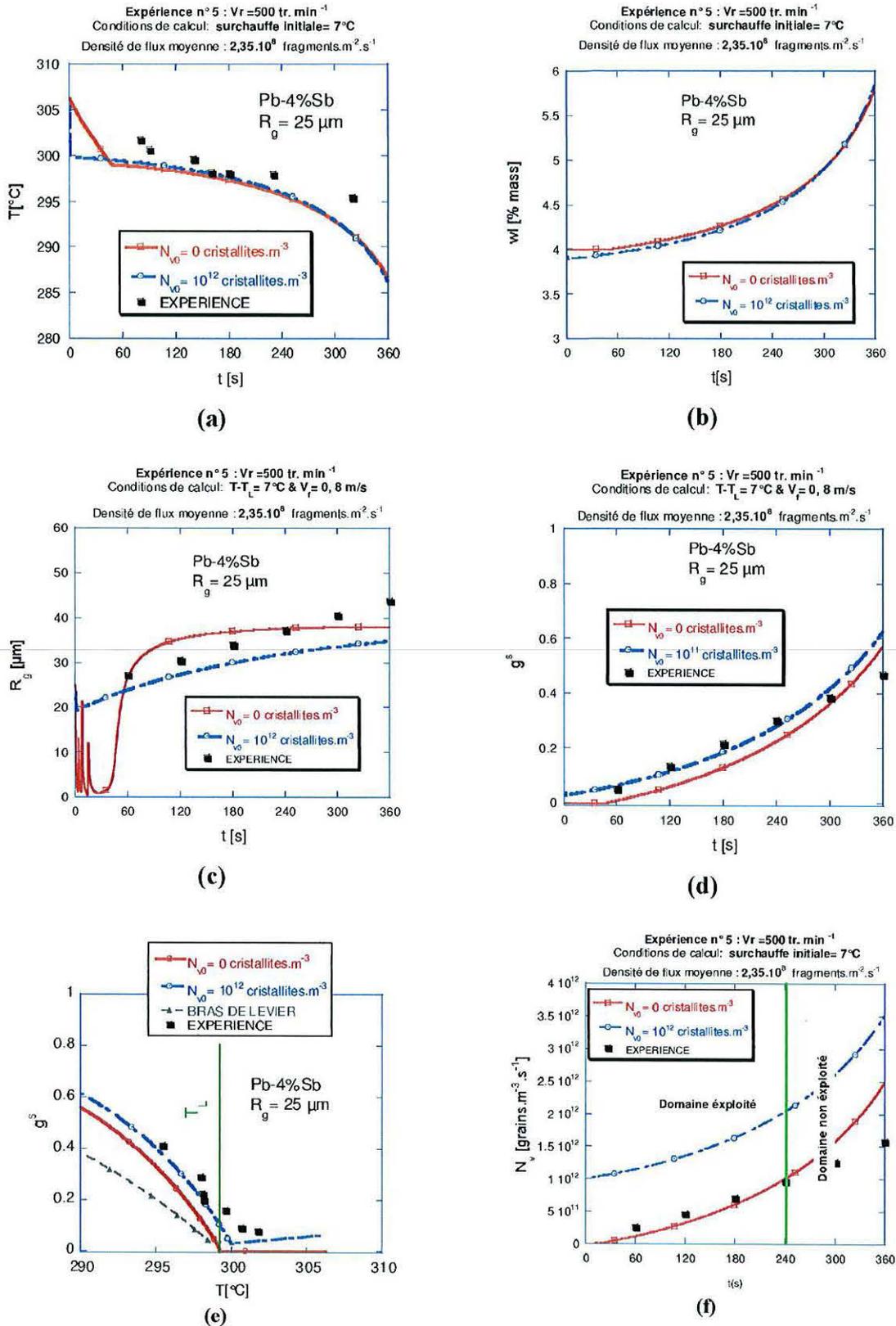


figure III. 24 : Influence de la présence d'une densité volumique initiale de cristallites dans le puits liquide

III - 4.2.5. Influence du temps d'injection de fragments dans le puits liquide :

Le dernier paramètre étudié concerne le temps total d'injection de fragments dans le puits liquide. Dans ce calcul, nous sommes partis de l'hypothèse qu'initialement, une quantité de grains est présente dans le liquide. De plus, au lieu d'une injection continue de fragments, nous arrêtons l'injection à un instant donné qui correspond à l'instant où la densité surfacique de cristallites obtenue expérimentalement décroît. La figure III. 25 (c) montre qu'à partir de l'instant 240 s, le temps où l'injection est arrêtée pour cette simulation, la densité volumique de grains reste constante. A partir de cet instant, le rayon moyen des grains augmente un peu plus rapidement que dans le cas des essais précédent (voir figure III. 25 (a)). En effet, après l'arrêt de l'injection, c'est seulement la cinétique qui contrôle la croissance des grains et la taille de ces derniers. D'autre part, cette nouvelle évolution de loi d'injection va influencer sur la fraction de solide (voir les figures III.26 (b) et (d)). La fraction de solide est légèrement inférieure aux valeurs calculées dans le cas précédent. La croissance ne compense donc pas complètement la masse de solide apportée par une injection de fragments en continu.

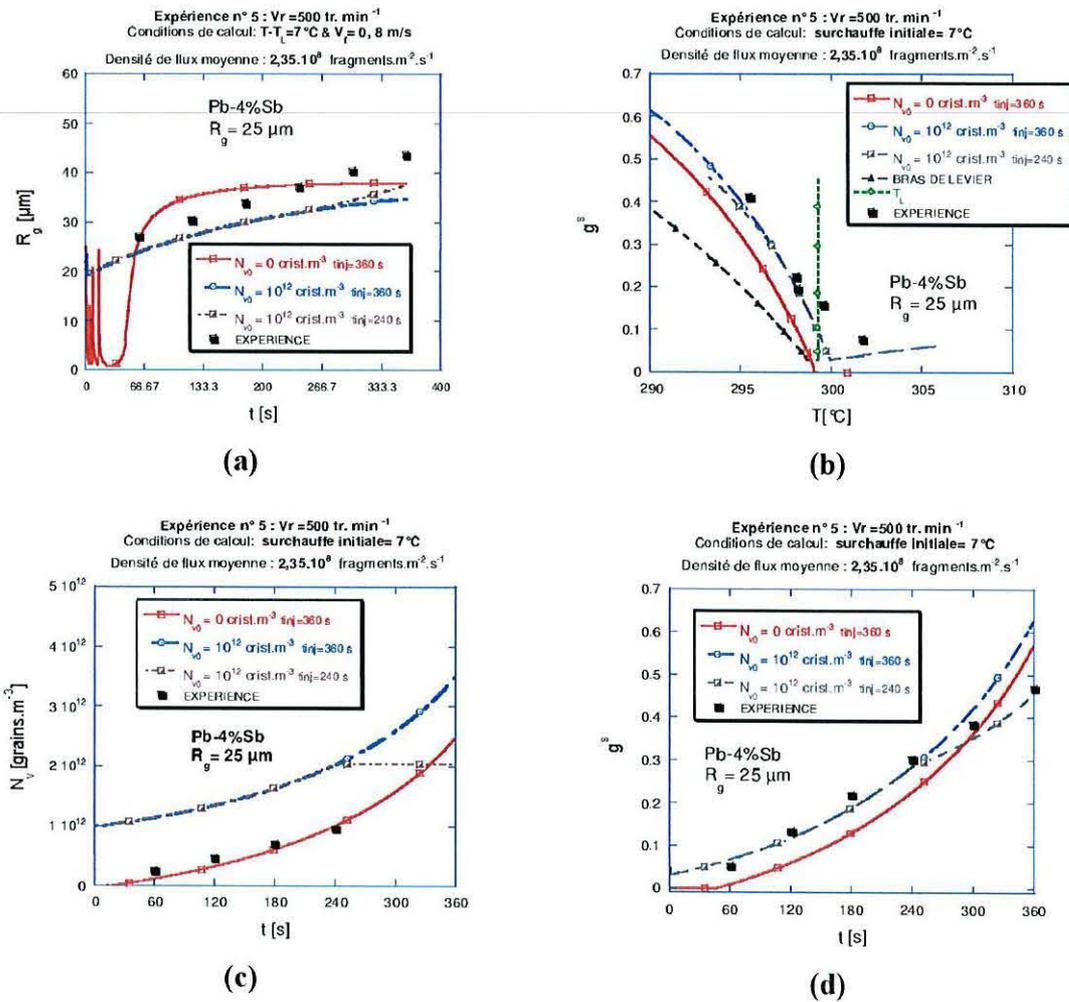


figure III. 25 : Influence du temps d'injection de fragments cristallins dans le puits liquide

□ **Influence de la sédimentation des grains :**

L'analyse numérique réalisée a été obtenue avec l'hypothèse que la sédimentation des grains est négligeable. Pour justifier cette hypothèse, nous avons calculé la vitesse de sédimentation des grains dans le bain liquide de l'alliage Pb-Sb. Cette vitesse de sédimentation résulte de la somme des forces de gravité et de traînée (voir chapitre IV).

$$\bar{U}_s = \frac{4}{3} \frac{(2R_g)^2 g' (\rho^s - \rho^l) \bar{g}}{C_d R_e \mu^l}$$

Les variables C_d et R_e sont données par les relations II.33.2 et II.33.3.

La figure III 26 montre que les vitesses de sédimentation obtenues sont faibles, un grain d'une taille de 40 μm parcourera au bout de 100 secondes une distance d'environ 5 cm au maximum avec cette vitesse. On conclut que le fait que la sédimentation n'a pas été prise en compte dans notre étude numérique n'aura pas d'incidence majeure sur les résultats.

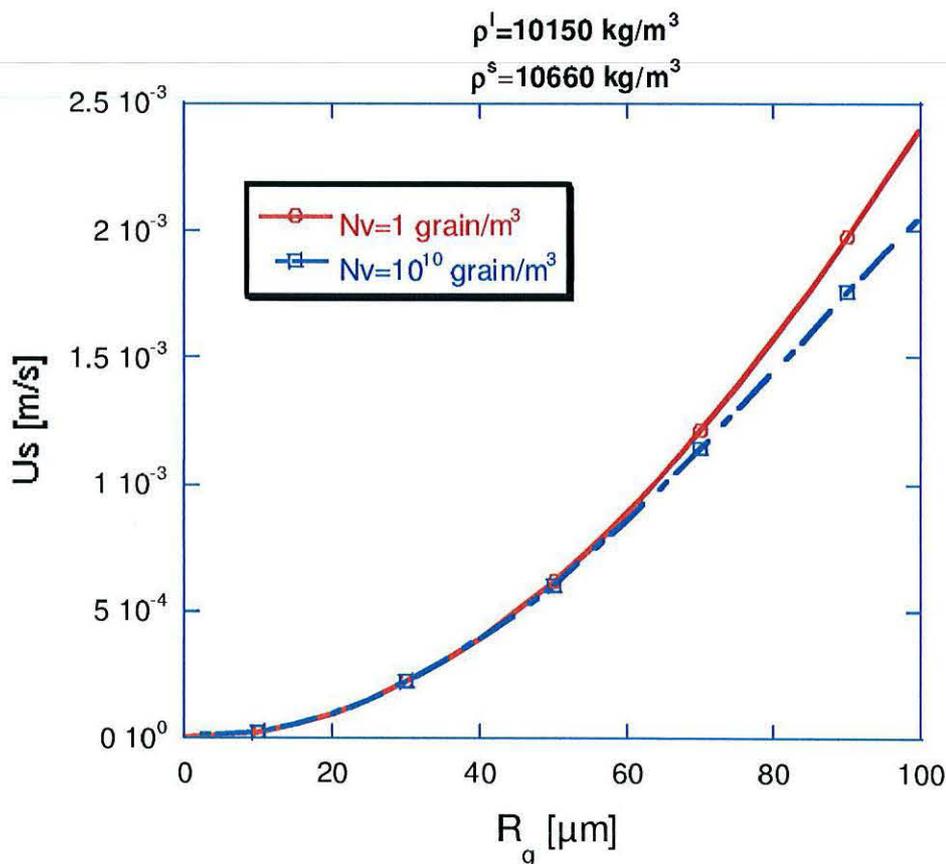


figure III 26 : Evolution de la vitesse de sédimentation en fonction de la taille des grains.

III - 4.3. Etude paramétrique sur la nuance Pb-2%Sb :

La deuxième nuance d'alliage étudié expérimentalement par Moukassi est le Pb-2%Sb. Dans cette partie, une analyse numérique similaire à la celle réalisée sur la nuance Pb-4%Sb a été effectuée.

Cette fois l'essai de référence est défini par une vitesse de rotation à 400 tr/min, une taille de 45 μm , une surchauffe initiale de 14°C, une densité de flux de fragments cristallins de $4,5.10^7$ fragments. $\text{m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ qui correspond à la densité de flux moyenne obtenue à 400 tr/min et une température des pointes de dendrites colonnaires (T_p) dépendant de la convection.

III - 4.3.1. Influence de la taille initiale de fragments cristallins :

La figure III.27 (a) présente l'évolution au cours du temps de la température du puits liquide, obtenue par le calcul et par l'expérience. Cette figure montre, comme pour la nuance Pb-4%Sb, que pour une densité de flux de fragments donnée, la surchauffe est évacuée rapidement dans le cas où la taille initiale des fragments est grande.

La figure III.27 (b) montre que les grains équiaxes suivent trois phases d'évolution. Cependant, contrairement à la nuance Pb-4%Sb, cette fois les résultats de la simulation numérique s'écartent de ceux de l'analyse expérimentale. On observe en effet, que la taille des grains calculée par le modèle évolue avec une pente différente de celle mesurée. Dans ce cas, compte tenu de la valeur de la densité de flux de $4,5.10^7$ fragments. $\text{m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ qui est faible par rapport à celle de la nuance Pb-4%Sb ($2,35.10^8$ fragments. $\text{m}^{-2}.\text{s}^{-1}$), le facteur limitant la croissance des grains, à savoir la densité volumique de grains, est moins important.

La figure III.27 (c-1) présente l'évolution au cours du temps de la fraction de solide. Elle montre que les résultats numériques obtenus avec des tailles initiales de fragments de 35 μm à 55 μm sont proches des résultats expérimentaux. D'autre part, les calculs ont montré (voir figure III.27 (c-2) que dans la zone en surchauffe et pour la densité moyenne de flux de fragments utilisée, les fractions de solide obtenues sont négligeables mais non nulles (d'environ 10^{-5}). Ce résultat permet de conclure que des grains peuvent survivre dans la zone surchauffée.

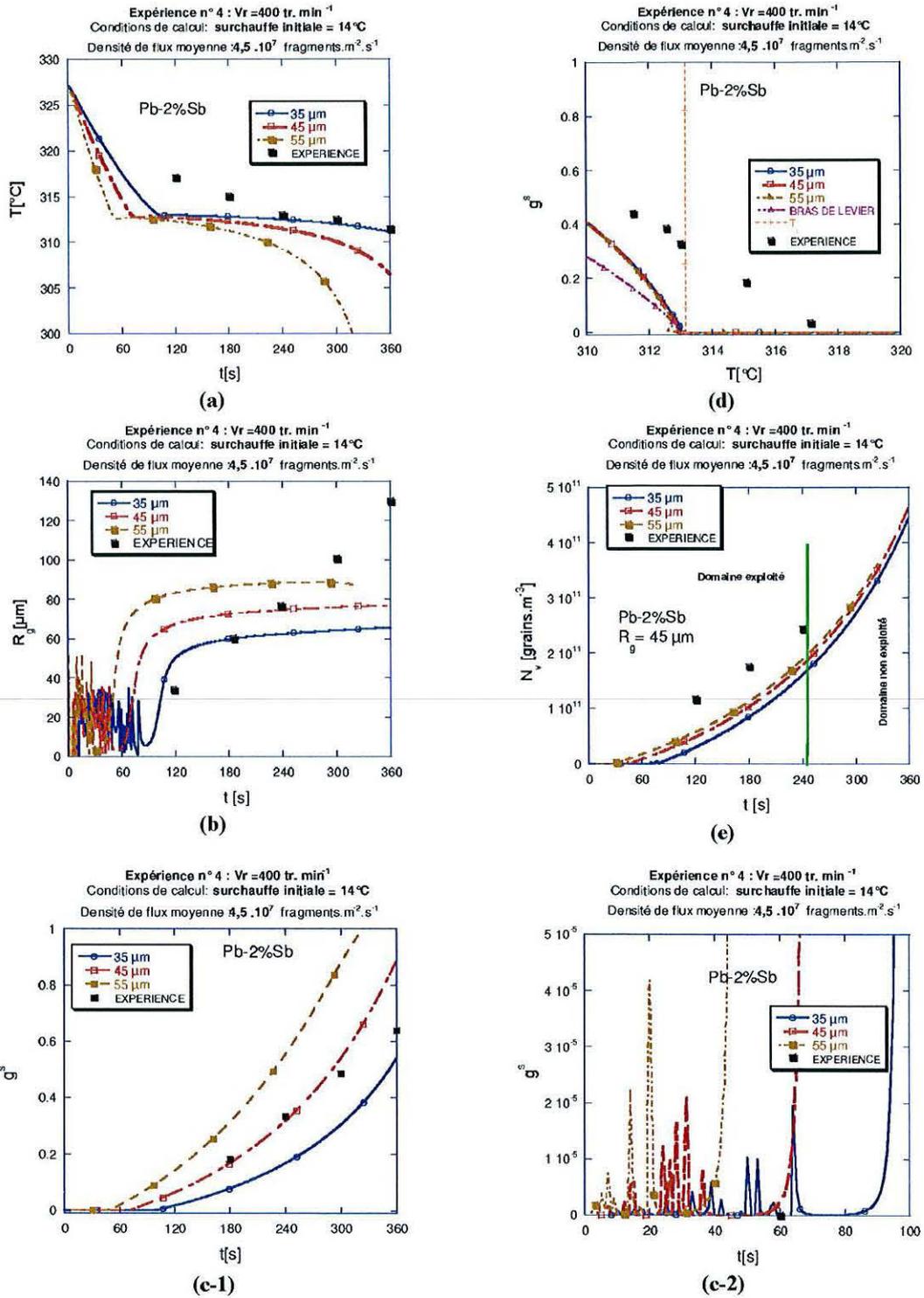


figure III.27 : évolution au cours du temps de la température (a), du rayon (b), de la fraction solide (c-1, c-2) et de densité volumique (e), évolution de la fraction solide en fonction de la température (d)

La figure III.27 (d) présente l'évolution de la fraction de solide en fonction de la température. Les résultats expérimentaux ont montré, comme pour la nuance Pb-4%Sb, que la fraction de solide mesurée dans la zone surchauffée n'est pas négligeable. Ceci sous-entend que des grains

existent et survivent dans ces endroits, contrairement au modèle de bras de leviers qui considère qu'en dessus de la température de liquidus, la fraction solide est nulle.

Dans la zone en surchauffe, les résultats obtenus avec le modèle transformé en fonction des données initiales utilisées présentent des fractions de solide négligeables par rapport à celles mesurées. Après l'évacuation de la surchauffe, les résultats du modèle sont plus proches de ceux de l'expérience.

III - 4.3.2. Influence de la surchauffe :

Comme nous l'avons observé pour la nuance Pb-4%Sb, la figure III. 28 montre que la surchauffe initiale retarde ou avance le début de la croissance des grains dans le puits liquide. Cette dernière commence dès l'instant où la surchauffe est complètement évacuée.

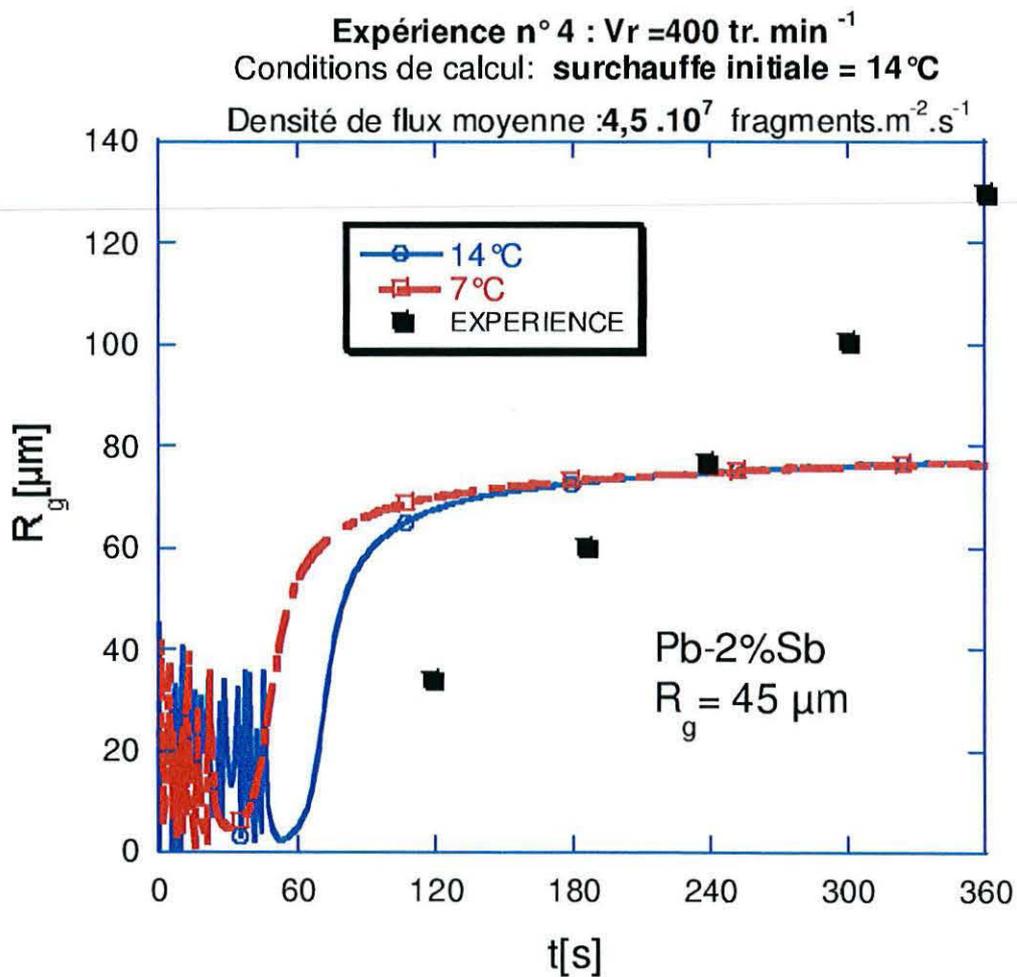


figure III. 28 : Influence de la surchauffe initiale

III - 4.3.3. Influence de la densité volumique initiale de cristallites dans le puits liquide :

Suite aux résultats obtenus sur cette nuance : Pb-2%Sb, nous avons repris la réflexion faite au cours de l'étude paramétrique réalisée sur la nuance Pb-4%Sb, qui suppose qu'il est possible qu'une densité de flux de fragments importante soit libérée initialement par les structures dendritiques colonnaires.

La figure III. 29 montre que si l'on suppose qu'au démarrage de la solidification, une densité volumique de $5 \cdot 10^{11}$ grains.m⁻³ est présente dans le liquide, il est possible en effet d'obtenir des fractions de solide voisines de celles obtenues expérimentalement dans les zones surchauffées.

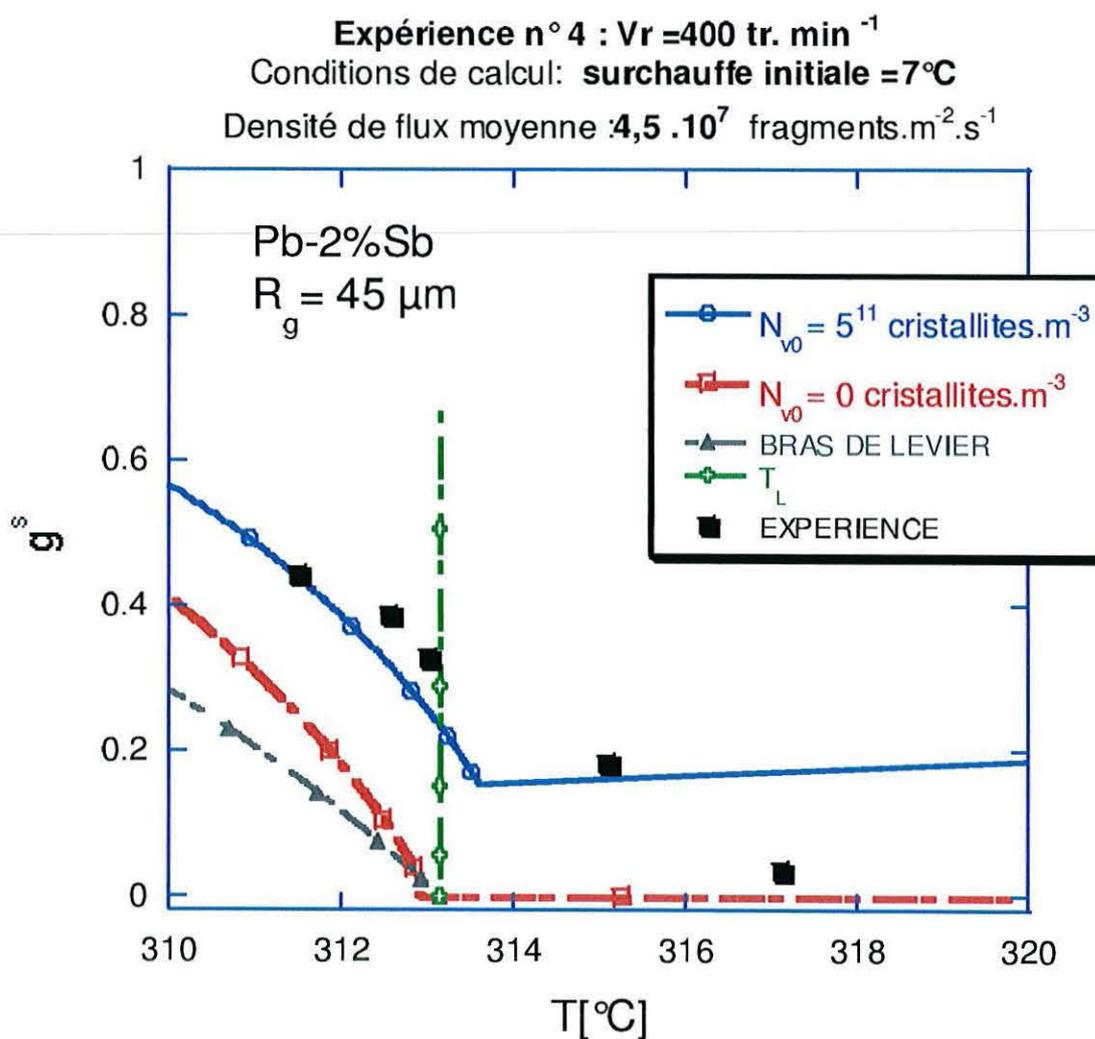


figure III. 29: Influence de la densité volumique initiale de cristallites dans le puits liquide

III - 4.3.4. Influence du temps d'injection de fragments dans le puits liquide :

La figure III. 30 (a) présente la comparaison entre l'évolution au cours du temps de la taille de grains obtenue par deux types de calculs et par l'expérience. Le premier calcul correspond au cas où le front colonnaire générerait en continu des fragments. Le deuxième suppose qu'à un moment donné (240 s), le front colonnaire ne génère plus de fragments (voir figure III. 30 (a)). Dans ce cas, la densité volumique de grains reste constante dans le puits liquide. Par conséquent, à partir de cet instant c'est la cinétique qui contrôlera la croissance des grains (voir figure III. 30 (b)). On remarque que le deuxième type de calcul donne des résultats qui sont plus proches des expériences.

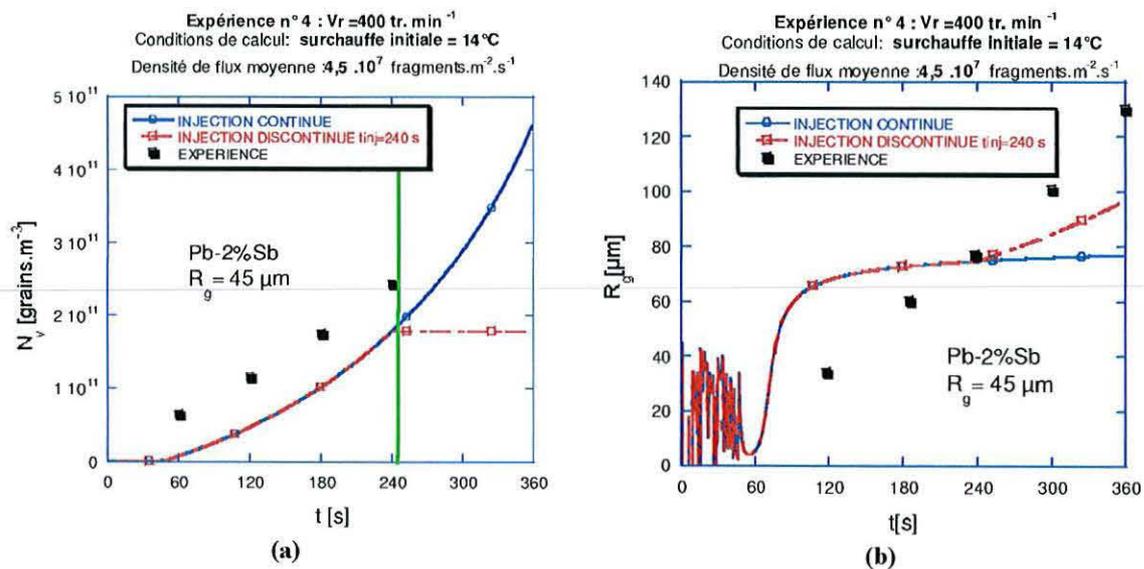


figure III. 30: évolution au cours du temps du rayon moyen des grains dans le puits liquide

III - 5. CONCLUSIONS :

Cette étude a été réalisée dans le but de mettre en place un modèle diphasique pour étudier l'évolution des grains équiaxes dans un puits liquide en cours de solidification.

Cet objectif a été atteint suite aux développements réalisés sur le modèle diphasique général de Ni et Beckermann [21].

L'analyse numérique réalisée avec le modèle diphasique moyenné sur la synthèse expérimentale obtenue par Moukassi [3] a montré qu'avec des paramètres physiques cohérents, il est possible de retrouver les résultats expérimentaux et d'expliquer la présence de fractions de solide dans les zones en situation de surchauffe.

Les principaux points abordés dans cette analyse numérique sont :

- L'étude des conditions de survie des grains équiaxes dans un puits liquide en surchauffe,
- L'étude des conditions possibles pour obtenir les fractions de solide mesurées expérimentalement dans un puits liquide en surchauffe,
- L'estimation des ordres de grandeurs des tailles initiales de fragments,
- L'influence de la loi d'injection de fragments.

Cette étude numérique nous a permis d'étudier la sensibilité de la taille des grains équiaxes (croissance) aux différents paramètres qui sont la densité de flux de fragments injectés dans le bain liquide, la surchauffe initiale, la surfusion chimique devant le front colonnaire, la convection et la taille initiale des fragments. Elle a constitué une base de travail pour le modèle général établi pour étudier la croissance des grains en mouvement dans le bain liquide, qui sera présentée dans les chapitres IV et V. Cette étude nous a permis aussi d'avancer dans la compréhension de la synthèse expérimentale rapportée dans la thèse de Moukassi, tout en sachant qu'il reste encore d'autres phénomènes comme l'agglomération, qui peuvent aussi avoir une certaine influence sur les évolutions obtenues, particulièrement au niveau des tailles de grains et de leur densité volumique.

En conclusion, le contenu de ce chapitre permet d'imaginer plus précisément comment différents paramètres métallurgiques tels que l'histoire (au sens chronologique) de l'introduction de fragments cristallins et leur taille moyenne initiale peuvent influencer l'évolution d'un puits liquide soumis à un brassage.

Par ailleurs, nous avons montré qu'il est possible de se rapprocher par le calcul d'un certain nombre de résultats expérimentaux obtenus par Moukassi. On a constaté que lorsqu'on suppose qu'initialement une densité volumique de grains est présente dans le puits liquide, on arrive à retrouver les fractions de solide mesurées par Moukassi dans les zones en situation de surchauffe.

Enfin, suite aux résultats obtenus et aux développements numériques apportés, il serait intéressant de poursuivre cette étude d'une part, par une réalisation expérimentale sur cet alliage ou un autre alliage métallique et d'autre part, de poursuivre les développements numériques en tenant compte de l'agglomération des grains et en introduisant dans le modèle la croissance dendritique.

En annexe D III, nous avons reporté les résultats numériques obtenus sur les autres essais de Moukassi.

CHAPITRE IV :

**MODELISATION DE LA
SOLIDIFICATION AVEC LA PRISE
EN COMPTE DU MOUVEMENT DES
GRAINS EQUIAXES**

IV - MODELISATION DE LA SOLIDIFICATION AVEC PRISE EN COMPTE DU MOUVEMENT DES GRAINS EQUIAXES

Les différentes études consacrées à la formation de la zone équiaxe, présentées précédemment, ont permis d'identifier les principaux phénomènes qui régulent et contrôlent la croissance des grains dans le puits liquide. Dans cette partie, dans la continuité de ces travaux, nous avons introduit ces phénomènes dans le code de calcul **SOLID**.

Ni et Beckermann [21] ont mis au point un modèle diphasique prenant en compte les mouvements des phases liquide et solide. Nous en avons fait une description sommaire dans le chapitre II. Dans cet esprit et en partant de ce modèle, nous avons développé un modèle diphasique pour des grains de morphologie globulaire. Le nombre d'équations résultant d'un tel modèle est important (sept équations aux dérivées partielles scalaires et deux vectorielles), ce qui rend leur résolution numérique difficile. La résolution numérique d'un problème d'écoulement instationnaire en milieu diphasique, sans transfert de chaleur ni de masse est déjà un problème délicat, de même que le couplage entre les transferts à l'échelle macroscopique et microscopique dans le domaine de la solidification. Beckermann et coll [21, 24 et 25], ainsi que Ludwig [26] ont donné des temps de calcul d'environ deux jours, pour résoudre un problème de solidification sur des domaines en deux dimensions dont la taille est de l'ordre de la dizaine de centimètres. Aussi, nous nous sommes attachés à mettre en place un algorithme numérique efficace. Pour cela, une méthode de résolution a été tout d'abord mise au point en supposant les vitesses des phases liquide et solide égales. Cette méthode est basée sur la séparation en deux parties des équations de conservation : une partie transport et une partie croissance. La méthode a ensuite été étendue pour le cas où les vitesses des deux phases sont différentes.

IV - 1. MODELE DECRIVANT LA SOLIDIFICATION D'UN ALLIAGE AVEC LA PRISE EN COMPTE DU MOUVEMENT DE LA PHASE SOLIDE

Le modèle que nous avons utilisé est établi à partir de celui de Ni et Beckermann [21] pour des grains globulaires sphériques. Nous rappelons l'ensemble des équations, en commentant les termes qui ont été adaptés pour notre problème.

➤ **Bilan de conservation de la densité volumique de grains :**

Le bilan de conservation de la densité volumique de grains est donné par la relation suivante :

$$\frac{\partial N_v}{\partial t} + \nabla(N_v \cdot \langle \vec{v}^s \rangle^s) = \dot{n} \quad \text{IV.1}$$

le terme \dot{n} peut être relatif à une densité de flux de fragments injectés dans le puits liquide ou à une densité volumique de cristallites formés par unité de temps par germination.

➤ **Bilan de masse sur la phase solide :**

Le bilan de masse sur la phase solide est donné par la relation suivante :

$$\frac{\partial(\rho^s g^s)}{\partial t} + \nabla(\rho^s g^s \cdot \langle \vec{v}^s \rangle^s) = \Gamma_s + \dot{n} V_s^0 \rho^s \quad \text{IV.2}$$

le terme $\dot{n} V_s^0 \rho^s$ correspond à la masse de la phase solide introduite par unité de temps, par l'injection ou la germination de grains.

➤ **Bilan de masse sur la phase liquide :**

Le bilan de masse sur la phase liquide est donné par la relation suivante :

$$\frac{\partial(\rho^l g^l)}{\partial t} + \nabla(\rho^l g^l \cdot \langle \vec{v}^l \rangle^l) = -\Gamma_s - \dot{n} V_s^0 \rho^s \quad \text{IV.3}$$

le terme $-\dot{n} V_s^0 \rho^s$ correspond à la masse de liquide perdue du fait de l'injection de nouveaux fragments.

➤ **Bilan de conservation de la masse globale :**

Le bilan de conservation de la masse globale est obtenu par sommation des équations IV.2 et IV.3, il s'écrit comme suit :

$$\frac{\partial(\rho^l g^l + \rho^s g^s)}{\partial t} + \nabla(\rho^l g^l \langle \vec{v}^l \rangle^l + \rho^s g^s \langle \vec{v}^s \rangle^s) = 0 \quad \text{IV.4}$$

Nous supposons que les densités des phases liquide et solide sont égales, excepté dans le terme prenant en compte les forces de gravité au niveau des bilans de quantité de mouvement associés à chaque phase.

Sachant que : $\bar{\rho} = \rho^l g^l + \rho^s g^s$ et avec l'hypothèse émise ci-dessus, il vient :

$$\frac{\partial(\bar{\rho})}{\partial t} = 0$$

Ceci permet de simplifier l'équation IV.3 sous la forme :

$$\nabla(\rho^l g^l \langle \vec{v}^l \rangle^l) = -\nabla(\rho^s g^s \langle \vec{v}^s \rangle^s) \quad \text{IV.5}$$

➤ **Bilan de conservation de la masse sur le constituant i dans la phase liquide :**

Le bilan de masse sur le constituant i dans la phase liquide est donné par la relation suivante :

$$\frac{\partial(\rho^l g^l w_i^l)}{\partial t} + \nabla(\rho^l g^l w_i^l \cdot \langle \vec{V}^l \rangle^l) = -w_i^{*l} \Gamma_s + \frac{S_v \rho^l D_i^l}{\delta_i^l} (w_i^{*l} - w_i^l) - \bar{w}^l \dot{n} V_s^0 \rho^s \quad \text{IV.6}$$

Les longueurs de diffusion chimique dans les phases liquide et solide sont données par les relations:

$$\left\{ \begin{array}{l} \delta_i^l = \left[\frac{1}{\frac{1}{1-g^{s1/3}} + \frac{1}{3g^l} Sc^{1/3} Re^a} \right] R_g \quad \text{avec } a = \frac{2Re^{0,28} + 4,65}{3(Re^{0,28} + 4,65)} \\ \delta_i^s = R_g / 5 \end{array} \right. \quad \text{II.34.1}$$

$$\text{II.34.2}$$

$$\text{avec : } Sc_i = \frac{v^l}{D_i^l} = \frac{\mu^l}{\rho^l D_i^l}$$

La surface spécifique moyenne pour des grains sphériques de rayon moyen R_g est donnée par la relation suivante :

$$S_v = 4\pi R_g^2 N_v \quad \text{II.36}$$

le terme $(-w^l \dot{n} V_s^0 \rho^s)$ correspond à la masse de soluté dans la phase liquide échangée par unité de temps, suite à l'injection de nouveaux fragments.

➤ **Bilan de conservation de la masse sur le constituant i dans la phase solide :**

Le bilan de masse sur le constituant i dans la phase solide est donné par la relation suivante :

$$\frac{\partial(\rho^s g^s w_i^s)}{\partial t} + \nabla(\rho^s g^s w_i^s \cdot \langle \vec{V}^s \rangle^s) = w_i^{*s} \Gamma_s + \frac{S_v \rho^s D_i^s}{\delta_i^s} (w_i^{*s} - w_i^s) + w^{s-ij} \dot{n} V_s^0 \rho^s \quad \text{IV.7}$$

le terme $w^{s-ij} \dot{n} V_s^0 \rho^s$ correspond à la masse de soluté dans la phase solide qui est apportée par unité de temps, par l'injection de nouveaux fragments.

➤ **Titre massique moyen sur le constituant i :**

Le titre massique moyen d'un constituant i s'exprime en fonction des titres moyens dans les phases solide et liquide :

$$\bar{\rho} \cdot \bar{w}_i = \rho^l g^l w_i^l + \rho^s g^s w_i^s \quad \text{IV.8}$$

$$\text{Avec : } g^s = N_v \left(\frac{4}{3} \pi R_g^3 \right) \quad \text{et } g^l = 1 - g^s$$

➤ **Bilan de conservation de la masse sur le constituant i aux interfaces liquide/solide :**

$$(w_i^{l*} - w_i^{s*})\Gamma_s = \frac{S_v \rho^l D_i^l}{\delta_i^l} (w_i^{l*} - w_i^l) + \frac{S_v \rho^s D_i^s}{\delta_i^s} (w_i^{s*} - w_i^s) \quad \text{IV.9}$$

➤ **Equilibre thermodynamique aux interfaces liquide/solide:**

Les relations données par l'équilibre thermodynamique sont les suivantes :

$$\begin{cases} T - T_L = \sum_i m_i (w_i^{l*} - w_i^l) & \text{II.31} \\ w_i^{s*} = k_i w_i^{l*} & \text{II.32} \end{cases}$$

➤ **Bilan de conservation de l'énergie :**

$$\frac{\partial(\rho^l g^l h^l + \rho^s g^s h^s)}{\partial t} + \nabla(\rho^l g^l h^l \langle \vec{v}^l \rangle^l + \rho^s g^s h^s \langle \vec{v}^s \rangle^s) = \nabla[\lambda_{ef} \vec{\nabla}(T)] + \dot{n} V_s^0 \rho^s (h^s - h^l) \quad \text{IV.10}$$

Le terme $\dot{n} V_s^0 \rho^s (h^s - h^l)$ correspond au terme d'échange d'énergie aux interfaces liquide/solide du fait de l'injection de nouveaux fragments.

❖ **Remarque :**

Les termes d'injection ou d'échanges dus à l'injection sont présents dans les équations présentées ci-dessus, si et seulement si l'injection de fragments est effectuée.

Il est possible d'injecter des fragments dans le bain liquide si le test suivant est vérifié :

$$\dot{n} V_s^0 \Delta t < g^s$$

Ce test signifie que la fraction de solide injectée doit être inférieure à la fraction de solide du volume source (V.E.R) à partir duquel on va injecter des fragments.

➤ **Bilan de conservation de la quantité de mouvement :**

Les deux lois de conservation de la quantité de mouvement sur les phases solide et liquide, telles que définies dans le travail de Ni et Beckermann [21] sont les suivantes :

- **Dans la phase α (solide ou liquide) :**

Le bilan de quantité de mouvement s'écrit comme suit :

$$\frac{\partial(\rho^\alpha g^\alpha \langle \vec{v}^\alpha \rangle^\alpha)}{\partial t} + \nabla(\rho^\alpha g^\alpha \langle \vec{v}^\alpha \rangle^\alpha \cdot \langle \vec{v}^\alpha \rangle^\alpha) = \nabla \left[\eta^\alpha \rho^\alpha \vec{\nabla}(g^\alpha \langle \vec{v}^\alpha \rangle^\alpha) \right] + M_d^\alpha + \vec{V}^* \Gamma_\alpha - g^\alpha \vec{\nabla} p + g^\alpha \rho^\alpha \cdot \vec{g} \quad \text{II.33}$$

$$\text{avec : } M_d^s = -M_d^l = \frac{3}{4} \frac{g^s}{d_s} \rho^l C_d \left| \langle \vec{v}^l \rangle^l - \langle \vec{v}^s \rangle^s \right| \left(\langle \vec{v}^l \rangle^l - \langle \vec{v}^s \rangle^s \right) \quad \text{II.33.2}$$

Nous avons dérivé deux formes simplifiées de ces lois de conservation. La première forme consiste à supposer que les vitesses moyennes intrinsèques des phases liquide et solide sont égales. La deuxième forme est obtenue en négligeant les termes d'inertie, le terme de croissance et les forces visqueuses dans la phase solide.

IV - 1.1. Equation de conservation de la quantité de mouvement lorsque les vitesses moyennes intrinsèques des phases liquide et solide sont égales :

Dans le cas où les vitesses des phases liquide et solide sont égales localement, les équations de transfert macroscopique sont établies suivant l'hypothèse que :

$$\langle \vec{v}^l \rangle^l = \langle \vec{v}^s \rangle^s \quad \text{IV.11}$$

On rappelle que : $\langle \vec{v}^\phi \rangle^\phi$: vitesse moyenne intrinsèque de la phase ϕ

et \vec{V} : vitesse moyenne barycentrique massique

La vitesse moyenne barycentrique massique est donnée par la relation suivante :

$$\bar{\rho} \vec{V} = \rho^l g^l \langle \vec{v}^l \rangle^l + \rho^s g^s \langle \vec{v}^s \rangle^s \quad \text{IV.11.1}$$

avec : $\bar{\rho} = \rho^l g^l + \rho^s g^s$

Ces trois équations permettent d'écrire l'égalité suivante :

$$\vec{V} = \langle \vec{v}^l \rangle^l = \langle \vec{v}^s \rangle^s \quad \text{IV.11.2}$$

En additionnant les deux équations de conservation (équation II.33) pour les deux phases liquide et solide, on obtient :

$$\frac{\partial(\rho^l g^l \langle \vec{v}^l \rangle^l + \rho^s g^s \langle \vec{v}^s \rangle^s)}{\partial t} + \nabla(\rho^l g^l \langle \vec{v}^l \rangle^l \langle \vec{v}^l \rangle^l + \rho^s g^s \langle \vec{v}^s \rangle^s \langle \vec{v}^s \rangle^s) = \nabla \left[\eta^l \rho^l \bar{\nabla}(g^l \langle \vec{v}^l \rangle^l) + \eta^s \rho^s \bar{\nabla}(g^s \langle \vec{v}^s \rangle^s) \right] - \bar{\nabla} p + \bar{\rho} \cdot \vec{g}$$

En tenant compte des équations IV.11.1 et IV.11.2, il vient :

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \vec{V})}{\partial t} + \nabla(\bar{\rho} \vec{V} \cdot \vec{V}) = \nabla \left[(\eta^l \rho^l g^l + \eta^s \rho^s g^s) \bar{\nabla}(\vec{V}) + (\eta^l \rho^l \bar{\nabla}(g^l) + \eta^s \rho^s \bar{\nabla}(g^s)) \vec{V} \right] - \bar{\nabla} p + \bar{\rho} \cdot \vec{g}$$

en posant $\mu_{eff} = \eta^l \rho^l g^l + \eta^s \rho^s g^s$ et en négligeant le terme $\left[(\eta^l \rho^l \bar{\nabla}(g^l) + \eta^s \rho^s \bar{\nabla}(g^s)) \vec{V} \right]$,

le bilan de la quantité de mouvement s'écrit comme suit :

$$\boxed{\frac{\partial(\bar{\rho} \vec{V})}{\partial t} + \nabla(\bar{\rho} \vec{V} \cdot \vec{V}) = \nabla \left[\mu_{eff} \bar{\nabla}(\vec{V}) \right] - \bar{\nabla} \hat{p} + (\bar{\rho} - \rho^{ref}) \vec{g}} \quad \text{IV.12}$$

avec \hat{p} : pression motrice définie comme suit :

$\hat{p} = p - \rho^{ref} \cdot \vec{g} \cdot \vec{z}$ et μ_{eff} : viscosité dynamique effective

Il est ainsi possible, en partant de l'écriture en diphasique de la conservation de la quantité de mouvement de retrouver une forme de cette loi de conservation si $\langle \vec{v}^l \rangle^l = \langle \vec{v}^s \rangle^s$, qui a été utilisée en solidification par certains auteurs [32]. Cette méthode permet également de déterminer la viscosité effective connaissant celle des phases liquide et solide. Cependant, ces deux grandeurs, surtout pour la phase solide, sont encore mal connues, aussi nous avons préféré employer une formulation semi-empirique proposée par Chong et coll [33] établie par calage sur les résultats expérimentaux obtenus avec un grand nombre de suspensions monodispersées et polydispersées. Cette viscosité dynamique effective est donnée par la relation suivante :

$$\left. \begin{array}{l} \text{si } g^s < g_{pack}^s : \\ \text{si } g^s \geq g_{pack}^s : \end{array} \right\} \frac{\mu_{eff}}{\mu_f} = \left(1 + \frac{3}{4} \frac{(g^s)^2}{(g^s - g_{pack}^s)^2} \right)^2 \quad \text{avec : } \begin{array}{l} g_{pack}^s = 0,605 \\ \varepsilon = 4,30465 \cdot 10^4 \end{array}$$

$$\frac{\mu_{eff}}{\mu_f} = \left(1 + \frac{3}{4} \frac{g_{pack}^s}{\varepsilon} \right)^2$$

Lorsque la fraction de solide atteint la valeur limite donnée par g_{pack}^s (voir figure IV 1), la viscosité effective tend vers l'infini. Pour des valeurs de la fraction solide supérieures à g_{pack}^s , la viscosité est prise à une valeur très grande afin de représenter l'arrêt des grains et du liquide.

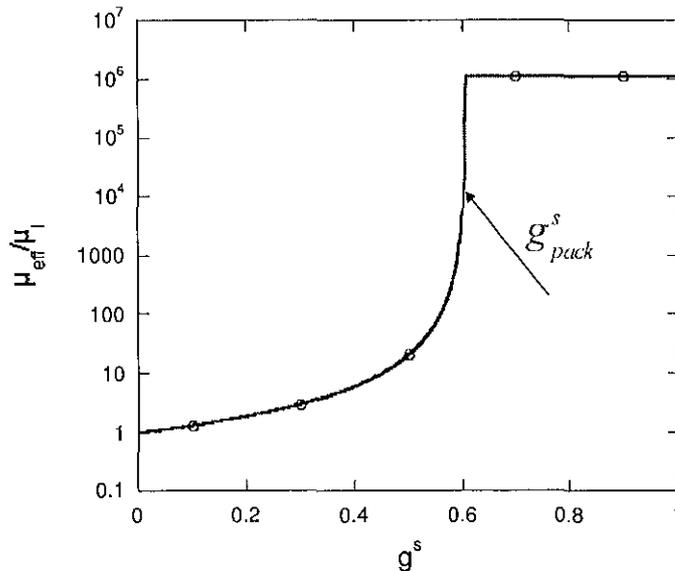


figure IV 1 : Evolution en fonction de la fraction de solide du rapport de la viscosité effective à la viscosité du fluide

IV - 1.2. Equation de conservation de la quantité de mouvement lorsque les vitesses moyennes intrinsèques des phases liquide et solide sont différentes :

Pour traiter le cas où $\langle \vec{v}^l \rangle^l \neq \langle \vec{v}^s \rangle^s$, nous avons considéré deux régions dans la zone pâteuse : une région à l'intérieure de laquelle la phase solide peut bouger et une région où la phase solide est fixe. Nous considérons dans notre modèle que ces deux zones sont délimitées par la valeur de la fraction de solide. Si la fraction de solide est inférieure à la fraction de solide de blocage g^s_{pack} , alors la phase solide est en mouvement, dans le cas contraire elle est fixe.

➤ *Traitement du mouvement des phases liquide et solide si $g^s < g^s_{pack}$ ($\langle \vec{v}^s \rangle^s \neq 0$)*

□ **Bilan de quantité de mouvement dans la phase solide :**

Le bilan de quantité de mouvement dans la phase solide s'écrit comme suit :

$$\frac{\partial(\rho^s g^s \langle \vec{v}^s \rangle^s)}{\partial t} + \nabla(\rho^s g^s \langle \vec{v}^s \rangle^s \cdot \langle \vec{v}^s \rangle^s) = \nabla \left[\eta^s \rho^s \vec{\nabla}(g^s \langle \vec{v}^s \rangle^s) \right] + M_d^s + \vec{v}^s \Gamma_s - g^s \vec{\nabla} p + g^s \rho^s \cdot \vec{g} \quad \text{IV.13}$$

Si on néglige les termes d'inertie, de croissance et de viscosité, il vient :

$$\frac{D(\rho^s g^s \langle \vec{v}^s \rangle^s)}{Dt} = \nabla \left[\eta^s \rho^s \vec{\nabla}(g^s \langle \vec{v}^s \rangle^s) \right] + M_d^s + \vec{v}^s \Gamma_s - g^s \vec{\nabla} p + g^s \rho^s \cdot \vec{g}$$

Nous n'avons pas cherché à justifier dans notre travail, le cadre dans lequel ces termes sont négligeables. La prise en compte de ces termes ne modifierait pas l'algorithme que nous avons mis au point, mais rendrait plus complexe la résolution des champs de vitesses \vec{v}^l et \vec{v}^s .

Le bilan de quantité de mouvement sur cette phase s'écrit alors comme suit :

$M_d^s - g^s \vec{\nabla} p + g^s \rho^s \cdot \vec{g} = \vec{0}$, soit encore en reprenant l'expression de M_d^s donnée par l'équation II.33.1 :

$$g^s \vec{\nabla} p - g^s \rho^s \cdot \vec{g} = \frac{3}{4} \frac{g^s}{d_s} \rho^l C_d \left| \langle \vec{v}^l \rangle^l - \langle \vec{v}^s \rangle^s \right| \left(\langle \vec{v}^l \rangle^l - \langle \vec{v}^s \rangle^s \right) \quad \text{IV.14}$$

$$\text{avec : } C_d = \frac{48 C_{ke} (1 - g^l)}{R_v} + C_{ie} \quad \text{II.33.2}$$

$$R_v = \frac{g^l}{\eta^l} \left| \langle \vec{v}^l \rangle^l - \langle \vec{v}^s \rangle^s \right| (2R_g) \quad \text{II.33.3}$$

Les corrélations établies pour C_{ke} et C_{ie} sont rapportées dans le chapitre II.

La combinaison des équations IV.13, II.33.2 et II.33.3, permet d'écrire l'expression de la vitesse intrinsèque de la phase solide comme suit :

$$\boxed{\langle \vec{v}^s \rangle^s = \langle \vec{v}^l \rangle^l + \frac{4}{3} \frac{(2R_g)^2 g^l}{C_d \mu^l R_e} (-\nabla \hat{p} + (\rho^s - \rho^{ref}) \vec{g})} \quad \text{IV.15}$$

□ **Bilan de quantité de mouvement dans la phase liquide :**

Le bilan de quantité de mouvement s'écrit comme suit :

$$\frac{\partial(\rho^l g^l \langle \vec{v}^l \rangle^l)}{\partial t} + \nabla(\rho^l g^l \langle \vec{v}^l \rangle^l \cdot \langle \vec{v}^l \rangle^l) = \nabla \left[\mu^l \vec{\nabla}(g^l \langle \vec{v}^l \rangle^l) \right] + \quad \text{IV.16}$$

$$M_a^l + \vec{v}^l \Gamma_l - g^l \vec{\nabla} p + g^l \rho^l \cdot \vec{g}$$

En négligeant le terme de croissance, la combinaison des équations IV.14 et IV.16 permet d'écrire l'équation IV.16 sous la forme suivante :

$$\frac{\partial(\rho^l g^l \langle \vec{v}^l \rangle^l)}{\partial t} + \nabla(\rho^l g^l \langle \vec{v}^l \rangle^l \cdot \langle \vec{v}^l \rangle^l) = \nabla \left[\mu^l \vec{\nabla}(g^l \langle \vec{v}^l \rangle^l) \right] - g^s \vec{\nabla} p + g^s \rho^s \cdot \vec{g} - g^l \vec{\nabla} p + g^l \rho^l \cdot \vec{g}$$

sachant que $g^l + g^s = 1$, cette équation se simplifie comme suit :

$$\frac{\partial(\rho^l g^l \langle \vec{v}^l \rangle^l)}{\partial t} + \nabla(\rho^l g^l \langle \vec{v}^l \rangle^l \cdot \langle \vec{v}^l \rangle^l) = \nabla \left[\mu^l \vec{\nabla}(g^l \langle \vec{v}^l \rangle^l) \right] - \vec{\nabla} p + \bar{\rho} \vec{g} \quad \text{IV.17}$$

En fonction de la pression motrice, elle s'écrit comme suit :

$$\boxed{\frac{\partial(\rho^l \vec{v}^l)}{\partial t} + \frac{1}{g^l} \nabla(\rho^l \vec{v}^l \cdot \vec{v}^l) = \nabla \left[\mu^l \vec{\nabla}(\vec{v}^l) \right] - \vec{\nabla} \hat{p} + (\bar{\rho} - \rho^{ref}) \vec{g}} \quad \text{IV.18}$$

avec : $\hat{p} = p - \rho^{ref} \cdot \vec{g} \cdot \vec{z}$ et $\vec{v}^l = g^l \langle \vec{v}^l \rangle^l$

L'expression du terme de gravité dans l'équation IV.18 montre que lorsque la phase solide peut bouger, la force motrice pour la convection naturelle est donnée par la différence entre la densité moyenne de l'ensemble des phases solide et liquide et la densité de référence. Ainsi du fait en général de la forte différence de densité entre les phases solide et liquide (voir figure IV 2), le mouvement des grains va contribuer de façon très importante au mouvement de la phase liquide.

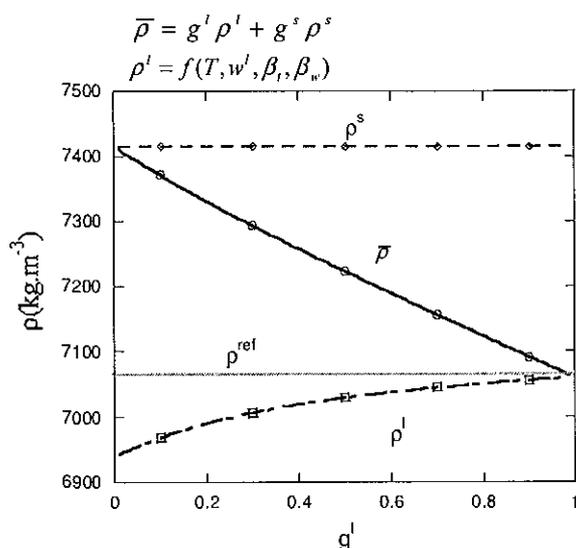


figure IV 2 : Evolution de la masse volumique en fonction de la fraction solide (Fe- 1,015% mass C)

La figure IV 3 présente les vitesses de chute des grains calculées par l'équation VI.15. Cette figure illustre le fait que lorsque la fraction solide est inférieure à 0,5, on constate que la vitesse de chute est proportionnelle à la taille des grains. La vitesse de chute décroît lorsque la fraction de solide augmente. Lorsque la fraction de solide atteint sa valeur limite ($g^s \geq 0,5$), le milieu devient de plus en plus imperméable et les vitesses de chute deviennent très faibles.

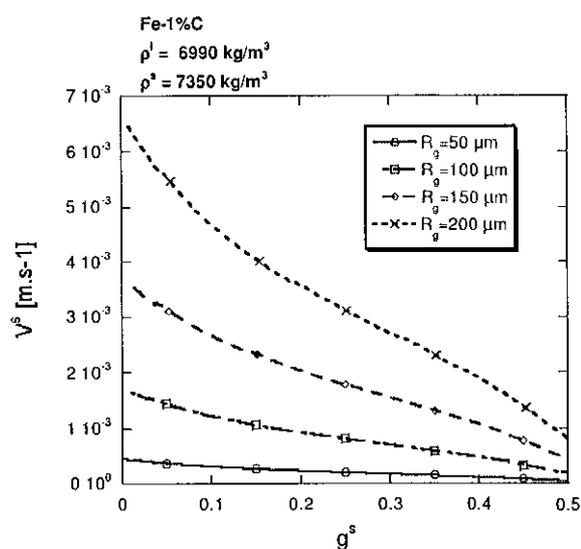


figure IV 3 : Evolution de la vitesse de chute de grains sphériques de taille donnée en fonction de la fraction de solide

➤ *Traitement du mouvement des phases liquide et solide si $g^s \geq g^s_{pack}$ ($\langle \vec{V}^s \rangle^s = 0$)*

Lorsque la phase solide est immobile, le bilan de quantité de mouvement s'écrit suivant une forme maintenant classique où M'_d s'exprime à partir du terme de perméabilité :

$$\boxed{\frac{\partial(\rho^l \vec{V}^l)}{\partial t} + \frac{1}{g^l} \nabla(\rho^l \vec{V}^l \cdot \vec{V}^l) = \nabla[\mu^l \bar{\nabla}(\vec{V}^l)] - \frac{g^l \mu^l}{K} \vec{V}^l - g^l \bar{\nabla} \hat{p} + g^l (\rho^l - \rho^{ref}) \cdot \vec{g}}$$

IV.19

La perméabilité K est donnée par la loi de Carman-Kozeny :

$$K = \frac{g^l (d_g)^2}{\pi^2 k' \tau^2 (1 - g^l)^2}$$

avec d_g : diamètre moyen des grains

k' : constante de Kozeny

τ : tortuosité

IV - 1.3. Synthèse sur les différentes bilans de conservation de quantité de mouvement :

Suivant le mouvement suivi par la phase solide, le bilan de quantité de mouvement dans la phase liquide s'écrit comme suit (❶ : modèle où les phases liquide et solide ont des vitesses égales, ❷ : modèle où les phases liquide et solide ont des vitesses différentes) :

❶ modèle $\langle \vec{V}^s \rangle^s = \langle \vec{V}^l \rangle^l = \vec{V}$

$$\boxed{\frac{\partial(\bar{\rho} \vec{V})}{\partial t} + \nabla(\bar{\rho} \vec{V} \cdot \vec{V}) = \nabla[\mu_{eff} \bar{\nabla}(\vec{V})] - \bar{\nabla} \hat{p} + (\bar{\rho} - \rho^{ref}) \cdot \vec{g}} \quad (IV.12)$$

❷ modèle $\langle \vec{V}^s \rangle^s \neq \langle \vec{V}^l \rangle^l$

si

$g^s < g^s_{pack}$

$$\left\{ \begin{array}{l} \boxed{\frac{\partial(\rho^l \vec{V}^l)}{\partial t} + \frac{1}{g^l} \nabla(\rho^l \vec{V}^l \cdot \vec{V}^l) = \nabla[\mu^l \bar{\nabla}(\vec{V}^l)] - \bar{\nabla} \hat{p} + (\bar{\rho} - \rho^{ref}) \cdot \vec{g}} \quad (IV.18) \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \boxed{\langle \vec{V}^s \rangle^s = \langle \vec{V}^l \rangle^l + \frac{4(2R_g)^2 g^l}{3 C_d \mu^l R_v} (-\nabla \hat{p} + (\rho^s - \rho^{ref}) \cdot \vec{g})} \quad (IV.15) \end{array} \right.$$

Sinon

$g^s \geq g^s_{pack}$

$$\left\{ \begin{array}{l} \boxed{\frac{\partial(\rho^l \vec{V}^l)}{\partial t} + \frac{1}{g^l} \nabla(\rho^l \vec{V}^l \cdot \vec{V}^l) = \nabla[\mu^l \bar{\nabla}(\vec{V}^l)] - \frac{g^l \mu^l}{K} \vec{V}^l - g^l \bar{\nabla} \hat{p} + g^l (\rho^l - \rho^{ref}) \cdot \vec{g}} \quad (IV.19) \\ \langle \vec{V}^s \rangle^s = 0 \end{array} \right.$$

g^s_{pack}

Fraction de solide limite (blocage) au dessus de laquelle le solide est immobile.

$\rho^l, \rho^s, \bar{\rho}$: sont constants sauf dans le terme de gravité

IV - 1.4. Méthode de résolution des EDP et algorithme de calcul :

IV - 1.4.1. Méthode de résolution des EDP :

Pour étudier l'évolution des grains en mouvement dans un bain liquide, nous avons présenté dans la partie précédente l'ensemble des équations. Nous les rappelons ci-dessous, afin de les présenter sous une forme regroupée. De plus, il est possible de distinguer pour chaque équation, une contribution liée au transport par convection ou par diffusion à l'échelle macroscopique et une contribution liée à la croissance ou refusion des grains.

➤ Système d'équations résolues :

Le système d'équations qui forme le modèle diphasique est rapporté ci-dessous avec les contributions liées au transport en bleue et celles liées à la croissance en rouge.

$$\frac{\partial(\rho^l g^l h^l + \rho^s g^s h^s)}{\partial t} + \nabla(\rho^l g^l h^l \cdot \langle \vec{v}^l \rangle^l + \rho^s g^s h^s \cdot \langle \vec{v}^s \rangle^s) = \nabla[\lambda_{eff} \bar{\nabla}(T)] + \dot{n} V_s^0 \rho^s (h^s - h^l) \quad (IV.10)$$

$$\nabla(\rho^l g^l \langle \vec{v}^l \rangle^l) = -\nabla(\rho^s g^s \langle \vec{v}^s \rangle^s) \quad (IV.5)$$

1 modèle	$\langle \vec{v}^s \rangle^s = \langle \vec{v}^l \rangle^l = \vec{V}$	$\frac{\partial(\bar{\rho} \vec{V})}{\partial t} + \nabla(\bar{\rho} \vec{V} \cdot \vec{V}) = \nabla[\mu_{eff} \bar{\nabla}(\vec{V})] - \bar{\nabla} \hat{p} + (\bar{\rho} - \rho^{ref}) \cdot \vec{g}$	(IV.12)
2 modèle <u>si</u> $g^s < g_{pack}^s$	$\langle \vec{v}^s \rangle^s \neq \langle \vec{v}^l \rangle^l$	$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial(\bar{\rho} \vec{V}^l)}{\partial t} + \frac{1}{g^l} \nabla(\bar{\rho} \vec{V}^l \cdot \vec{V}^l) = \nabla[\mu^l \bar{\nabla}(\vec{V}^l)] - \bar{\nabla} \hat{p} + (\bar{\rho} - \rho^{ref}) \cdot \vec{g} \\ \langle \vec{v}^s \rangle^s = \langle \vec{v}^l \rangle^l + \frac{4}{3} \frac{(2R_g)^2 g^l}{C_d \mu^l R_e} (-\nabla \hat{p} + (\rho^s - \rho^{ref}) \vec{g}) \end{array} \right.$	(IV.18) (IV.15)
Sinon $g^s \geq g_{pack}^s$	$\langle \vec{v}^s \rangle^s = 0$	$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial(\rho^l \vec{V}^l)}{\partial t} + \frac{1}{g^l} \nabla(\rho^l \vec{V}^l \cdot \vec{V}^l) = \nabla[\mu^l \bar{\nabla}(\vec{V}^l)] - \frac{g^l \mu^l}{K} \vec{V}^l - g^l \bar{\nabla} \hat{p} + g^l (\rho^l - \rho^{ref}) \cdot \vec{g} \\ \langle \vec{v}^s \rangle^s = 0 \end{array} \right.$	(IV.19)

$$\frac{\partial N_v}{\partial t} + \nabla(N_v \cdot \langle \vec{v}^s \rangle^s) = \dot{n} \quad (IV.1)$$

$$\frac{\partial(\rho^s g^s)}{\partial t} + \nabla(\rho^s g^s \cdot \langle \vec{v}^s \rangle^s) = \Gamma_s + \dot{n} V_s^0 \rho^s \quad (IV.2)$$

$$\frac{\partial(\rho^l g^l w_i^l)}{\partial t} + \nabla(\rho^l g^l w_i^l \cdot \langle \vec{v}^l \rangle^l) = -w_i^{l*} \Gamma_s + \frac{S_v \rho^l D_i^l}{\delta_i^l} (w_i^{l*} - w_i^l) - w_i^l \dot{n} V_s^0 \rho^s \quad (IV.6)$$

$$\frac{\partial(\rho^s g^s w_i^s)}{\partial t} + \nabla(\rho^s g^s w_i^s \cdot \langle \vec{v}^s \rangle^s) = w_i^{s*} \Gamma_s + \frac{S_v \rho^s D_i^s}{\delta_i^s} (w_i^{s*} - w_i^s) + w_i^s \dot{n} V_s^0 \rho^s \quad (IV.7)$$

$$(w_i^{l*} - w_i^{s*})\Gamma_s = \frac{S_v \rho^l D_i^l}{\delta_i^l} (w_i^{l*} - w_i^l) + \frac{S_v \rho^s D_i^s}{\delta_i^s} (w_i^{s*} - w_i^s) \quad (\text{IV.9})$$

On constate qu'une équation peut contenir soit un ou deux types de contribution. On peut ainsi remarquer que si l'on considère uniquement les termes de croissance et quand il est présent le terme d'accumulation, l'ensemble des équations IV.1, IV.2, IV.5, IV.6, IV.7, IV.9, IV.10, IV.12, IV.15 IV.18 et IV.19 conduit au même système que celui dérivé au chapitre III pour le modèle diphasique moyenné. Nous pouvons ainsi écrire le modèle sous la forme :

$$\frac{\partial \vec{X}}{\partial t} + T(\vec{X}) = C(\vec{X}) \quad \text{IV.20}$$

où \vec{X} est le vecteur contenant les inconnues du modèle ($h, \vec{V}^l, \vec{V}^s, w_i^l, w_i^s, p, N_v, g^l, g^s, R_g, w_i^{l*}, w_i^{s*}$)

et T est un opérateur différentiel contenant tous les termes de transport et C un autre opérateur contenant les termes de croissance.

Ce type de décomposition est utilisé dans un certain nombre de problèmes mettant en jeu une réaction chimique comme la combustion ou l'étude de la pollution dans l'air [34]. Dans ces domaines, des schémas numériques de type **méthode de séparation** ("splitting method" en Anglais) ont été mis au point [35]. Ce type de méthode consiste à décomposer le système d'EDP à résoudre en deux systèmes.

$$\left. \begin{array}{ll} (1) & \frac{\partial \vec{X}^*}{\partial t} + T(\vec{X}^*) = 0 \quad \text{sur } [t, t + \Delta t] \text{ avec } \vec{X}^*(t) = \vec{X}(t) \\ (2) & \frac{\partial \vec{X}^{**}}{\partial t} = C(\vec{X}^{**}) \quad \text{sur } [t, t + \Delta t] \text{ avec } \vec{X}^{**}(t) = \vec{X}^*(t + \Delta t) \end{array} \right\} \text{IV.21}$$

Il est possible de résoudre le système (1) avec une méthode d'intégration et un pas de temps différent de ceux adoptés pour le système (2). Nous avons choisi de mettre en œuvre une telle méthode pour résoudre le système d'équations du modèle diphasique présenté précédemment. On peut remarquer qu'avec la décomposition que nous proposons, la partie transport correspond à une résolution où tous les points du domaine interagissent entre eux, tandis que la partie croissance correspond à une résolution locale pour chaque maille de calcul. Cette méthode constitue une extension des approches appelées micro-macro en solidification qui ont été mises en œuvre tout d'abord par Thévoz et Rappaz [36] puis étendues par Gandin et Rappaz [37] pour prendre en compte la germination et la croissance des grains. Cette méthode permet de coupler les deux échelles par la résolution des EDP en deux étapes successives définies comme suit : la première, résolution des termes de transfert à l'échelle macroscopique (transport) et la deuxième, résolution des termes microscopiques (croissance ou refusion).

D'après les travaux antérieurs sur la méthode de séparation, le choix de l'ordre de la résolution des équations écrites après la séparation est important [35]. Il est préférable de résoudre en premier la partie transport, pour stabiliser le schéma numérique. Pour illustrer le principe de cette méthode de séparation et la tester, nous présentons maintenant une application à une équation de notre problème.

IV - 1.4.1.1. Exemple :

Nous avons choisi pour illustrer la méthode de séparation de l'appliquer à la résolution de l'équation de conservation de la masse pour la phase solide (équation IV.2). On peut distinguer dans cette équation le deuxième terme du membre de gauche qui est un terme de transport et le premier terme du membre de droite qui est un terme de croissance. Le dernier terme du membre droit lié à l'introduction de fragments est associé à la résolution de la partie transport.

$$\frac{\partial(\rho^s g^s)}{\partial t} + \nabla(\rho^s g^s \cdot \langle \vec{V}^s \rangle^s) = \Gamma_s + \dot{n} V_s^0 \rho^s \quad \text{IV.2}$$

Cette équation est résolue comme suit :

Pour chaque pas de temps de calcul Δt , deux étapes sont définies dans l'intervalle de temps de résolution $[t, t+\Delta t]$:

➤ *Première étape :*

Dans cette étape, l'équation IV.2 est résolue sans prendre en compte les termes de croissance, ce qui correspond à :

$$\frac{\partial(\rho^s g^{s-transp})}{\partial t} + \nabla(\rho^s g^{s-transp} \cdot \langle \vec{V}^s \rangle^s) = \dot{n} V_s^0 \rho^s \quad \text{IV.2.1}$$

On détermine alors au temps $t+\Delta t$ une valeur intermédiaire de g^s appelée $g^{s-transp}$, cette valeur étant ensuite utilisée comme valeur initiale pour la deuxième étape.

➤ *Deuxième étape :*

Dans cette étape, l'équation IV.2 est résolue sans prendre en compte les termes de transport, ce qui correspond à :

$$\frac{\partial(\rho^s g^{s-crois})}{\partial t} = \Gamma_s \quad \text{IV.2.2}$$

Avec $g^{s-crois}(t) = g^{s-transp}(t + \Delta t)$

Enfin : $g^s(t + \Delta t) = g^{s-crois}(t + \Delta t) \quad \text{IV.2.3}$

IV - 1.4.2. Application de la méthode de séparation à un cas unidirectionnel simple :

Pour tester cette méthode, nous avons résolu pour un domaine unidirectionnel cartésien (voir figure IV 4) l'équation aux dérivées partielles suivante :

$$\frac{\partial g^s}{\partial t} + V \frac{\partial g^s}{\partial x} = \frac{\Gamma_s}{\rho^s} \tag{VI.22}$$

Cette équation correspond à l'équation de conservation de la masse pour la phase solide, pour une géométrie monodirectionnelle avec une vitesse constante et sans injection de fragments.

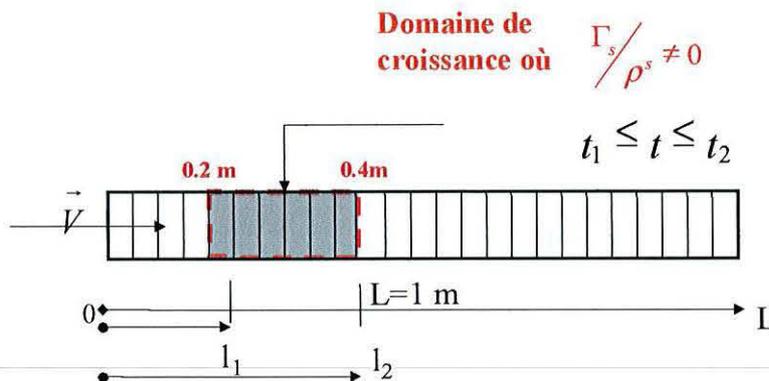


figure IV 4: système unidirectionnel cartésien

Les conditions imposées sont les suivantes :

- ✓ Vitesse imposée constante et positive.
- ✓ A $t = 0, g^s(x, t) = 0, \forall x$
- ✓ A $x = 0, g^s(x, t) = 0, \forall t$
- ✓ si $l_1 \leq x \leq l_2$ et $t_1 \leq t \leq t_2$ avec $t_1, t_2 \in [0, t_{\max}]$ $\frac{\Gamma_s}{\rho^s} \neq 0$

IV - 1.4.3. Discrétisation de l'EDP par la méthode de séparation :

La discrétisation de l'équation IV.22 est obtenue par la méthode des volumes finis avec un schéma décentré (upwind) et une discrétisation implicite en temps. Nous avons utilisé comme notation, la nomenclature classique des volumes finis [38].

Nous donnons ci-dessous le schéma discrétisé dans la partie où le terme source est non nul, d'une part avec une méthode classique où tous les termes sont discrétisés en même temps, d'autre part avec une méthode de séparation. La méthode de discrétisation étant classique, nous ne présentons pas les détails de calcul.

➤ *Schéma obtenu avec une méthode classique :*

$$a_p g_p^s = a_W g_W^s + b \quad \text{IV.23}$$

avec : $a_W = V$

$$b = \frac{\Gamma_s}{\rho^s} \Delta x + a_p^0 g_p^{s0}$$

$$a_p^0 = \frac{\Delta x}{\Delta t}$$

$$a_p = a_W + a_p^0$$

➤ *Schéma obtenu avec une méthode de séparation :*

□ **Première étape : résolution de la partie transport**

$$a_p^{transp} g_p^{s-transp} = a_W^{transp} g_W^{s-transp} + b \quad \text{IV.24}$$

avec : $a_W^{transp} = V$

$$b = a_p^0 g_p^{s0}$$

$$a_p^0 = \frac{\Delta x}{\Delta t}$$

$$a_p^{transp} = a_W^{transp} + a_p^0$$

□ **Deuxième étape : résolution de la partie croissance**

$$a_p^{crois} g_p^{s-crois} = b \quad \text{IV.25}$$

avec : $b = a_p^0 g_p^{s-transp} + \frac{\Gamma_s}{\rho^s} \Delta x$

$$a_p^{crois} = a_p^0$$

$$g^s(t + \Delta t) = g_p^{s-crois}$$

En remplaçant $g_p^{s-transp}$ par son expression obtenue en IV.24 dans l'équation IV.25 on obtient :

$$a_p^{crois} g_p^{s-crois} = \frac{\Gamma_s}{\rho^s} \Delta x + a_p^0 \left[\frac{a_W^{transp}}{a_p^{transp}} g_W^{s-transp} + \frac{a_p^0}{a_p^{transp}} g_p^{s0} \right] \quad \text{IV.26}$$

En remarquant que $a_p^{crois} = a_p^0$ et en multipliant l'équation IV.26 par $\frac{a_p^{transp}}{a_p^0}$, on obtient :

$$a_p^{transp} g_p^{s-crois} = a_W^{transp} g_W^{s-transp} + a_p^0 g_p^{s0} + \frac{a_p^{transp}}{a_p^0} \frac{\Gamma_s}{\rho^s} \Delta x \quad \text{IV.27}$$

On peut maintenant comparer l'équation discrétisée avec celle du schéma classique (équation IV.23). Sachant qu'entre ces deux relations $a_W^{transp} = a_W$ et $a_P^{transp} = a_P$, la différence entre les coefficients des deux équations discrétisées se trouve dans le terme source, dans le cas de la méthode de séparation il est multiplié par le facteur $\frac{a_P^{transp}}{a_P^0}$. Ainsi, si l'on considère le cas où g_W^s serait toujours égal à zéro (condition limite), les deux schémas donneront des résultats d'autant plus proches que le facteur $\frac{a_P^{transp}}{a_P^0}$ est proche de 1, c'est à dire que $\frac{V\Delta t}{\Delta x} \ll 1$.

Nous pouvons ainsi déduire un critère pour la méthode de séparation. Il faut se placer dans des conditions où : $\frac{V\Delta t}{\Delta x} \ll 1$.

Il s'agit en fait d'une condition déjà classique dans un problème de convection qui ne va donc pas conduire à une contrainte supplémentaire sur les résolutions du maillage en espace et en temps.

Par ailleurs, on retrouve comme nous l'avons annoncé précédemment, pour la première étape de transport, une équation discrétisée mettant en relation les points du maillage et pour la deuxième étape de croissance, une équation discrétisée ne faisant intervenir que les valeurs au point considéré.

IV - 1.4.4. Comparaison des résultats de la méthode de séparation avec une méthode classique:

Pour tester notre méthode, nous avons comparé les résultats obtenus avec cette méthode aux résultats obtenus avec la méthode classique. La discrétisation présentée précédemment montre que les résultats vont dépendre du pas de temps de calcul, du maillage du domaine et de la vitesse imposée. Pour cela, la comparaison entre les deux méthodes a été faite en fonction de ces trois paramètres de calcul. Un calcul de référence a été défini, il correspond à une vitesse V de 1 m.s^{-1} , un pas de temps de calcul Δt de 10^{-4} s et un maillage de 100 mailles soit une taille de maille Δx égale à 10^{-2} m .

IV - 1.4.4.1. Solution obtenue avec la méthode classique :

La figure IV 5 (a) présente l'évolution de la fraction de solide au cours du temps dans la maille de calcul 30 située à 0,3 m de l'entrée du domaine. Cette maille représente le milieu de l'intervalle où le terme source $\frac{\Gamma_s}{\rho^s}$ est non nul. La figure IV 5 (b) présente l'évolution de la fraction de solide dans tout le domaine au temps de calcul de 0,3 s.

Les mêmes calculs ont été ensuite réalisés par la méthode de séparation (figure IV 6 (a) et figure IV 7 (a)). La différence entre les résultats obtenus par ces deux méthodes est représentée par l'erreur relative (figure IV 6 (b) et figure IV 7 (b))

On constate que pour ces conditions de calculs pour lesquelles $\frac{V\Delta t}{\Delta x} = 0,01$, l'erreur relative maximale obtenue entre les deux méthodes est de 1%.

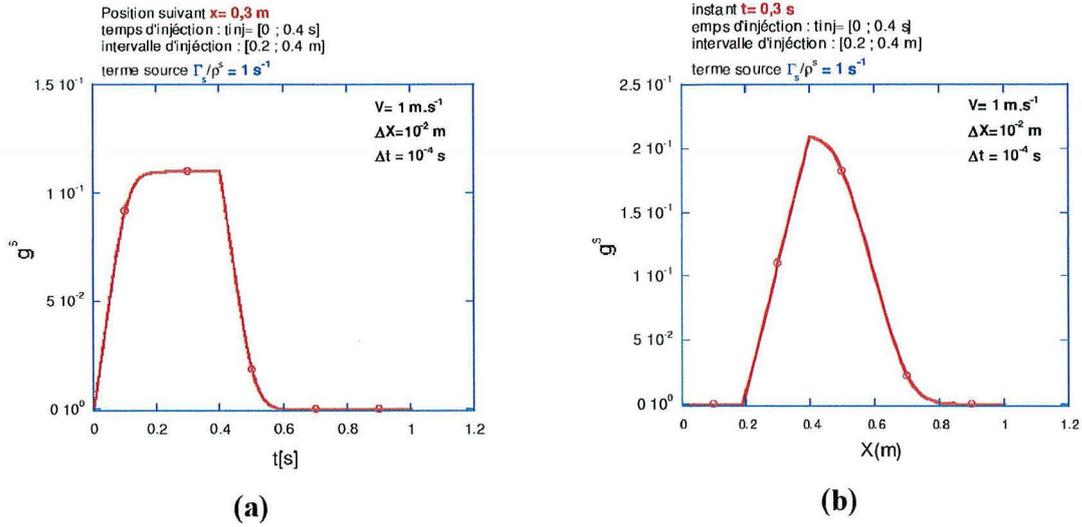


figure IV 5 : Evolution de la fraction de solide en fonction du temps (a) et de la position (b) dans le domaine étudié. Résolution par la méthode de séparation

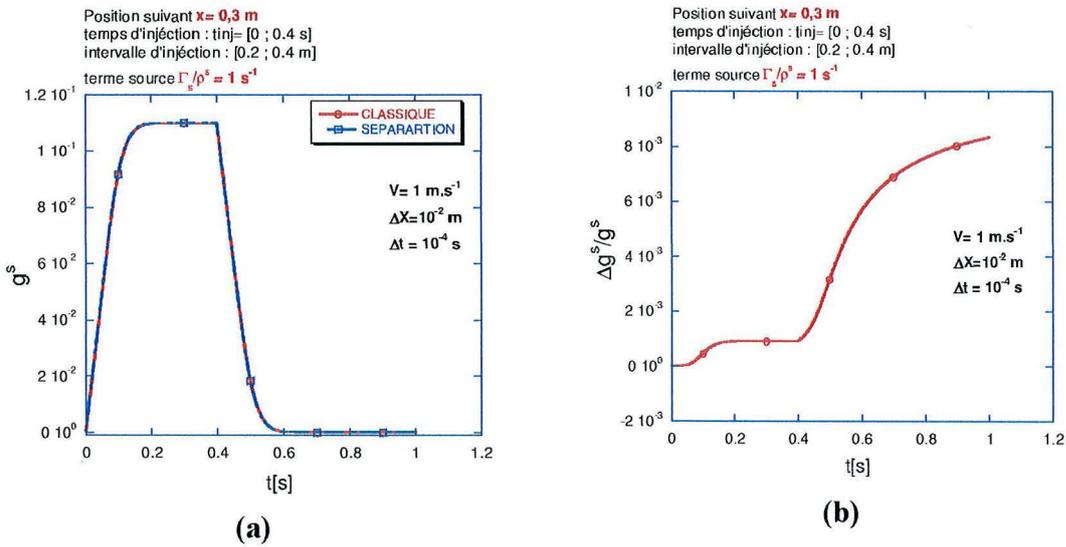


figure IV 6 : Evolution au cours du temps de la fraction de solide calculée avec les deux méthodes (a) et de l'erreur relative (b) au point $x=0,3$ m

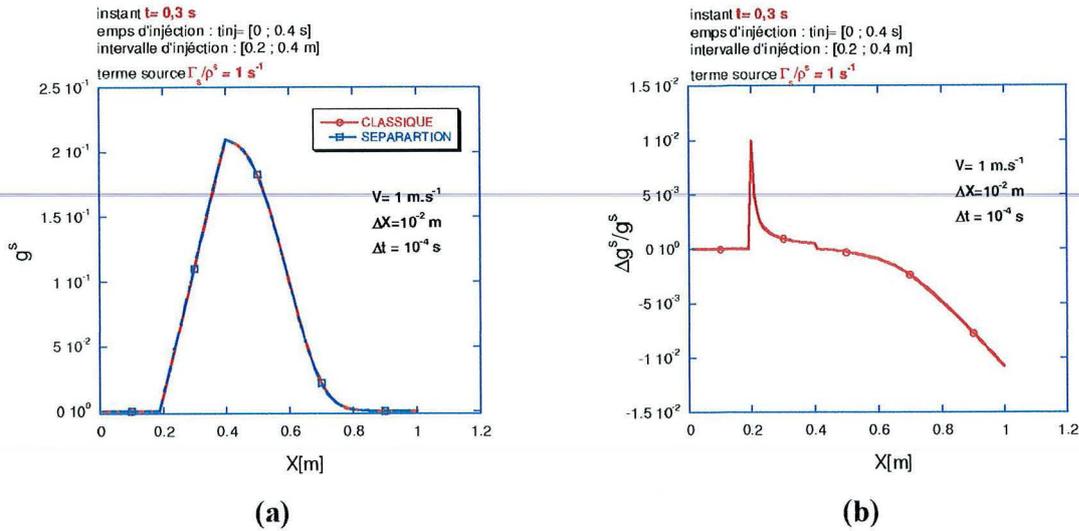


figure IV 7 : Evolution en fonction de la position de la fraction de solide (a) calculée avec les deux méthodes et de l'erreur relative (b)

➤ *Influence du pas de temps :*

Les figures IV 8 (a) et (b) présentent la comparaison entre les résultats obtenus par les deux méthodes pour trois pas de temps de calcul 10^{-3} , 10^{-4} , 10^{-5} s, avec un maillage de 100 mailles et une vitesse constante de $1 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. On constate que plus on réduit le pas de temps et plus on s'approche de la solution obtenue par la méthode classique. En effet, avec un pas de temps de 10^{-5} s, l'erreur relative maximale obtenue est de 0,08%, alors qu'un pas de temps de 10^{-3} s donne une erreur relative maximale d'environ 10%. En conclusion, dans le cas où le transport est rapide comme c'est le cas ici ($1 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$), il est nécessaire d'utiliser des petits pas de temps de calcul.

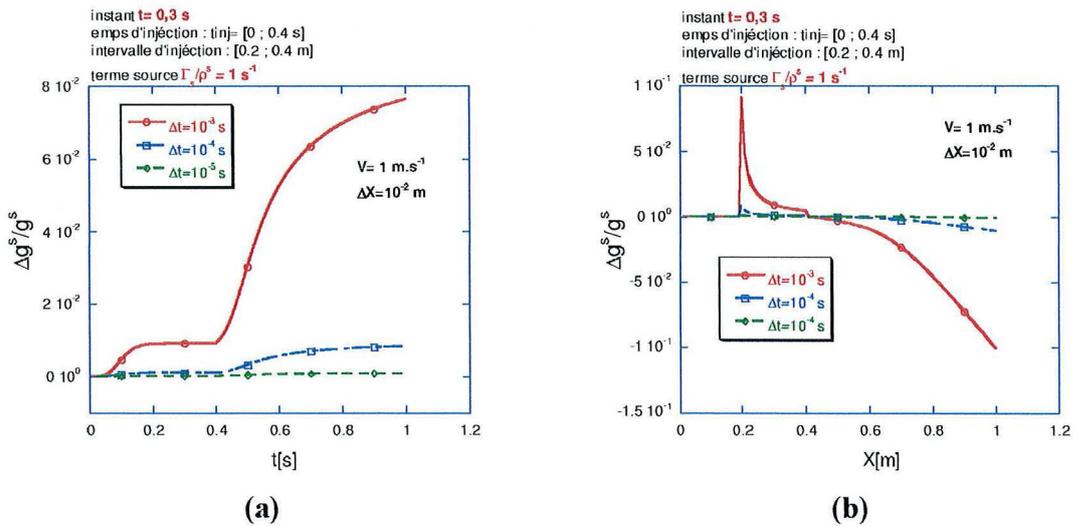


figure IV 8 : Evolution au cours du temps (a) et de la position (b) de l'erreur relative en fonction du pas de temps de calcul

➤ **Influence du maillage :**

Les figures IV 9 (a) et (b) présentent la comparaison des résultats obtenus par les deux méthodes pour des tailles de mailles différentes. On constate que l'erreur relative maximale entre les deux méthodes est de 1% lorsque la taille des mailles est de 1 cm. Cette erreur passe à 0,75% lorsque la taille des mailles est de 2 cm. Dans ce cas, la grandeur $\frac{V\Delta t}{\Delta x}$ passe de 0,01 à 0,005. Lorsqu'on affine le maillage, l'erreur relative maximale est d'environ 2%. Pour un pas de temps fixe, il est donc nécessaire de se fixer une limite de mailles de calcul qu'il ne faut pas dépasser pour limiter l'erreur avec la méthode de séparation.

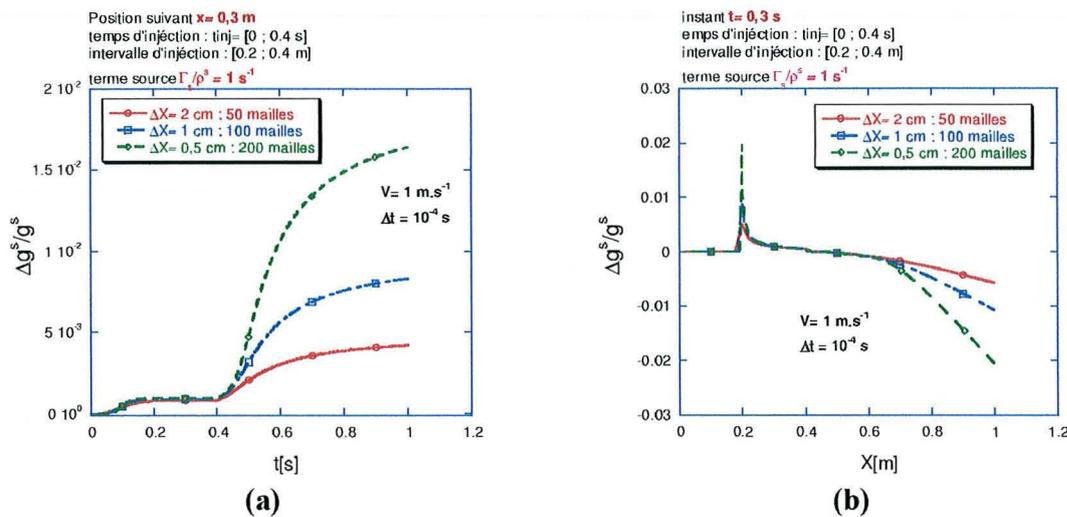


figure IV 9 : Evolution au cours du temps (a) et de la position (b) de l'erreur relative pour différentes tailles de mailles

➤ **Influence de la vitesse :**

Les figures IV 10 (a) et (b) présentent la comparaison des résultats obtenus par les deux méthodes pour différentes valeurs de la vitesse. La figure IV 10 (a) montre que les erreurs relatives obtenues pour les vitesses $0,1 \text{ m.s}^{-1}$ et $0,01 \text{ m.s}^{-1}$ dans la maille 30 sont négligeables par rapport à celles obtenues avec la vitesse de 1 m.s^{-1} . Pour ces deux vitesses, les deux méthodes conduisent à des résultats similaires. La figure IV 10 (b) montre que pour les points du domaine compris dans l'intervalle $[0,4 \text{ m} ; 0,9 \text{ m}]$, les erreurs relatives obtenues sont plus grandes pour les valeurs plus faibles de la vitesse. Ce résultat s'explique par les valeurs de la fraction de solide (g^s) négligeables (voir figure IV 11) obtenues dans ces endroits (de l'ordre de 10^{-15}). Les erreurs obtenues dans ce cas pour les vitesses $0,1 \text{ m.s}^{-1}$ et $0,01 \text{ m.s}^{-1}$, ne sont pas significatives.

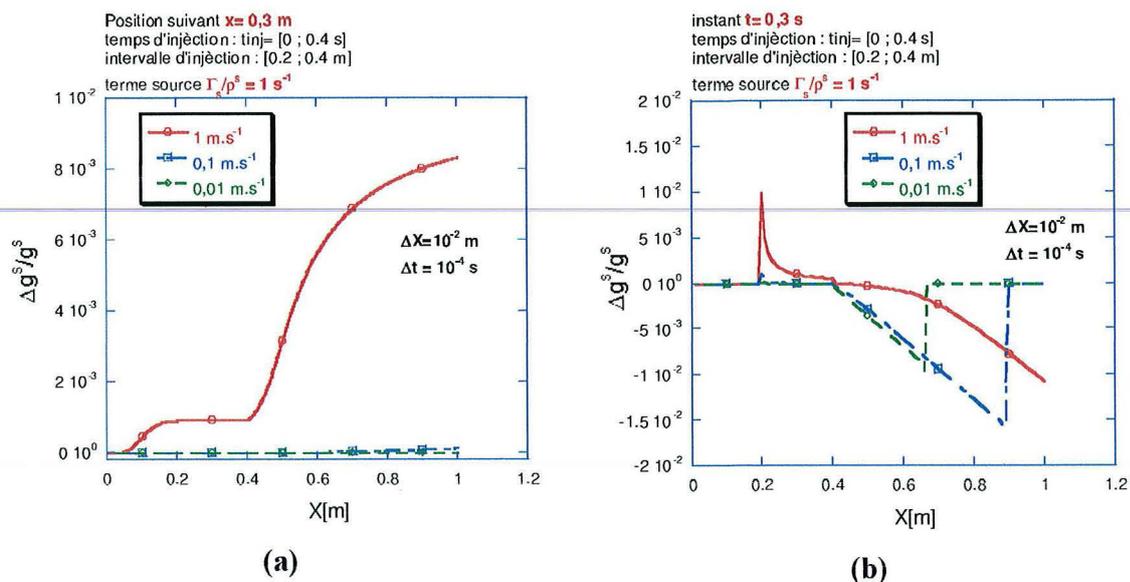


figure IV 10 : Evolution au cours du temps (a) et de la position (b) de l'erreur relative en fonction de la vitesse

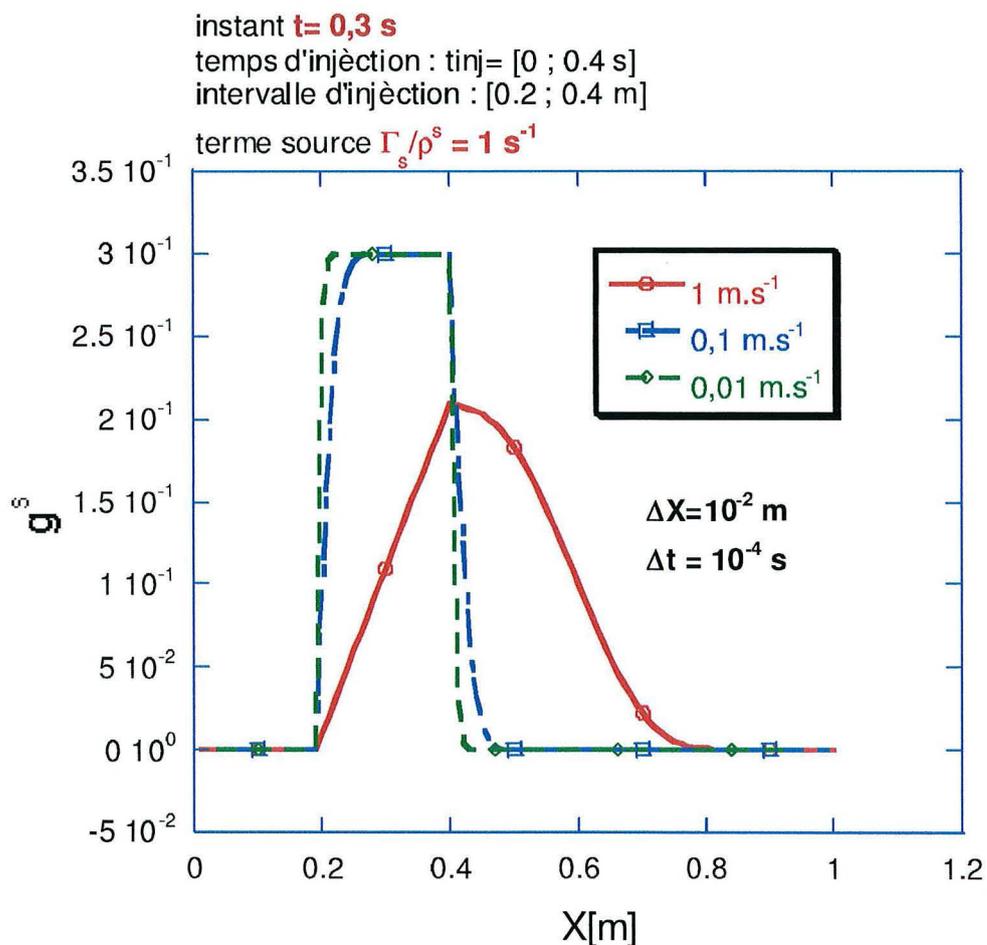


figure IV 11 : Evolution en fonction de la position de la fraction de solide calculée avec la méthode de séparation au temps de calcul $t = 0,3$ s

IV - 1.4.5. Algorithme de résolution :

Après cet essai sur un cas **1D** de la méthode de séparation, nous avons mis en place un algorithme, pour résoudre le système d'équations du modèle. Cet algorithme est présenté sur la figure IV 12.

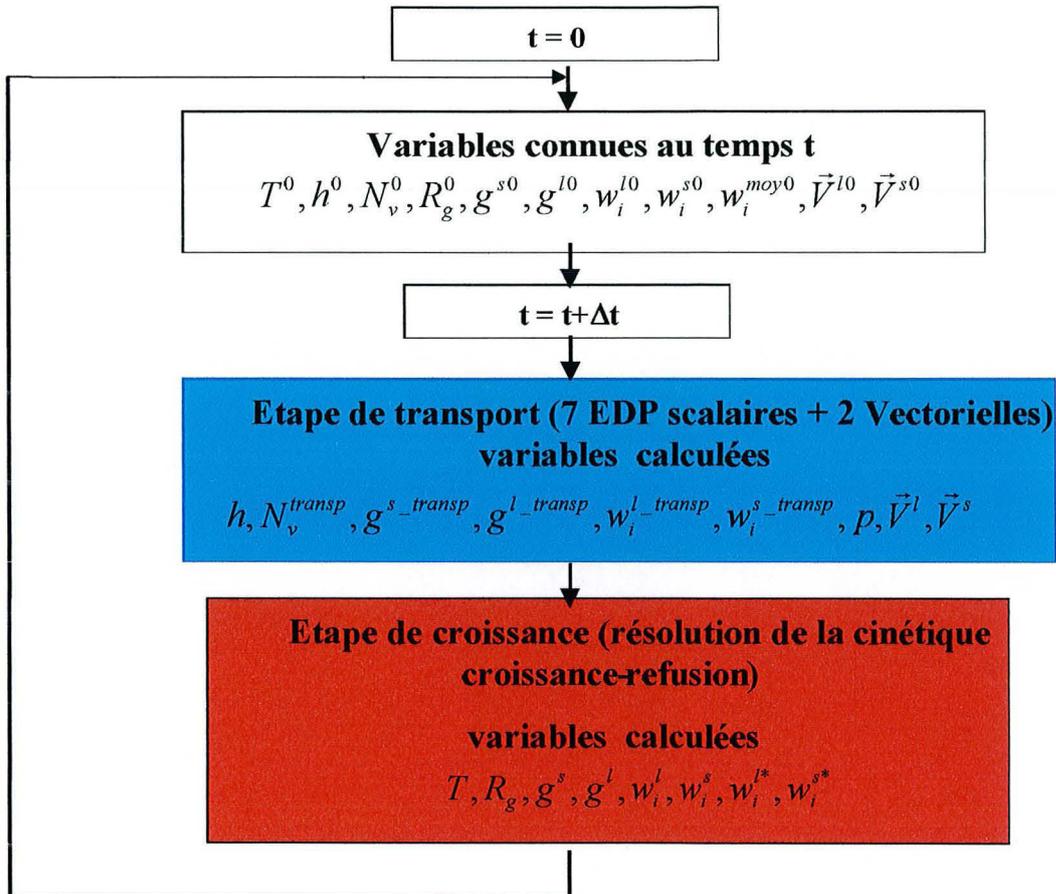


figure IV 12: Algorithme de résolution

IV - 1.4.5.1. Détails des calculs : transport et croissance

□ **Première étape : Transport**

Les équations de transport résolues dans le bloc macroscopique de l'algorithme ci-dessus sont les suivantes :

$$\frac{\partial(\rho^l g^l h^l + \rho^s g^s h^s)}{\partial t} + \nabla(\rho^l g^l h^l \cdot \langle \vec{V}^l \rangle^l + \rho^s g^s h^s \cdot \langle \vec{V}^s \rangle^s) = \nabla[\lambda_{ef} \bar{\nabla}(T)] + \dot{n} V_s^0 \rho^s (h^s - h^l) \quad (\text{IV.10})$$

$$\nabla(\rho^l g^l \langle \vec{V}^l \rangle^l) = -\nabla(\rho^s g^s \langle \vec{V}^s \rangle^s) \quad (\text{IV.5})$$

① modèle

$$\langle \vec{V}^s \rangle^s = \langle \vec{V}^l \rangle^l = \vec{V} \quad \frac{\partial(\bar{\rho} \vec{V})}{\partial t} + \nabla(\bar{\rho} \vec{V} \cdot \vec{V}) = \nabla[\mu_{eff} \bar{\nabla}(\vec{V})] - \bar{\nabla} \hat{p} + (\bar{\rho} - \rho^{ref}) \cdot \vec{g} \quad (\text{IV.12})$$

② modèle $\langle \vec{V}^s \rangle^s \neq \langle \vec{V}^l \rangle^l$

$$\begin{array}{l} \text{si} \\ g^s < g_{pack}^s \end{array} \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial(\bar{\rho} \vec{V}^l)}{\partial t} + \frac{1}{g^l} \nabla(\bar{\rho} \vec{V}^l \cdot \vec{V}^l) = \nabla[\mu^l \bar{\nabla}(\vec{V}^l)] - \bar{\nabla} \hat{p} + (\bar{\rho} - \rho^{ref}) \cdot \vec{g} \\ \langle \vec{V}^s \rangle^s = \langle \vec{V}^l \rangle^l + \frac{4}{3} \frac{(2R_g)^2 g^l}{C_d \mu^l R_e} (-\nabla \hat{p} + (\rho^s - \rho^{ref}) \vec{g}) \end{array} \right. \quad (\text{IV.18})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle \vec{V}^s \rangle^s = \langle \vec{V}^l \rangle^l + \frac{4}{3} \frac{(2R_g)^2 g^l}{C_d \mu^l R_e} (-\nabla \hat{p} + (\rho^s - \rho^{ref}) \vec{g}) \end{array} \right. \quad (\text{IV.15})$$

$$\begin{array}{l} \text{Sinon} \\ g^s \geq g_{pack}^s \end{array} \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial(\rho^l \vec{V}^l)}{\partial t} + \frac{1}{g^l} \nabla(\rho^l \vec{V}^l \cdot \vec{V}^l) = \nabla[\mu^l \bar{\nabla}(\vec{V}^l)] - \frac{g^l \mu^l}{K} \vec{V}^l - g^l \bar{\nabla} \hat{p} + g^l (\rho^l - \rho^{ref}) \cdot \vec{g} \\ \langle \vec{V}^s \rangle^s = 0 \end{array} \right. \quad (\text{IV.19})$$

$$\frac{\partial N_v}{\partial t} + \nabla(N_v \cdot \langle \vec{V}^s \rangle^s) = \dot{n} \quad (\text{IV.1})$$

$$\frac{\partial \rho^s g^s}{\partial t} + \nabla(\rho^s g^s \cdot \langle \vec{V}^s \rangle^s) = \dot{n}_s \rho^s V_s^0 \quad (\text{IV.2.1})$$

$$\frac{\partial(\rho^l g^l w_i^l)}{\partial t} + \nabla(\rho^l g^l w_i^l \cdot \langle \vec{V}^l \rangle^l) = -w_i^l \dot{n} V_s^0 \rho^s \quad (\text{IV.6.1})$$

$$\frac{\partial(\rho^s g^s w_i^s)}{\partial t} + \nabla(\rho^s g^s w_i^s \cdot \langle \vec{V}^s \rangle^s) = w_i^s \dot{n} V_s^0 \rho^s \quad (\text{IV.7.1})$$

Chaque équation de transport a été discrétisée suivant la méthode des volumes finis [38]. Le schéma d'intégration est un schéma implicite et nous avons utilisé des lois de variation locale de type 'power-law' pour discrétiser les termes de transport convectif et diffusif. Le champ de vitesse de la phase liquide est résolu par la méthode SIMPLE [38]. Dans le cas où les vitesses des phases solide et liquide sont différentes, la méthode SIMPLE est appliquée pour les équations IV.18 et IV.5. Dans l'équation de bilan de masse global IV.5, le terme lié au transport de la phase solide est calculé avec la dernière valeur connue de la vitesse de cette phase. Une fois qu'une nouvelle vitesse de la phase liquide a été calculée, la vitesse de la phase solide est calculée à partir de l'équation IV.15.

La discrétisation du bilan d'énergie (IV.10) est effectuée après avoir réécrit cette équation sous la forme :

dans le cas $\langle \vec{V}^s \rangle^s \neq \langle \vec{V}^l \rangle^l$:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}h)}{\partial t} + \bar{\rho}\vec{V}\nabla(h) = \nabla(\lambda_{ef}\vec{\nabla}(T)) - \bar{\rho}\vec{V}\nabla(h) - \bar{\rho}C_p\vec{V}\nabla(T) + \bar{\rho}L\nabla(\vec{V}^s) + \rho^s\dot{n}V_s^0(h^s - h^l) \quad \text{IV.10.1}$$

dans le cas $\langle \vec{V}^s \rangle^s = \langle \vec{V}^l \rangle^l$:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}h)}{\partial t} + \bar{\rho}\vec{V}\nabla(h) = \nabla(\lambda_{ef}\vec{\nabla}(T)) + \rho^s\dot{n}V_s^0(h^s - h^l) \quad \text{IV.10.2}$$

Ces deux équations comportent deux inconnues : T et h. Nous les avons résolues en utilisant la méthode enthalpique [39] : on prend l'enthalpie h comme variable principale et on estime la valeur de la température en fonction de l'enthalpie en utilisant un développement de Taylor à l'ordre un. En un point, à une itération donnée, et à un instant donné, on estime la température par :

$$T_p = T_p^* + \left(\frac{\partial T}{\partial h} \right)_p^* (h_p - h_p^*) \quad \text{IV.10.3}$$

Où l'exposant * désigne la dernière variable calculée à l'itération précédente au pas de temps considéré. On détermine la dérivée de la température par rapport à l'enthalpie dans l'équation (IV.10.3) grâce aux équations suivantes :

- $g^l = 1$ ou $g^l = 0$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial h} \right)^* = \frac{1}{c_p} \quad \text{IV.10.4}$$

- $0 < g^l < 1$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial h} \right)^* = \frac{1}{c_p + L \left(\frac{\partial g^l}{\partial t} \right)^*} \quad \text{IV.10.5}$$

□ Deuxième étape : Croissance - Refusion

Les équations établies pour la résolution de la partie croissance/refusion des grains forment le système suivant :

$$\left. \begin{array}{l}
 1. \quad (w_i^{l0*} - w_i^{s0*})\Gamma_s = \frac{S_v \rho^l D_i^l}{\delta_i^l} (w_i^{l*} - w_i^l) + \frac{S_v \rho^s D_i^s}{\delta_i^s} w_i^{s*} - w_i^s \\
 2. \quad T = T_f + \sum_i^n m_i w_i^{l*} \\
 3. \quad dh = c_p dT - L dg^s \\
 4. \quad \frac{\delta g^{s-crois}}{dt} = \frac{\Gamma_s}{\rho^s} \\
 5. \quad w_i^{s*} = k_i w_i^{l*} \\
 6. \quad \frac{d(g^l w_i^l)^{crois}}{dt} = -w_i^{l*} \frac{\Gamma_s}{\rho^s} + \frac{S_v D_i^l}{\delta_i^l} (w_i^{l*} - w_i^l) \\
 7. \quad \frac{d(g^s w_i^s)^{crois}}{dt} = w_i^{s*} \frac{\Gamma_s}{\rho^s} + \frac{S_v D_i^s}{\delta_i^s} (w_i^{s*} - w_i^s) \\
 8. \quad \delta_i^l = \left[\frac{1}{\frac{1}{1-g^{s1/3}} + \frac{1}{3g^l} Sc^{1/3} Re^a} \right] R_g, \quad \delta_i^s = \frac{R_g}{5}, \quad R_g = \left(\frac{3g^s}{4\pi N_v} \right)^{1/3}
 \end{array} \right\} \text{IV.28}$$

Les inconnues de ce système d'équations sont : $\Gamma_s, T, g^s, w_i^{l*}, w_i^{s*}, w_i^l, w_i^s, R_g$, l'exposant 0 affecté à une variable, désigne la valeur de cette variable à l'instant t.

Pour résoudre le système d'équations IV.28, nous avons procédé comme suit :

Dans une première étape, nous avons résolu les équations linéaires 1, 2, 3, 4 et 5 du système IV.28, pour calculer les variables suivantes : $\Gamma_s, T, g^s, w_i^{l*}, w_i^{s*}$. Cette résolution est obtenue avec les développements suivants :

Sachant que la variation de la température et de la fraction de solide sur un pas de temps de calcul Δt sont dues au transport et à la croissance, il vient :

$$dT = \delta T^{transp} + \delta T^{crois} \quad \text{IV.29}$$

$$dg^s = \delta g^{s-transp} + \delta g^{s-crois} \quad \text{IV.30}$$

Ceci permet d'écrire la variation en fonction du temps de l'enthalpie (équation 3 du système IV.28) comme suit :

$$dh = c_p dT - L(dg^s) = c_p (\delta T^{transp} + \delta T^{crois}) - L(\delta g^{s-transp} + \delta g^{s-crois}) \quad \text{IV.31}$$

$$\text{avec : } \delta T^{transp} + \delta T^{crois} = T - T^0$$

d'où :

$$c_p T = c_p T^0 + dh + L \delta g^{s-transp} + L \delta g^{s-crois} \quad \text{IV.32}$$

La combinaison de l'équation IV.32 avec les équations 2 et 4 du système d'équation IV.28 permet d'écrire que :

$$c_p \sum_i^n m_i w_i^{l*} - L \frac{dt}{\rho^s} \{\Gamma_s\} = c_p (T^0 - T_f) + dh + L \delta g^{s-transp} \quad \text{IV.33}$$

il est alors possible d'établir le système linéaire à n+1 inconnues $(\Gamma_s, w_i^{l*} \quad (i = 1, n))$:

$$\left[\begin{array}{l} 1. \left(\frac{S_v \rho^l D_i^l}{\delta_i^l} + k_i \frac{S_v \rho^s D_i^s}{\delta_i^s} \right) w_i^{l*} - (w_i^{l*0} - w_i^{s*0}) \Gamma_s = \frac{S_v \rho^l D_i^l}{\delta_i^l} w_i^l + \frac{S_v \rho^s D_i^s}{\delta_i^s} w_i^s \\ 2. c_p \sum_i^n m_i w_i^{l*} - L \frac{dt}{\rho^s} \{\Gamma_s\} = c_p (T^0 - T_f) + dh + L \delta g^{s-transp} \end{array} \right] \quad \text{IV.34}$$

La résolution de ce système d'équations permet de calculer les variables suivantes : w_i^{l*}, Γ_s

Après avoir déterminé ces variables, la température est calculée par l'équation 2 du système IV.28, la fraction solide par l'équation 4 et le titre massique de la phase solide à l'interface liquide/solide par l'équation 5.

Après cette résolution, nous avons calculé les titres massiques des phases liquide et solide et le rayon moyen des grains globulaires comme suit :

$$w_i^l = \left[\frac{(g^l w_i^l)^{transp} + dt(-w_i^{l*0} \frac{\Gamma_s}{\rho^l} + (w_i^{l*} - w_i^{l-transp}) \frac{S_v D_i^l}{\delta_i^l})}{g^l} \right]$$

$$w_i^s = \left[\frac{(g^s w_i^s)^{transp} + dt(w_i^{s*0} \frac{\Gamma_s}{\rho^s} + (k_i w_i^{l*} - w_i^{s-transp}) \frac{S_v D_i^s}{\delta_i^s})}{g^s} \right]$$

$$R_g = \left(\frac{3g^s}{4\pi N_v} \right)^{1/3}$$

En annexe A.IV nous avons présenté l'algorithme détaillé, élaboré pour la résolution globale de l'ensemble d'équations micro-macro présentées ci-dessus, avec tous les détails sur les cas limites qui peuvent se présenter comme la fin de la solidification ou la refusion complète des grains dans le bain liquide.

IV - 2. CONCLUSIONS :

Dans cette étude un modèle diphasique prenant en compte le mouvement relatif de la phase solide par rapport à la phase liquide, a été développé. Un algorithme de calcul mettant en œuvre une méthode de séparation entre les termes de transport et les termes de croissance a été mis au point. Ce modèle constitue la modélisation globale mise en place pour décrire le mouvement et la croissance de grains équiaxes globulaires pendant la solidification.

Dans ce modèle, la phase solide peut se déplacer à la même vitesse que la phase liquide, ou à une vitesse différente pour le cas $\langle \vec{v}^s \rangle^s \neq \langle \vec{v}^l \rangle^l$, la phase solide étant immobile ($\langle \vec{v}^s \rangle^s = \vec{0}$), lorsque la fraction de solide locale est supérieure ou égale à une valeur limite (g_{pack}^s). Cette fraction de solide limite correspond à la notion de cohérence du squelette solide.

Dans le prochain chapitre, nous montrons l'application du modèle à un lingot de petites dimensions, puis à un lingot industriel.

CHAPITRE V :

SIMULATION NUMERIQUE AVEC PRISE EN COMPTE DU MOUVEMENT DE LA PHASE SOLIDE (GRAINS EQUAXES GLOBULAIRES)

V - INTRODUCTION :

Cette partie est consacrée aux applications numériques réalisées avec le modèle diphasique sur un petit lingot défini comme cas de référence (voir figure V. 1) et sur un lingot industriel. Les premiers calculs réalisés sur le cas de référence ont été obtenus en supposant que la phase solide se déplace à la même vitesse que la phase liquide ($\langle \vec{v}^s \rangle^s = \langle \vec{v}^l \rangle^l$). Ces premiers essais ont servi notamment pour tester la cohérence du modèle et la robustesse de l'algorithme de calcul. Dans la deuxième partie de cette étude, nous présentons les calculs réalisés en prenant en compte le mouvement propre de la phase solide ($\langle \vec{v}^s \rangle^s \neq \langle \vec{v}^l \rangle^l$). Nous avons alors étudié l'influence du mouvement propre de la phase solide sur la macroségrégation et sur la mise en place des structures.

V - 1. ANALYSE NUMERIQUE DANS LE CAS : $\langle \vec{v}^s \rangle^s = \langle \vec{v}^l \rangle^l$

V - 1.1. définition du cas de référence :

La figure V. 1 représente le lingot que nous avons utilisé comme cas de référence. Il s'agit d'une cavité carrée de 10 cm de coté, refroidie par ses deux faces verticales. Les faces horizontales sont supposées parfaitement isolées. La condition aux limites pour décrire le refroidissement sur les faces verticales est une condition de type Fourier avec :

- Le coefficient de convection thermique : $h_{cv} = 100 \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-1}$,
- La température extérieure : $T_{ext} = 20^\circ \text{C}$.

Nous avons étudié la solidification d'un alliage binaire Fe-1,015 %mass C dont les propriétés sont rapportées dans le Tableau V. 1. Sa température de liquidus est égale à 1461°C . Les conditions aux limites imposées sur les deux faces verticales étant symétriques, le domaine a été restreint à une moitié de carré. La géométrie utilisée est cartésienne et le maillage est constitué de 10 mailles sur la largeur par 20 mailles sur la hauteur. Il s'agit d'un maillage relativement grossier. Des calculs ont été réalisés avec un maillage 20x40 et nous n'avons pas noté de différences significatives.

Les autres conditions sont les suivantes :

- La température initiale du bain liquide: $T_{init} = 1470^\circ \text{C}$, correspond à une surchauffe (T-liq) de $9,1^\circ \text{C}$ pour l'alliage étudié dans ce travail.
- Conditions de non-glissement pour les vitesses sur les parois de la cavité.
- Pas de temps utilisé pour les calculs : 10^{-2} s

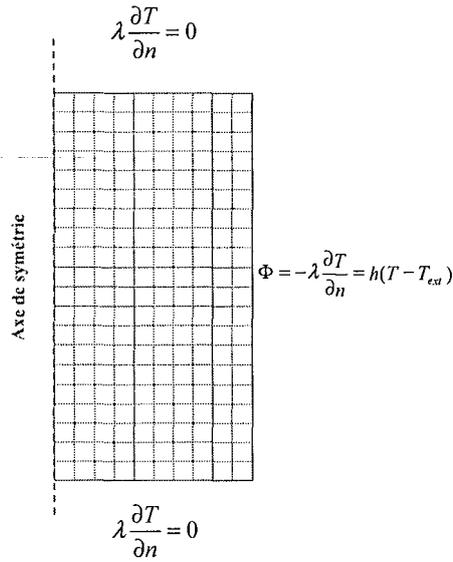


figure V. 1 : Domaine d'étude

➤ *Propriétés thermophysiques et données thermodynamiques de l'alliage étudié :*

Le Tableau V. 2 présente les propriétés thermophysiques et les données thermodynamiques de l'alliage (Fe-1,015 % mass C).

grandeurs physico-chimiques		valeurs numériques
Titre massique en carbone	w^1 (%)	1,015
Coefficient de partage	k	0,34
Pente de liquidus	m (K. % ⁻¹)	-62,3
Coefficient de diffusion du carbone dans la Phase liquide	D^l (m ² .s ⁻¹)	2.10^{-8}
Coefficient de diffusion du carbone dans la Phase solide	D^s (m ² .s ⁻¹)	$1,5.10^{-11}$
Température de liquidus	T_L (°C)	1461
Température de Fusion du fer pur	T_f (°C)	1524,2
Chaleur latente	L (J.kg ⁻¹)	$0,309.10^6$
masse volumique de référence	ρ^{ref} (kg.m ⁻³)	7060
masse volumique du solide	ρ^s (kg.m ⁻³)	7351
Viscosité dynamique du liquide	μ^l (Pa.s)	0,0042
Conductivité thermique	λ (W.m ⁻¹ .K ⁻¹)	30
Chaleur spécifique massique	c_p (J.kg ⁻¹ .K ⁻¹)	715
Coefficient d'expansion thermique	β_T (K ⁻¹)	$8,853.10^{-5}$
Coefficient d'expansion solutale	β_c (% ⁻¹)	-0,0141

Tableau V. 2 : Données thermophysiques et thermodynamiques de l'alliage

➤ **Loi d'injection de fragments :**

Dans les chapitres II et III, nous avons montré que la densité de flux de fragments détachés des structures dendritiques dépendait essentiellement de la convection et de la composition en éléments d'alliages (voir figure III 16). A partir de ces résultats, plusieurs lois de création de fragments cristallins ont été envisagées et étudiées. La loi avec laquelle nous avons fait les calculs dans cette première partie est la suivante : « *les fragments se forment à la paroi si la température locale (T) est inférieure à la température de liquidus (T_L) et tant que la fraction de liquide g^l reste supérieure à 0,9* ». Durant cette période, la quantité de fragments générés à la paroi est quantifiée par un flux de fragments par unité de surface de paroi. Cette densité de flux est supposée constante dans l'intervalle de fraction de liquide : [0,9 ; 1]. La densité de flux de fragments utilisée pour le calcul est de 10^6 fragments.m⁻².s⁻¹ et la taille (rayon) des fragments supposés sphériques est de 1 μ m. Le choix de cette taille initiale est quelque peu arbitraire, une petite taille de fragments revient à supposer que la croissance des grains se fait pendant leur mouvement plutôt que sur la paroi. Le temps de création des fragments n'est de fait pas un paramètre limitant pour l'injection de nouveaux fragments.

V - 1.2. Résultats et interprétation :

Pour étudier et comprendre les résultats obtenus par notre modèle, nous avons fait des comparaisons avec les résultats de deux autres modèles. Le premier modèle considère que le solide et le liquide se déplacent toujours à la même vitesse et que la cinétique de croissance-refusion des grains suit la règle des bras de levier (équilibre complet entre les phases liquide et solide). Le deuxième modèle considère que la phase solide est immobile et que la cinétique suit la règle des bras de levier.

Pour différencier les résultats des trois calculs, nous avons désigné les trois modèles de la façon suivante :

- **Modèle $v_s=v_l$ + croissance**
- **Modèle $v_s=v_l$ + bras de levier**
- **Modèle solide fixe + bras de levier**

Les figures V 2 , V 3 et V 4 présentent les cartes de température et de fraction de liquide pour les trois modèles au temps 10 s. L'échelle de température choisie est telle que les zones de couleur rouge sont à une température supérieure à la température de liquidus correspondant à la composition nominale. Ces trois figures montrent qu'il existe des différences significatives dans l'évolution des champs de température, de vitesse et de fractions de liquide, entre les trois calculs.

Des différences très significatives peuvent être remarquées dans l'évolution de la fraction de liquide ou de solide. La fraction de solide calculée par le modèle $v_s=v_l$ +croissance, n'est pas nulle dans les zones surchauffées, les grains survivent dans ces zones (voir figure V. 2), contrairement aux deux modèles présentés sur les figures V 3 et V 4. En effet, pour ces deux modèles, la règle des bras de levier est employée : ainsi au-dessus de la température de liquidus, la fraction de solide est nécessairement nulle. Par conséquent, le bain liquide évolue différemment suivant le modèle utilisé. On constate notamment que l'abaissement de la température du puits liquide est moins important dans le cas des deux modèles supposant la règle des leviers. En effet, l'abaissement de la surchauffe est dû au flux de chaleur évacué à l'interface puits liquide/zone pâteuse dans le cas des modèles supposant la règle des leviers, alors que pour le premier modèle, l'effet thermique induit par la refusion des grains s'ajoute à l'effet précédent.

Sur la figure V. 4 correspondant au cas où le solide est immobile, on remarque que le solide se forme et reste à la paroi. Ceci explique les plus grandes valeurs de la fraction de solide obtenues près de la paroi, comparativement aux deux autres modèles. On peut observer également l'effet d'un retard à l'équilibre dans la croissance des grains en comparant les valeurs de la fraction solide près de la paroi sur les figures V 2 et V 3. Dans le cas du modèle $v_s=v_l$, avec bras de levier, la fraction de solide dans le coin inférieur droit du domaine est plus importante que dans le cas du modèle avec croissance. Cela conduit à une fraction de solide plus forte pour le modèle des leviers dans toute la partie inférieure de la cavité.

La fraction de solide étant plus faible à la paroi verticale dans le cas du modèle $v_s =v_l$ et croissance, il s'ensuit que la température dans cette zone est plus faible avec ce modèle, le flux extrait par la paroi étant sensiblement le même globalement.

Enfin, la valeur maximale de la vitesse moyenne débitante est plus grande dans le cas des deux modèles $v_s=v_l$, ceci est dû au fait que la variation de la masse volumique est plus importante dans ce cas, comparée au cas $v_s=0$. En effet, comme nous l'avons fait remarquer précédemment, la force motrice pour la convection naturelle est augmentée dans le cas $v_s=v_l$ du fait de la contribution de la phase solide dans le terme de gravité. Ainsi, près de la paroi verticale, la densité moyenne de grains est plus élevée du fait de la présence des grains, ce qui augmente l'intensité du mouvement comparé au cas $v_s=0$.

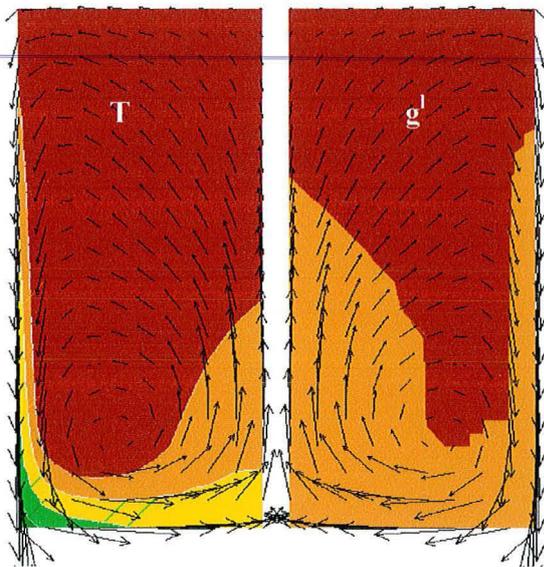
Cartes de températures et de fractions liquides au temps de calcul 10 secondes

Tmin= 1453,1° C

g^l min=0,99

Tmax= 1470° C

g^l max=1



Température

Fraction liquide

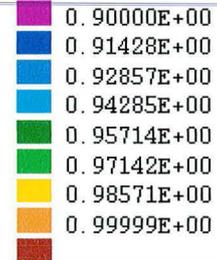
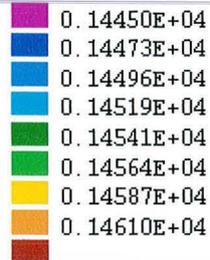


figure V. 2 : cartes de température et de fraction liquide (cas: $V^s=V^l$ et croissance de grains)

V^l _max= 2,62 cm/s

Tmin= 1460,1° C

g^l min=0,9768

Tmax= 1470° C

g^l max=1

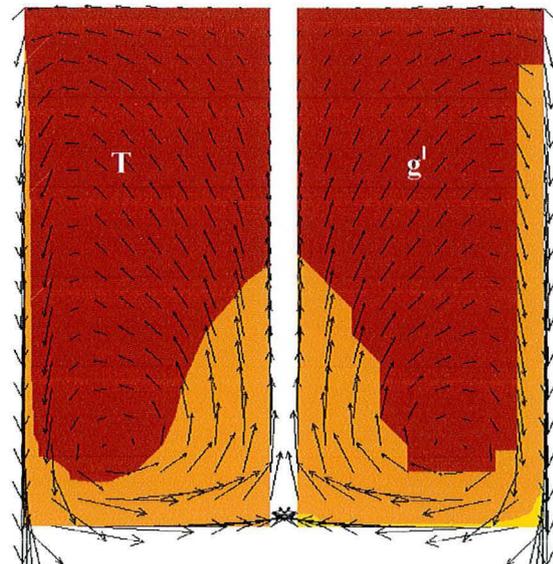


figure V. 3 : cartes de température et de fraction liquide (cas: $V^s=V^l$, bras de levier)

V^l _max = 2,6 cm/s

Tmin= 1457,5° C

g^l min=0,92

Tmax= 1470° C

g^l max=1

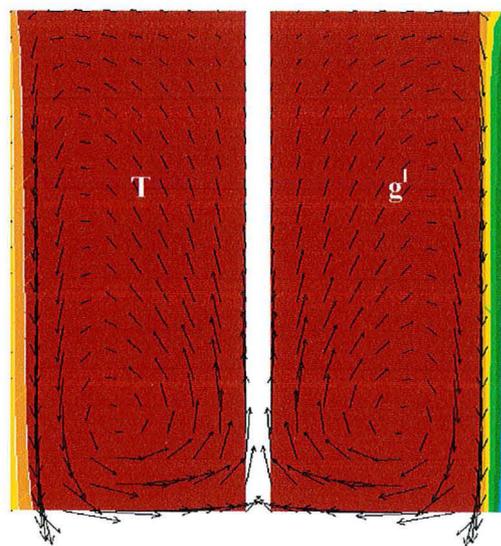


figure V. 4 : cartes de température et de fraction liquide (cas: $V^s=0$, bras de levier)

$V^s=0$, V^l _max = 1,9 cm/s

La figure V. 5 représente les cartes de densité volumique et de rayon moyen des grains au même temps 10 secondes dans le cas du modèle $v^s=v^l$ avec croissance. On observe dans les zones en surchauffe des grains de petite taille alors que les plus grandes tailles sont observées dans la partie inférieure du domaine. Dans les zones surchauffées, les grains se trouvent en situation de refusion alors que dans les zones surfondues ils croissent. Les grains commencent à croître dans la zone supérieure au niveau de la paroi verticale et leur croissance se poursuit au fur et à mesure de leur descente le long de cette paroi. La carte de densité de grains est également fortement influencée par les mouvements de convection. Le temps correspondant à cette carte étant court par rapport au temps total de solidification, on observe par la suite une homogénéisation de la densité de grains dans la cavité.

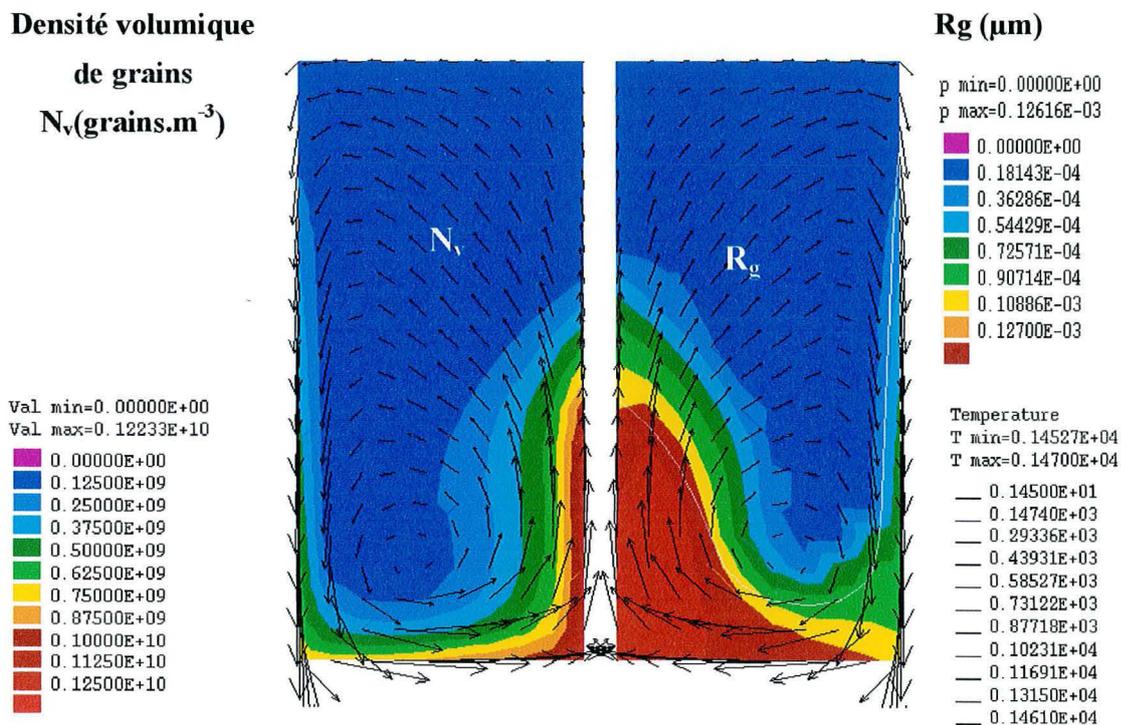


figure V. 5 :cartes de rayon moyen et de la densité volumique de grains
 (cas : $V^s = V^l$ avec croissance de grains)

Après avoir présenté les résultats obtenus et montré les différences qui existent entre les trois modèles au temps de 10 secondes, nous avons étendu cette comparaison à d'autres temps de calcul. Un des résultats concerne le temps d'évacuation complète de la surchauffe. On constate que la surchauffe est évacuée en premier dans le cas du modèle $v^s = v^l +$ croissance (voir Tableau V. 3).

légèrement différents de celui obtenu avec le modèle avec croissance. La courbe de température, dans le cas des modèles avec solide mobile présente un plateau, que nous relierons à l'évolution de la fraction de solide (figure V 7 (b-2)). Ce plateau correspond au moment où la vitesse de la phase solide devient quasi nulle (figure V 7 (c)), c'est à dire pour des valeurs de la fraction de liquide de l'ordre de 0,4.

La figure V 8 présente les évolutions de la densité volumique, de la taille moyenne des grains et du titre massique en carbone dans la phase liquide, obtenues pour les modèles $v_s=v_l$. La figure V 8 (a-1) montre qu'avant l'évacuation de la surchauffe (environ 20 s), la densité volumique de grains obtenue par le modèle avec croissance est très faible. Après l'évacuation de la surchauffe, cette densité croît en continu jusqu'à atteindre un palier où elle se stabilise (figure V 8 (a-2)), du fait du blocage des grains lorsque la fraction liquide est inférieure à 0,4. Les tailles moyennes de grains représentées sur les figures V 8 (b-1) et (b-2) montrent que les grains suivent trois phases d'évolution. Une première phase où la taille des grains est quasi nulle, suivie d'une phase durant laquelle la taille moyenne des grains augmente rapidement. Cette phase est due à la croissance et à l'apport de nouveaux fragments qui ne refondent plus. Enfin, une troisième phase de croissance contrôlée par la densité volumique de grains et par la surfusion locale. Pour les deux modèles, les grains atteignent des rayons moyens d'environ 350 μm pour des densités volumiques de l'ordre de $5 \cdot 10^9 \text{ grains.m}^{-3}$.

On constate que les évolutions des tailles des grains obtenues avec les deux modèles $v_s=v_l$ + bras de levier et $v_s=v_l$ + croissance (figure V 8 (b-2)) sont assez proches, tant pour l'évolution des grains que pour le titre massique en carbone dans la phase liquide (figure V 8 (c)).

	$V^s=0$ Bras de levier	$V^s=V^l$ Bras de levier	$V^s=V^l$ Croissance-Refusion
temps d'évacuation de la surchauffe (s)	140	61	51

Tableau V. 3 : temps d'évacuation de la surchauffe du bain liquide

En plus de l'évacuation d'un flux de chaleur à travers les parois, le modèle avec croissance prend en compte la présence de grains dans les zones surchauffées. Leur refusion consomme de l'énergie et entraîne ainsi un abaissement plus rapide de la surchauffe. On constate également dans ce tableau que la plus grosse différence se situe entre les modèles $v_s=0$ et $v_s=v_l$. En effet, même en supposant la loi des leviers, l'effet d'abaissement de la surchauffe par refusion des grains existe, cependant l'équilibre complet et immédiat ne permet pas d'entraîner des grains dans tout le puits liquide, ce qui en limite son effet.

Pour montrer les principales différences qui existent entre les trois modèles et avancer dans la compréhension des résultats obtenus avec le modèle $v_s=v_l$ +croissance, nous avons présenté sur les figures V 7 et V 8 les évolutions de température, de fraction de liquide et du module de la vitesse, dans la maille de calcul localisée sur la figure V 6.

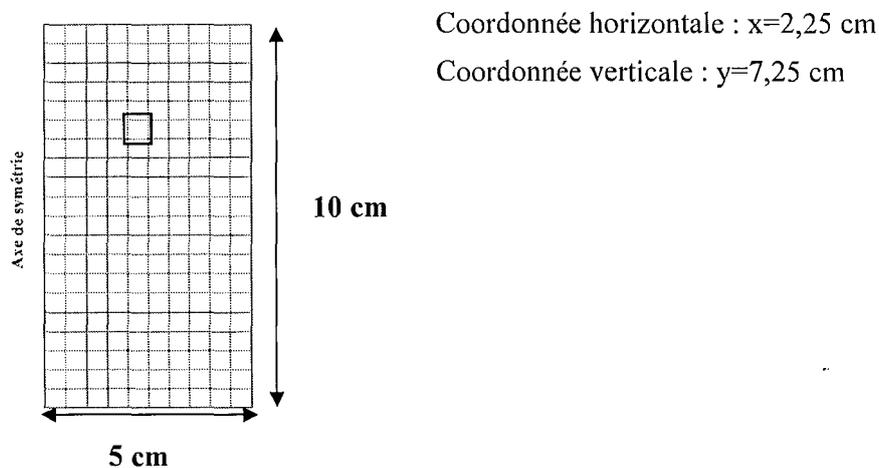


figure V 6 : position de la maille dans le domaine

La figure V 7 (a-1) présente l'évolution au cours du temps de la température pour les trois modèles sur une période de temps allant jusqu'à 100 s. Cette courbe illustre à nouveau l'écart entre le modèle solide fixe et les deux autres modèles. Sur la figure V 7 (a-2) rapportant l'évolution de la température sur une plus grande période de temps, on note qu'en fin de solidification, les modèles avec la loi des leviers conduisent à des résultats similaires qui sont

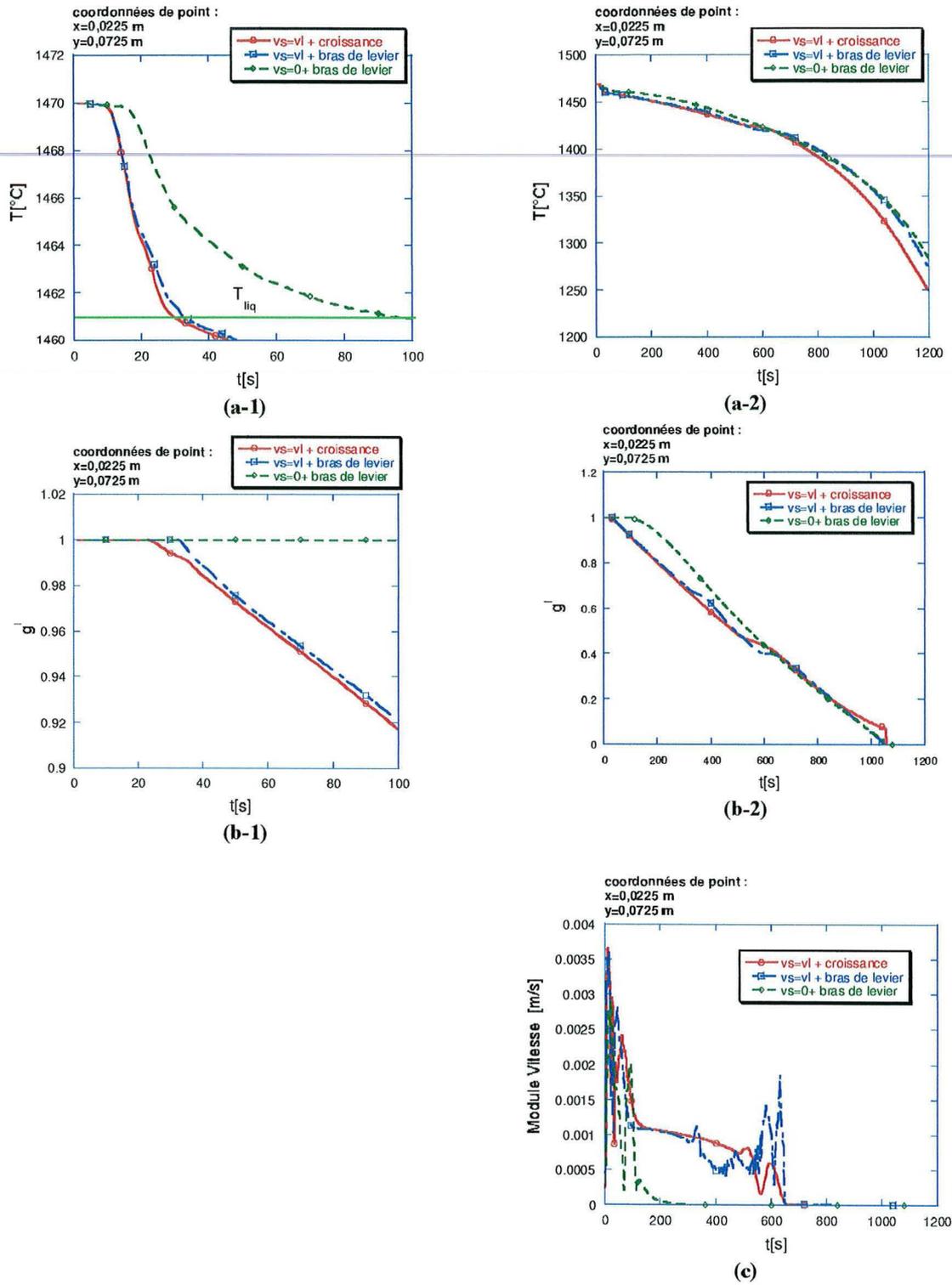


figure V 7: Evolutions au cours du temps de la température (a-1), (a-2), de la fraction de liquide (b-1), (b-2) et du module de vitesse (c), obtenus au point de coordonnées : (x=0,025 et y=0,0725)

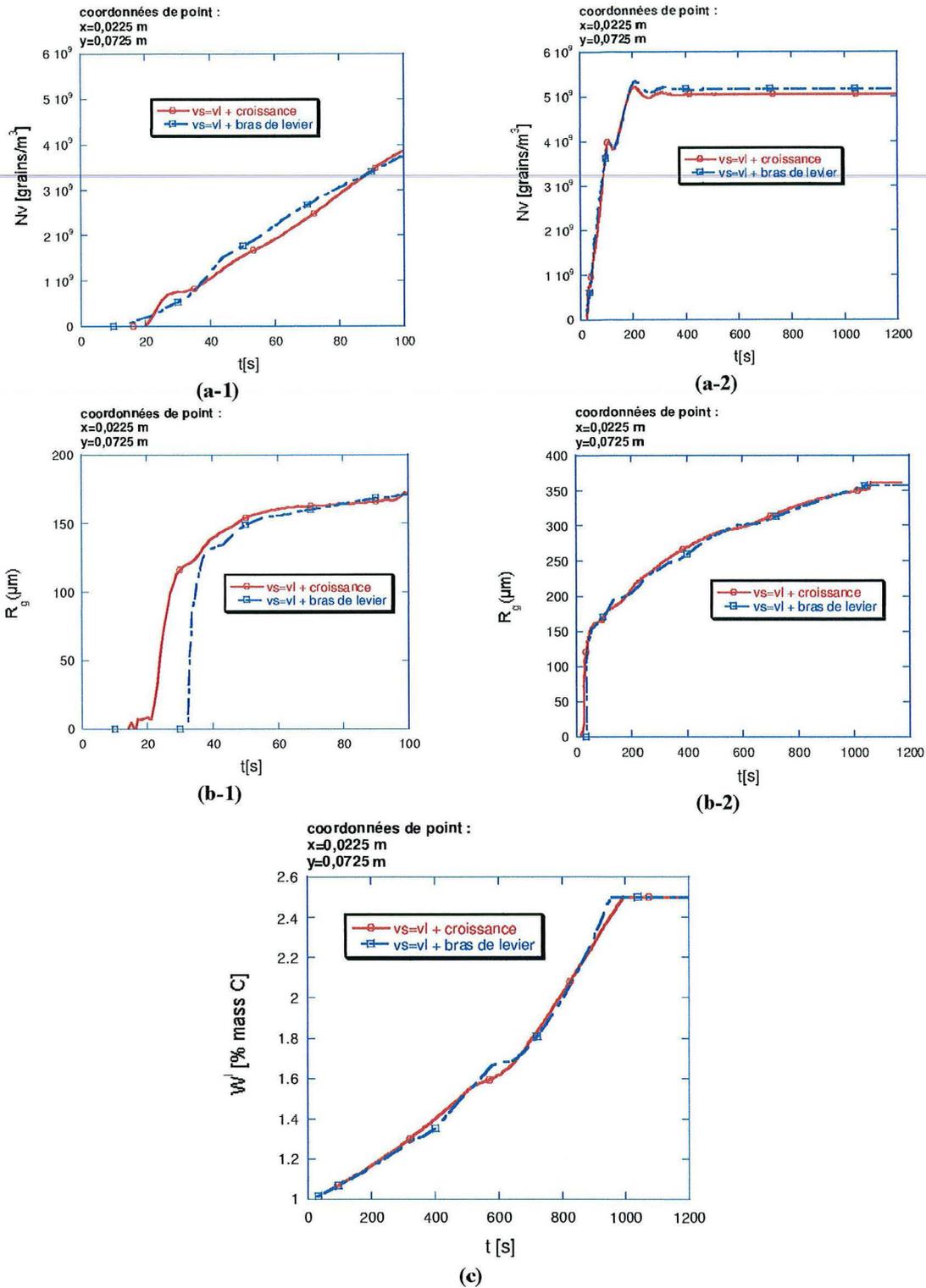


figure V 8 : Evolutions au cours du temps de la densité volumique (a-1), (a-2) et de la taille des grains (b-1), (b-2) obtenues par les modèles $vs=vl$ au point de coordonnées : $(x=0,025$ et $y=0,0725)$

D'autres résultats quantitatifs sont donnés dans le Tableau V. 4. Ils représentent une comparaison entre les valeurs minimales et maximales des champs de température et de fraction liquide au temps 70 secondes pour les trois calculs :

	$V^l=0,38$ cm/s $V^s=0$ Bras de levier	$V^s=V^l=1,5$ cm/s Bras de levier	$V^s=V^l=1,53$ cm/s avec croissance
T_{\min} (C°)	1437,5	1453,7	1453,2
T_{\max} (C°)	1463,6	1460,9	1460,2
$T_{\max}-T_{\min}$ (C°)	26,1	6,8	7
g^l_{\min}	0,59	0,95	0,900
g^l_{\max}	1	0,9985	0,982

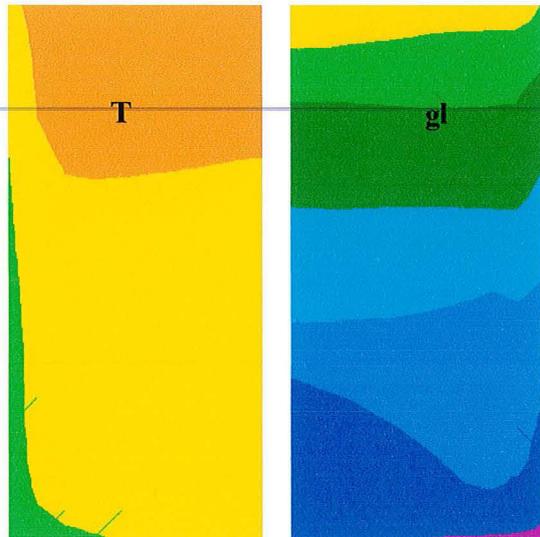
Tableau V. 4 : Comparaison des valeurs minimales et maximales de température et de fraction liquide pour les trois calculs au temps 70 secondes

La température minimale au temps 70 secondes est obtenue avec le modèle solide fixe. Dans ce cas, le solide formé reste aux parois (voir figure V 11), ce qui maintient des gradients thermiques importants dans ces endroits. Dans le cas où la phase solide est en mouvement, la température minimale est obtenue par le modèle $v^s=v^l$ +croissance (figure V 9). La croissance des grains étant limitée par la cinétique, le puits liquide descend en température aux dépens de la solidification qui est limitée.

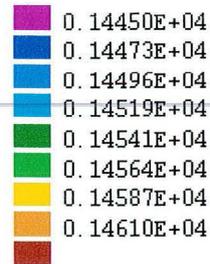
D'autre part, la température maximale est également obtenue avec le modèle solide fixe. Avec ce modèle à cet instant de calcul (70 secondes), il reste encore des zones complètement liquides (voir figure V 11) et surchauffées, où les gradients thermiques restent assez faibles.

Enfin, dans le cas où la phase solide est en mouvement, la température maximale est obtenue avec le modèle des leviers. La mise en mouvement des grains conduit à une homogénéisation du champ de température, la différence est de 7°C alors qu'elle est encore de 26°C dans le cas du modèle avec la phase solide fixe. Cette homogénéisation du champ de température est associée à une stratification de la fraction de liquide (voir figures V 9 et V 10). Les grains croissent le long de la paroi verticale en même temps qu'ils descendent, puis ils remontent dans la partie centrale. Les cartes de fraction de liquide sont totalement différentes de celles de la figure V 11 pour le modèle solide fixe où les iso- fractions de liquide sont plutôt verticales.

t=70 s



Température



Fraction liquide

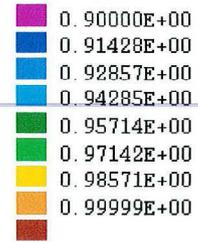


figure V 9 : cartes de température et de fraction de liquide (cas: $V^s=V^l$ et croissance de grains)
 $V^l_{max}= 1,53$ cm/s

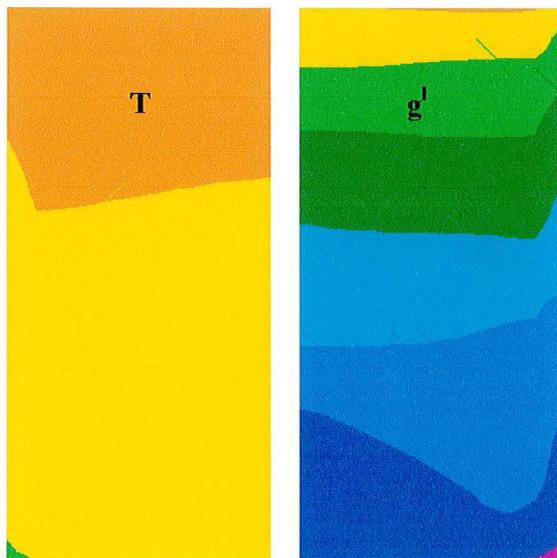


figure V 10 : cartes de température et de fraction de liquide (cas: $V^s=V^l$ et bras de levier)
 $V^l_{max}= 1,5$ cm/s

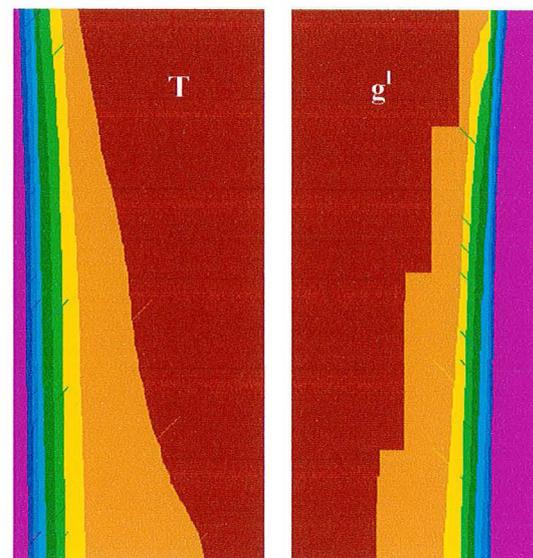


figure V 11 : cartes de température et de fraction de liquide (cas: $V^s=0$ et bras de levier)
 $V^l_{max}= 0,38$ cm/s

➤ *Autre loi de formation des grains:*

□ **Germination en volume :**

Une loi de formation de grains a été testée dans ce travail, cette loi suppose que *les fragments cristallins germent en volume une seule fois, lorsque la température (T) est égale à la température de liquidus (T_L)*. La densité volumique moyenne imposée est de 5.10^9 cristallites.m⁻³ qui est la densité volumique obtenue à la fin de la solidification avec la loi d'injection surfacique précédente. Dans ce calcul, le modèle $v^s=v^l + \text{croissance}$ est utilisé.

Les résultats obtenus (figure V 12) après 10 secondes montrent que la température minimale obtenue est supérieure à celle obtenue avec la loi d'injection précédente (figure V. 2). Cette fois les cristallites se forment en une seule fois en volume à la température de liquidus, dans ce cas, peu de populations seront refondues, alors que précédemment, l'injection est continue tant que la fraction de liquide n'a pas atteint la valeur 0,9. La fraction de liquide minimale obtenue est inférieure à celle obtenue précédemment, essentiellement au pied du lingot. En effet, la densité volumique de grains formés dès le départ est plus importante. De plus dans ces zones au pied du lingot, la surchauffe est déjà évacuée, ce qui explique le résultat obtenu.

t=10 s

Tmin= 1455° C

$g^l \text{ min}=0,985$

Tmax= 1470° C

$g^l \text{ max}=1$

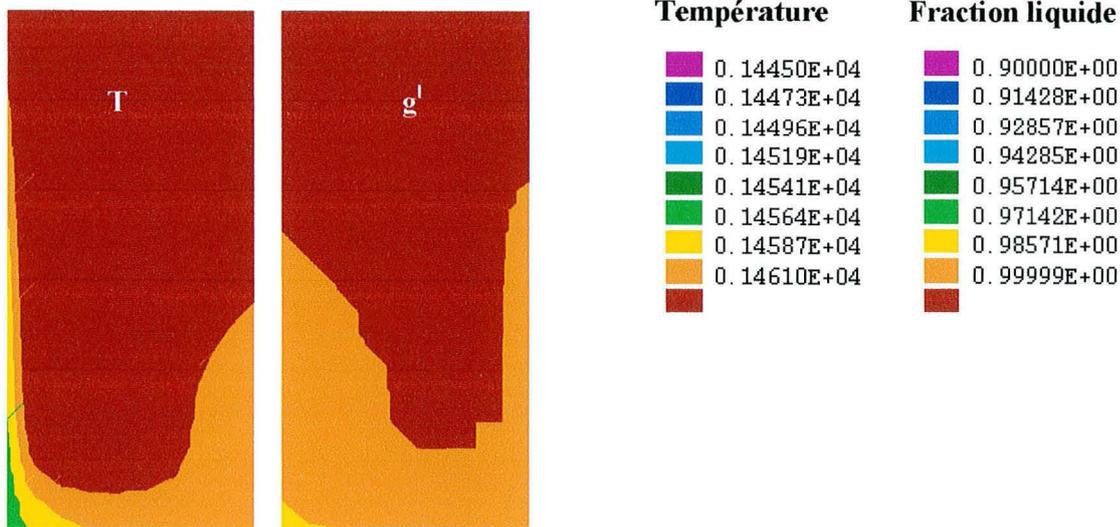


figure V 12: cartes de température et de fraction liquide (cas: $V^s=V^l$ et croissance de grains, germination en volume)

$V^l_{\text{max}}= 2,64 \text{ cm/s}$

A 70 secondes, l'homogénéisation des champs de température et de fraction liquide due aux mouvements des deux phases, conduit déjà à des valeurs maximales et minimales assez proches entre les deux calculs (voir figure V 9 et figure V 13). Cette homogénéisation se poursuit jusqu'à la fin de la solidification et donne des résultats très proches de ceux obtenus avec la loi d'injection surfacique.

t=70 s

Tmin= 1454° C

g^l min=0,896

Tmax= 1460,2° C

g^l max=0,985

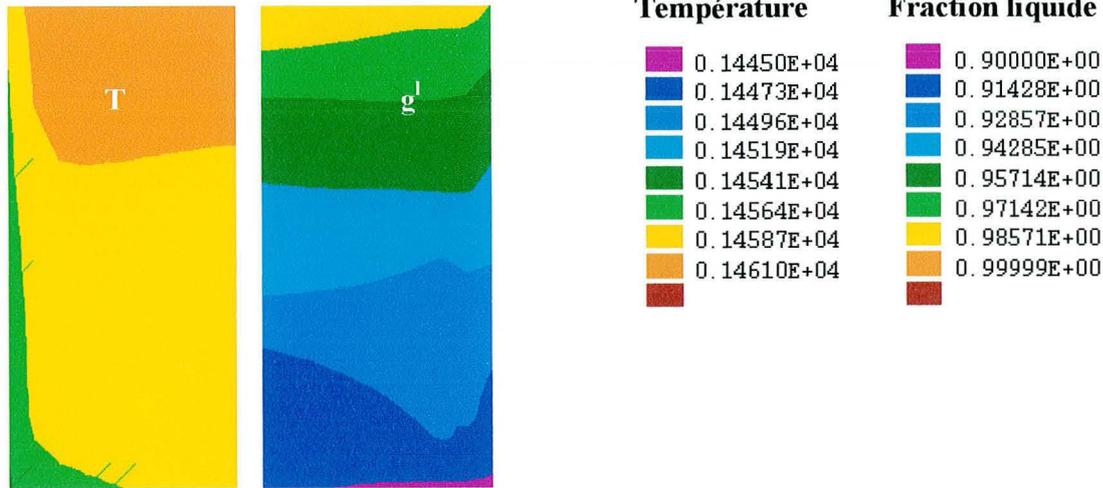


figure V 13: cartes de température et de fraction liquide (cas: $V^s=V^l$ et croissance de grains, germination en volume)

$V^l_{max}= 1,28\text{cm/s}$

Nous terminons cette étude par la présentation de valeurs minimales et maximales des rayons et des densités volumiques de grains (voir Tableau V. 5), obtenues à la fin de la solidification pour cinq valeurs de la densité de flux de fragments imposée à la paroi.

\dot{n}_s (frag.m ⁻² . s ⁻¹)	10 ⁵	10 ⁶	10 ⁷	10 ⁸
N_{v_MIN} (frag.m ⁻³)	5,1.10 ⁸	5,03.10 ⁹	1.10 ¹⁰	1.10 ¹¹
N_{v_MAX} (frag.m ⁻³)	5,4.10 ⁸	5,06.10 ⁹	5.10 ¹⁰	5.10 ¹¹
$\frac{N_{v_MAX} - N_{v_MIN}}{N_{v_MIN}}$	0,06	0,004	0,08	0,08
R_{g_MIN} (m)	736.10 ⁻⁶	352.10 ⁻⁶	166.10 ⁻⁶	77.10 ⁻⁶
R_{g_MAX} (m)	747.10 ⁻⁶	353.10 ⁻⁶	169.10 ⁻⁶	78.10 ⁻⁶

Tableau V. 5 : Valeurs finales des rayons moyens et des densités volumiques de grains

Ce tableau montre que les densités volumiques de grains et les tailles finales obtenues sont homogènes dans le lingot à la fin de la solidification, comme on peut le constater sur les figures V 14 a, b, c et d). En effet, avec l'hypothèse que la phase solide se déplace à la même vitesse que la phase liquide, ce résultat pouvait être attendu.

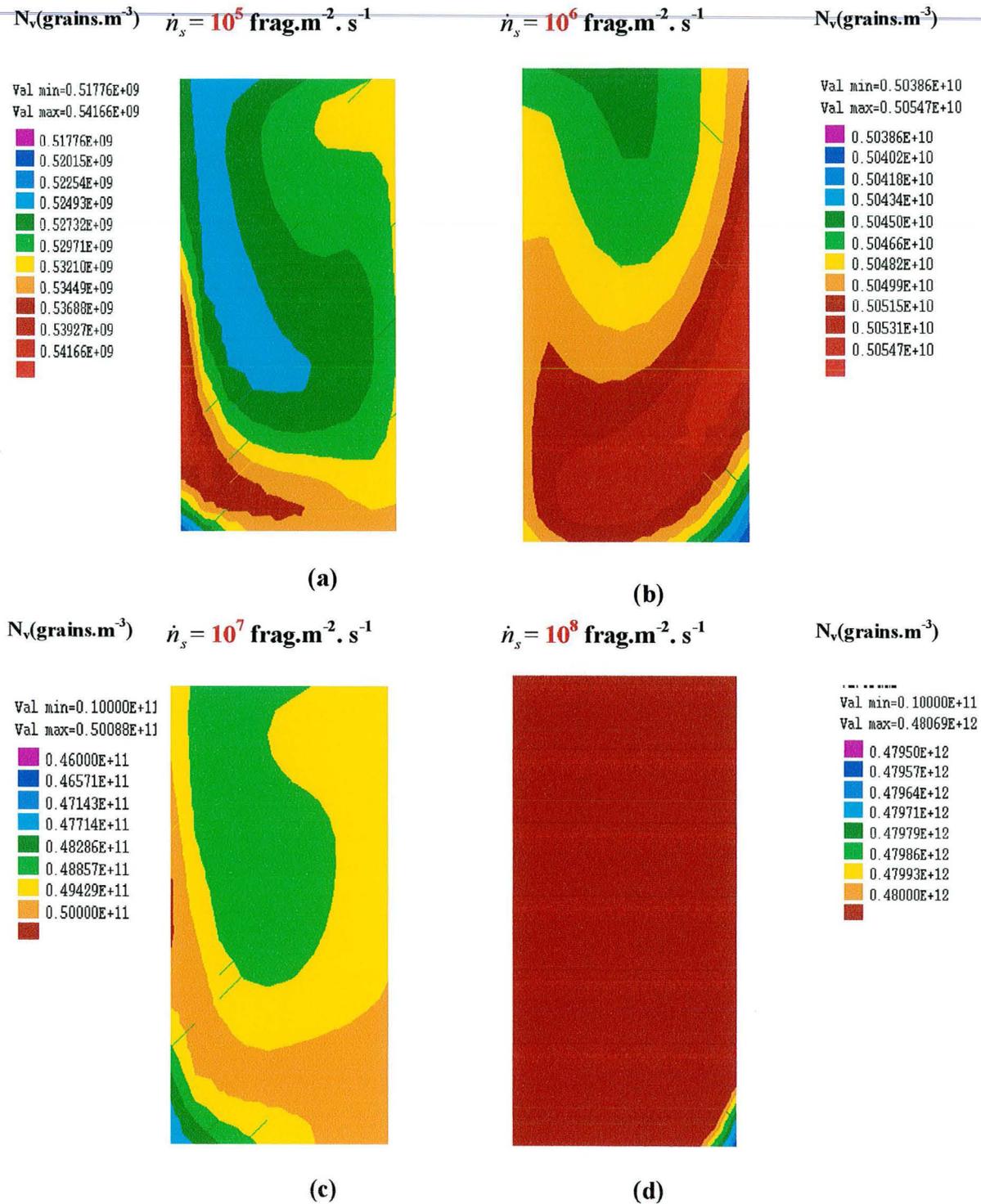


figure V 14 : cartes de densité volumique de grains à la fin de la solidification

V - 2. CONCLUSION :

Cette étude constitue une première étape des analyses numériques réalisées sur les évolutions des grains équiaxes en mouvement dans un bain liquide en cours de solidification. Elle a servi comme test pour le modèle et pour l'algorithme de résolution.

Dans un premier temps, une comparaison du modèle diphasique ($\mathbf{v}^s = \mathbf{v}^l$) avec d'autres modèles développés dans le code **SOLID**, a été entreprise. Les premiers résultats quantitatifs obtenus montrent l'influence de la prise en compte du mouvement et de la cinétique de croissance et de refusion des grains, surtout dans les zones surchauffées.

Il est important de remarquer qu'avec l'hypothèse $v^s = v^l$, il n'est pas possible de prendre en compte le mouvement interdendritique dans un réseau solide fixe. Ce modèle n'est donc pas applicable lorsque le solide est fixe et qu'il y a circulation du liquide dans la zone pâteuse. Ce modèle ne conduit pas non plus à la formation de macroségrégations.

Pour prendre en compte le cas où localement la phase solide est fixe ou suit un mouvement différent de celui de la phase liquide, une étude numérique a été conduite avec l'application du modèle diphasique et l'hypothèse suivante : $\langle \vec{v}^s \rangle^s \neq \langle \vec{v}^l \rangle^l$. Cette analyse constitue la suite de cette étude numérique.

V - 3. ANALYSE NUMERIQUE DANS LE CAS : $\langle \vec{v}^s \rangle^s \neq \langle \vec{v}^l \rangle^l$

Dans la précédente étude, nous avons étudié le comportement de la zone pâteuse en présence de grains équiaxes globulaires en mouvement dans le liquide, avec l'hypothèse que ces grains se déplacent à la même vitesse que le liquide ou sont fixes. Ce modèle a permis d'étudier la croissance et la refusion des grains équiaxes globulaires en mouvement dans le liquide. Cependant, avec ce type d'approche, le phénomène de macroségrégation est inexistant. Dans la présente étude, les analyses numériques réalisées ont été obtenues avec la prise en compte du mouvement propre de la phase solide qui peut ainsi être différent de celui de la phase liquide ou nul ($\langle \vec{v}^s \rangle^s \neq \langle \vec{v}^l \rangle^l, \langle \vec{v}^s \rangle^s = \vec{0}$). Pour désigner ce modèle, nous adopterons la notation suivante : **vs#vl**.

La première partie de cette étude numérique est consacrée au calcul sur le petit lingot de référence du chapitre précédent et la deuxième à un lingot industriel.

V - 3.1. Application du modèle diphasique en convection naturelle :

Dans cette partie, nous avons réalisé une analyse numérique sur le lingot de référence. Les résultats obtenus ont été comparés avec ceux obtenus par les deux modèles précédents : phase solide fixe ; vitesse des phases solide et liquide égales (voir figure V 15 et V 2,3,4).

La loi d'injection (création) de fragments cristallins est la même que pour le cas précédent. La densité de flux de fragments utilisée dans ce calcul est de $10^6 \text{ fragments.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ et la taille initiale des fragments cristallins sphériques est de $1 \mu\text{m}$. La fraction de liquide limite **gpack** à partir de laquelle le solide est immobilisé a été fixée à **0,6**. Une étude sur ce paramètre a été menée et rapportée plus loin.

V - 3.1.1. Résultats et discussions :

Les figures V 15 ①, ② ③ et ④ comparent les cartes de température et de fraction de liquide au temps 10 secondes, obtenues avec les trois modèles présentés précédemment à savoir :

- **Modèle vs=vl + croissance**
- **Modèle vs=vl + bras de levier**
- **Modèle solide fixe + bras de levier**

avec celles calculées avec le modèle qui considère que la phase solide suit un mouvement différent de celui de la phase liquide.

La figure V 15 ④ montre qu'après 10 secondes, les résultats obtenus avec le modèle **vs#vl** sont différents de ceux obtenus par les trois premiers modèles, notamment de ceux obtenus par le modèle vs=vl+croissance. En effet, la fraction de liquide minimale obtenue au pied du lingot

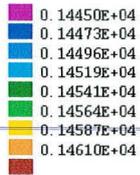
par le modèle $v_s \neq v_l$ est de **0,98** alors qu'avec le modèle $v_s = v_l$, cette valeur minimale est de **0,99**.

Ces deux modèles considèrent que le solide est en mouvement, mais dans le cas $v_s = v_l$, les grains sont continuellement transportés par le liquide dans le puits liquide et refondent lorsqu'ils se trouvent dans les zones en situation de surchauffe, alors que dans le cas $v_s \neq v_l$, certaines populations, essentiellement de petites tailles, sont transportées dans les zones en surchauffe alors que d'autres suivent leur propre mouvement et sédimentent. Cet effet de sédimentation diminue le nombre de grains refondus et augmente la densité volumique de grains au pied du lingot (voir figure V 16). Ceci explique la fraction liquide obtenue et le temps de l'évacuation de la surchauffe, supérieur à celui obtenu par le modèle $v_s = v_l + \text{croissance}$ (Tableau V 6).

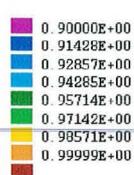
Temps d'évacuation de la surchauffe (s)	$V_s=0$	$V_s=V_l$	$V_s=V_l$	$V_s \neq V_l$
	Bras de levier	Bras de levier	Croissance-refusion	Croissance-refusion
	161	61	51	54

Tableau V 7 : temps d'évacuation de la surchauffe

Température

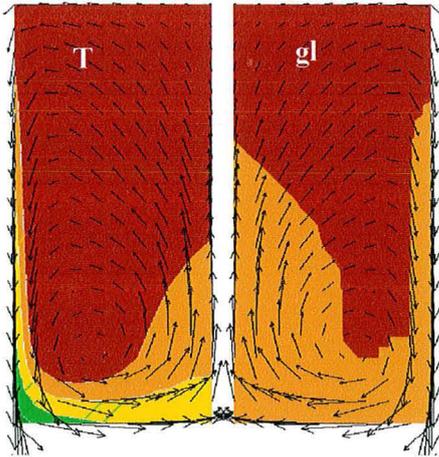


Fraction liquide



$T_{min}=1453,1^{\circ}C$
 $T_{max}=1470^{\circ}C$

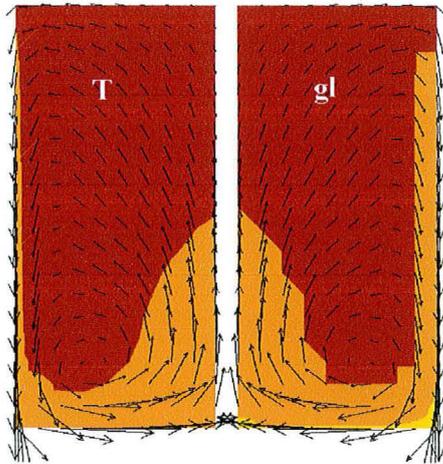
$g^l_{min} = 0,99$
 $g^l_{max} = 1$



① $V^s = V^l + \text{croissance}$
 $V^l_{max} = 2,62 \text{ cm/s}$

$T_{min}=1460,1^{\circ}C$
 $T_{max}=1470^{\circ}C$

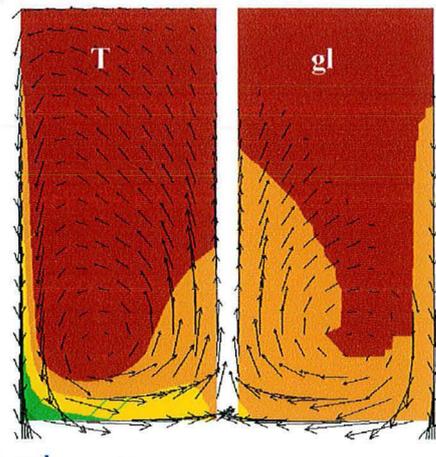
$g^l_{min} = 0,9768$
 $g^l_{max} = 1$



② $V^s = V^l + \text{bras de levier}$
 $V^l_{max} = 2,6 \text{ cm/s}$

$T_{min}=1452,7^{\circ}C$
 $T_{max}=1470^{\circ}C$

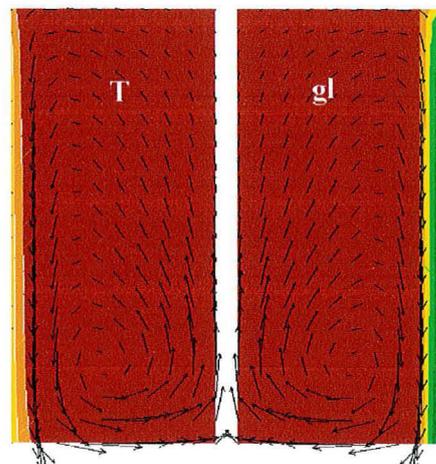
$g^l_{min} = 0,98$
 $g^l_{max} = 1$



③ $V^s \neq V^l + \text{croissance}$ $\langle \dot{V}^s \rangle^s = 2,72 \text{ cm/s}$
 $V^l_{max} = 2,62 \text{ cm/s}$

$T_{min}=1457,5^{\circ}C$
 $T_{max}=1470^{\circ}C$

$g^l_{min} = 0,92$
 $g^l_{max} = 1$



④ $V^s = 0 + \text{bras de levier}$
 $V^l_{max} = 1,9 \text{ cm/s}$

figure V 15: cartes de température et de fraction liquide au temps de calcul égal à 10 s

Pour le modèle vs#vl, le champ de vitesse représenté sur la partie droite de la cavité correspond à la vitesse intrinsèque de la phase solide et sur la partie gauche à la vitesse moyenne débitante de la phase liquide.

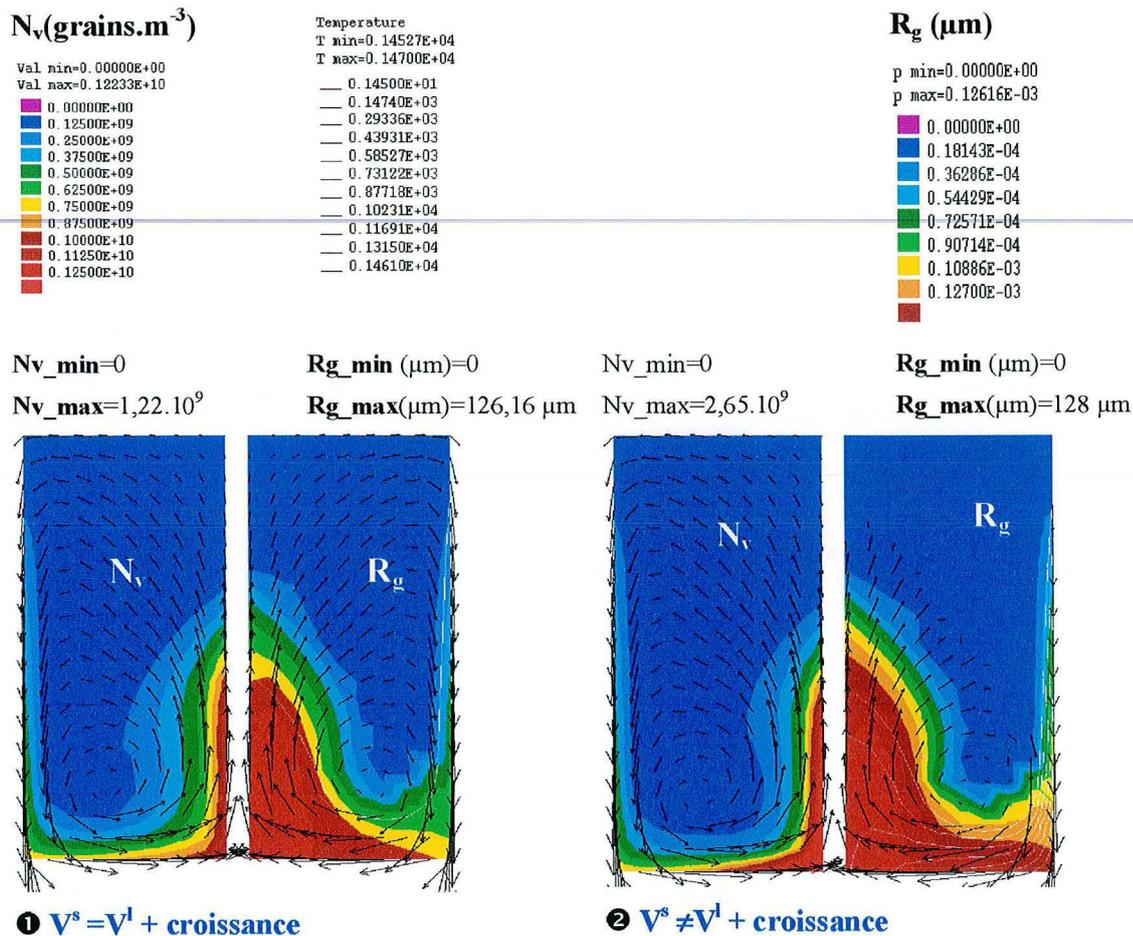


figure V 16 : cartes du rayon moyen et de la densité volumique de grains au temps 10 secondes

Sur la figure V 17 (a-1) nous avons représenté pour les deux modèles avec croissance l'évolution au cours du temps de la température pour les quatre modèles dans une maille de calcul du domaine (figure V 6), sur une période allant jusqu'à 100 s. On constate que la surchauffe est évacuée pratiquement au même temps lorsque les phases liquide et solide se déplacent à la même vitesse ou à des vitesses différentes.

Sur la figure V 17 (a-2), on note que comme dans le cas $v_s=v_l$, pour le modèle $v_s \neq v_l$, la courbe d'évolution de la température en fonction du temps présente un plateau. Ce plateau est à relier comme précédemment à l'arrêt des grains lorsque la fraction de liquide devient inférieure à une valeur critique (cette valeur pour le modèle $v_s \neq v_l$ est de 0,6). Le plateau commence un peu plutôt que pour le cas $v_s=v_l$, du fait de la plus forte valeur de la fraction de liquide de blocage de grains.

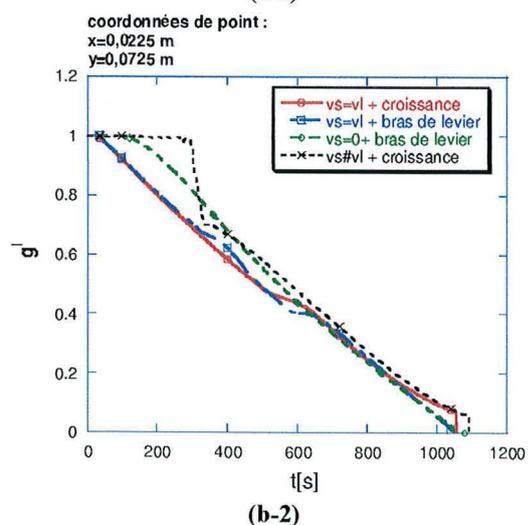
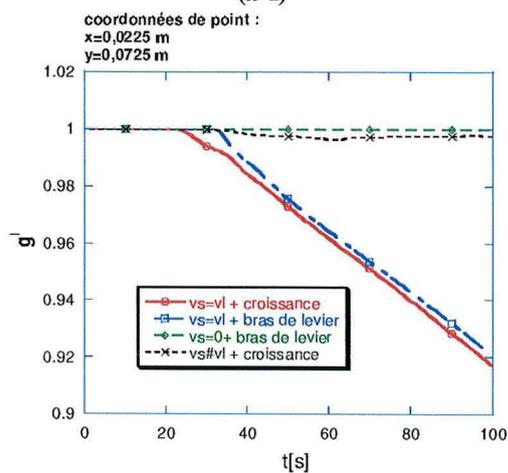
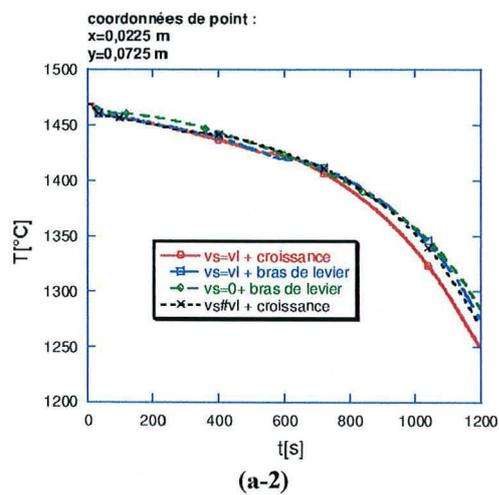
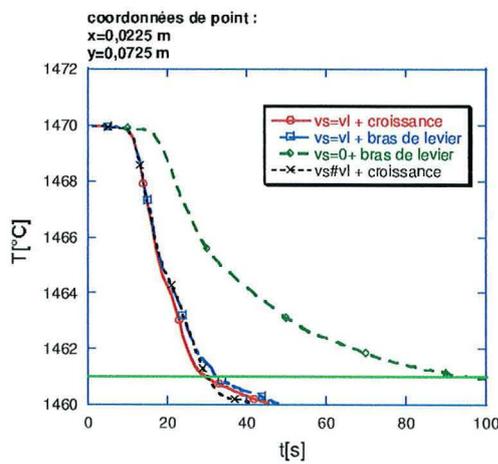
La figure V 17 (b-1) représentant la fraction de liquide pendant les cent premières secondes, montre que durant cette période pour le modèle $v_s \neq v_l$, la fraction de liquide dans cette maille de calcul est voisine de 1. En effet, la maille de calcul étudiée étant située en tête du lingot, la fraction de liquide reste voisine de 1 dans cette période de temps à cause de la sédimentation

des grains et de la refusion. On note sur la même figure, que pour les deux modèles $v_s=v_l$, la fraction liquide décroît beaucoup plus rapidement, durant les cent premières secondes.

La figure V 17 (b-2) montre qu'après 400 secondes, la fraction de liquide décroît brusquement, à cet instant, le front de cohérence donnée par la fraction de liquide limite ($g_{pack}=0,6$) arrive à la hauteur de la maille (figure V 18). On observe également sur la figure V 17 (b-2) que pour les valeurs de la fraction de liquide inférieures à 0,4, les quatre modèles conduisent à des résultats qui se regroupent. On note la différence en fin de solidification entre les modèles des leviers et croissance. Ainsi, le début de la solidification peut être très différent, à partir du moment où la phase de solide devient immobile, la fin de solidification tend alors à se dérouler de façon similaire. La principale différence provient en fin de solidification du modèle de croissance qui s'écarte alors du modèle des leviers. On retrouve bien ce résultat sur les courbes de température fonction de la fraction de liquide (figure V 17 (c)). Pour le modèle $v_s=0$, comme nous le montrons plus loin, la composition moyenne en carbone ne change pratiquement pas et pour le modèle $v_s=v_l$, elle ne change pas. Ces trois modèles conduisent alors à la même évolution de température en fonction de la fraction de liquide pour les valeurs de la fraction de solide comprise entre 0,4 et 1, même si ces valeurs n'ont pas été obtenues au même instant. Pour les valeurs inférieures à 0,4, le modèle $v_s=v_l$ +croissance conduit à des températures inférieures du fait de l'effet de la diffusion restreinte dans la phase solide. Pour le modèle $v_s \neq v_l$, l'évolution est complètement différente de celle des autres modèles pour les valeurs de la fraction de liquide comprises entre 0,7 et 1. C'est à dire que l'intervalle où les grains sont libres de se déplacer. On retrouve le brusque saut de fraction de liquide au moment du passage du front de cohérence. Puis pour les fractions de liquide inférieures à 0,7, les modèles $v_s=v_l$ et $v_s \neq v_l$ présentent des évolutions assez similaires. Ainsi, la prise en compte du mouvement relatif des grains modifie principalement la courbe fraction de liquide température pour les valeurs supérieures à la fraction de liquide de blocage des grains.

Le même type d'évolution se retrouve sur la courbe de densité de grains fonction du temps de la figure V 19 (a). Tant que la fraction de liquide est supérieure à g_{pack} , la densité de grains résultant du modèle $v_s \neq v_l$ est inférieure aux valeurs obtenues par les modèles $v_s=v_l$. Par contre, lorsque la fraction de liquide passe en dessous de g_{pack} , il se produit un saut qui est encore lié à l'accumulation des grains. La courbe d'évolution du rayon moyen des grains en fonction du temps de la figure V 19 (b) montre qu'un peu avant l'instant où l'on observe le saut de densité de grains ou de fraction de liquide, le rayon moyen augmente assez rapidement, ce qui conduit alors à une vitesse plus importante de sédimentation des grains. On peut noter cette augmentation de vitesse sur la courbe de la figure V 19 (c). Par contre, le rayon moyen n'augmente pas brusquement au moment du blocage des grains. Ainsi, le phénomène d'accumulation des grains est principalement dû à une accélération de la croissance des grains

quand ils sont au voisinage de l'interface entre la zone de grains fixes et de grains mobiles. Du fait de cette croissance, les grains sédimentent rapidement et s'accumulent sur la zone de grains déjà immobiles. La figure V 19 (d) d'évolution du titre massique moyen en carbone en fonction du temps présente également un saut correspondant à l'instant où les grains s'accumulent et se bloquent au point considéré. Durant la période précédant cet instant, le titre massique moyen local en carbone a augmenté continûment pour diminuer brusquement du fait de l'accumulation des grains pauvres en soluté. L'enrichissement en soluté est lié au rejet de liquide enrichi dû à la croissance de grains. L'évolution du titre massique en carbone dans la phase liquide est présentée sur la figure V 19 (e). Pour les quatre modèles, cette évolution est similaire. On peut noter la présence de plateaux pour les modèles $vs=vl$ et $vs\#vl$ à relier avec ceux des courbes de température. Mais pour le modèle $vs\#vl$, il n'y a pas de saut brusque de titre massique en carbone dans la phase liquide.



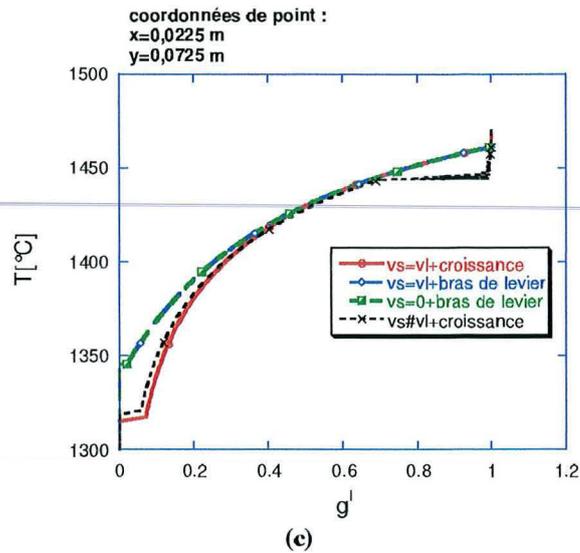


figure V 17 : Evolution au cours du temps de la température (a-1), (a-2), de la fraction de liquide (b-1), (b-2) et évolution de la température en fonction de la fraction de liquide (c), obtenues au point de coordonnées ($x=0,025$ et $y=0,0725$)

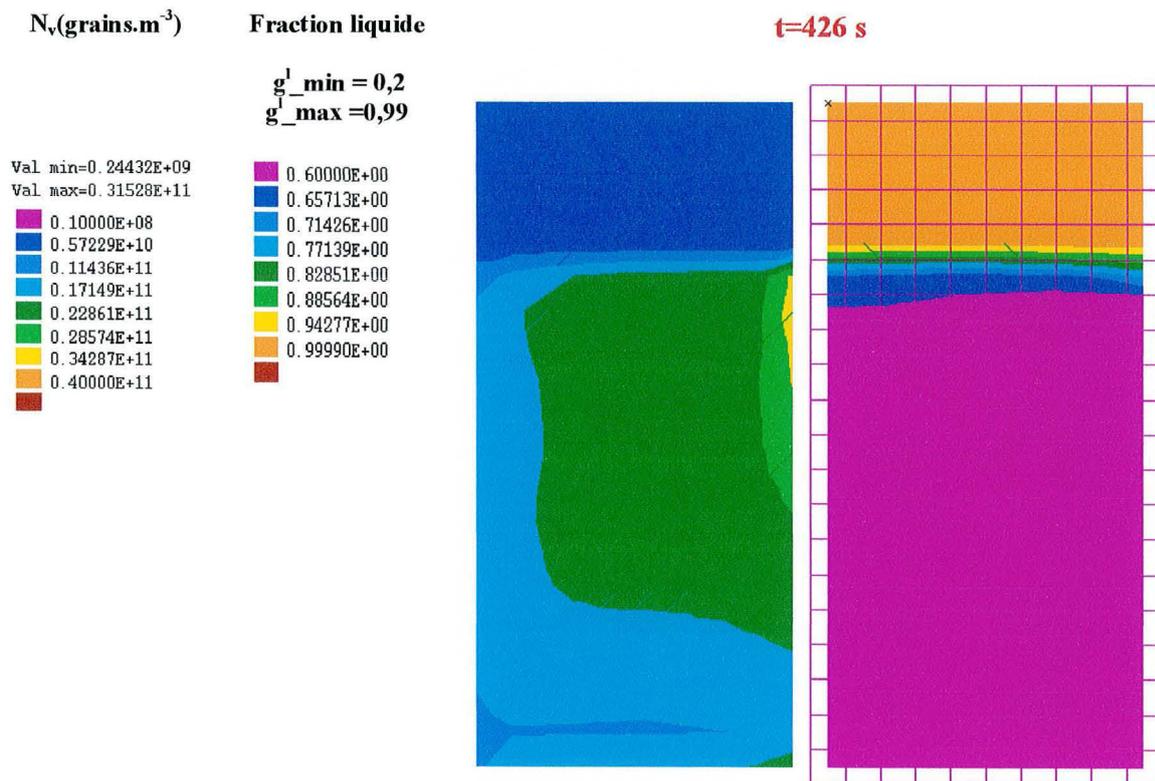


figure V 18 : cartes de la fraction de liquide et de densité volumique de grains obtenues au point de coordonnées ($x=0,025$ et $y=0,0725$) au temps 426 secondes

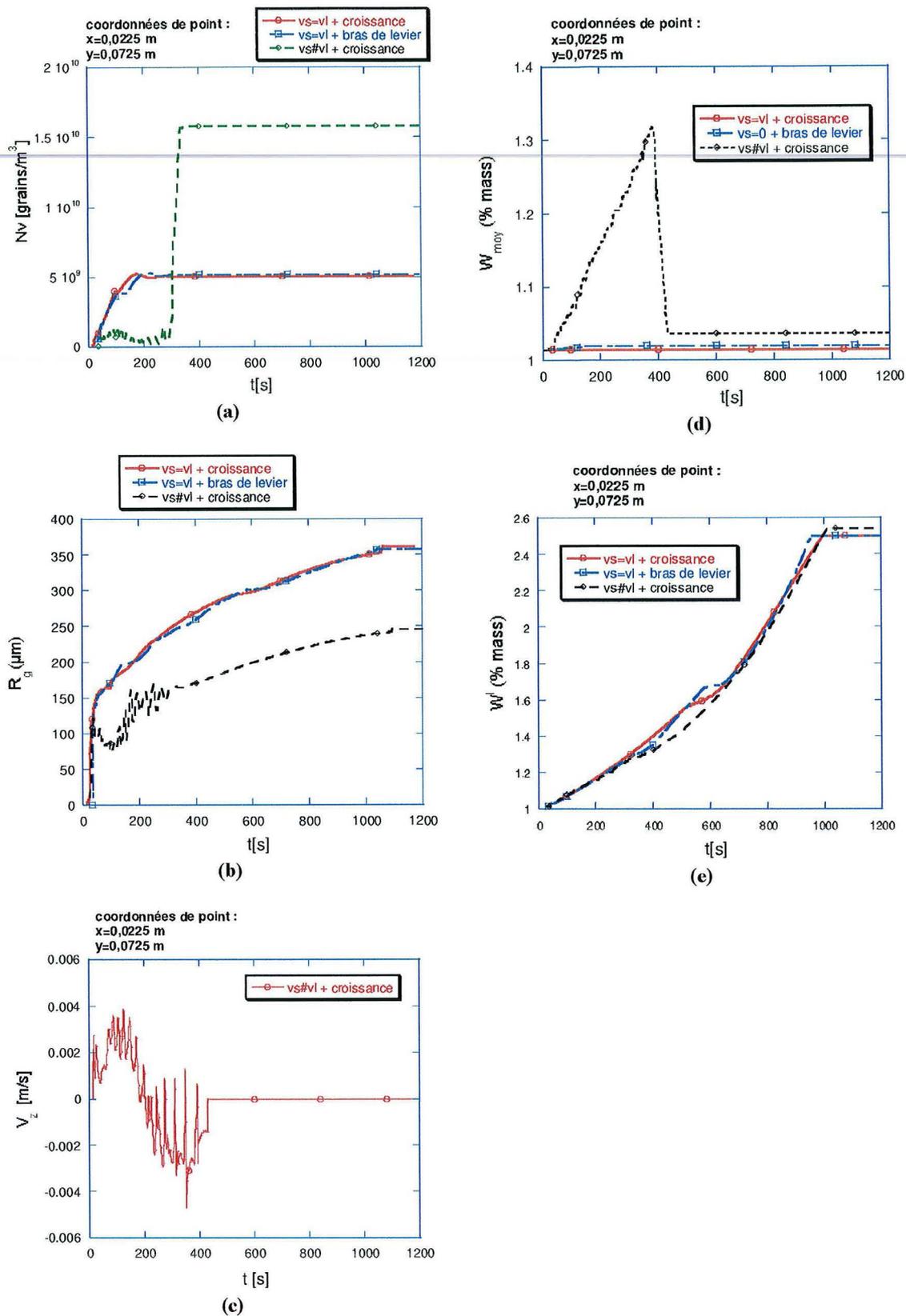


figure V 19 : Evolution au cours du temps de la densité volumique (a), du rayon moyen (b), du titre massique moyen (d), du titre massique de la phase liquide (e) et de la vitesse dans la direction verticale (c) : (x=0,025 et y=0,0725)

Sur la figure V. 20 nous avons représenté les cartes de fraction liquide et de température à différents instants. La valeur minimale de l'échelle de fraction de liquide correspond à la valeur limite à laquelle le solide est immobilisé. Cette figure montre comment les grains sédimentent et s'entassent. Les grains se forment aux parois, puis ils sont ensuite transportés. Certains d'entre eux vont se retrouver rapidement dans des zones surchauffées où ils vont refondre, d'autres survivent à la surchauffe et croissent ensuite dans les zones en surfusion et sédimentent. Il se forme ainsi un talus de grains qui monte progressivement au cours de la solidification. La montée du talus s'opère par un mécanisme répétitif : les grains s'accumulent d'abord dans le centre puis bloquent les grains suivants, ce qui fait monter globalement la hauteur du talus, depuis le centre jusqu'à la paroi. Ce phénomène est illustré sur les cartes de fraction de liquide (figure V 21). Les cartes de température représentées sur la même figure montrent que le champ de température à un instant donné dans le puits liquide est plutôt uniforme. La température moyenne du puits liquide diminue au cours du temps, tandis que des gradients de température verticaux se développent dans la zone de talus.

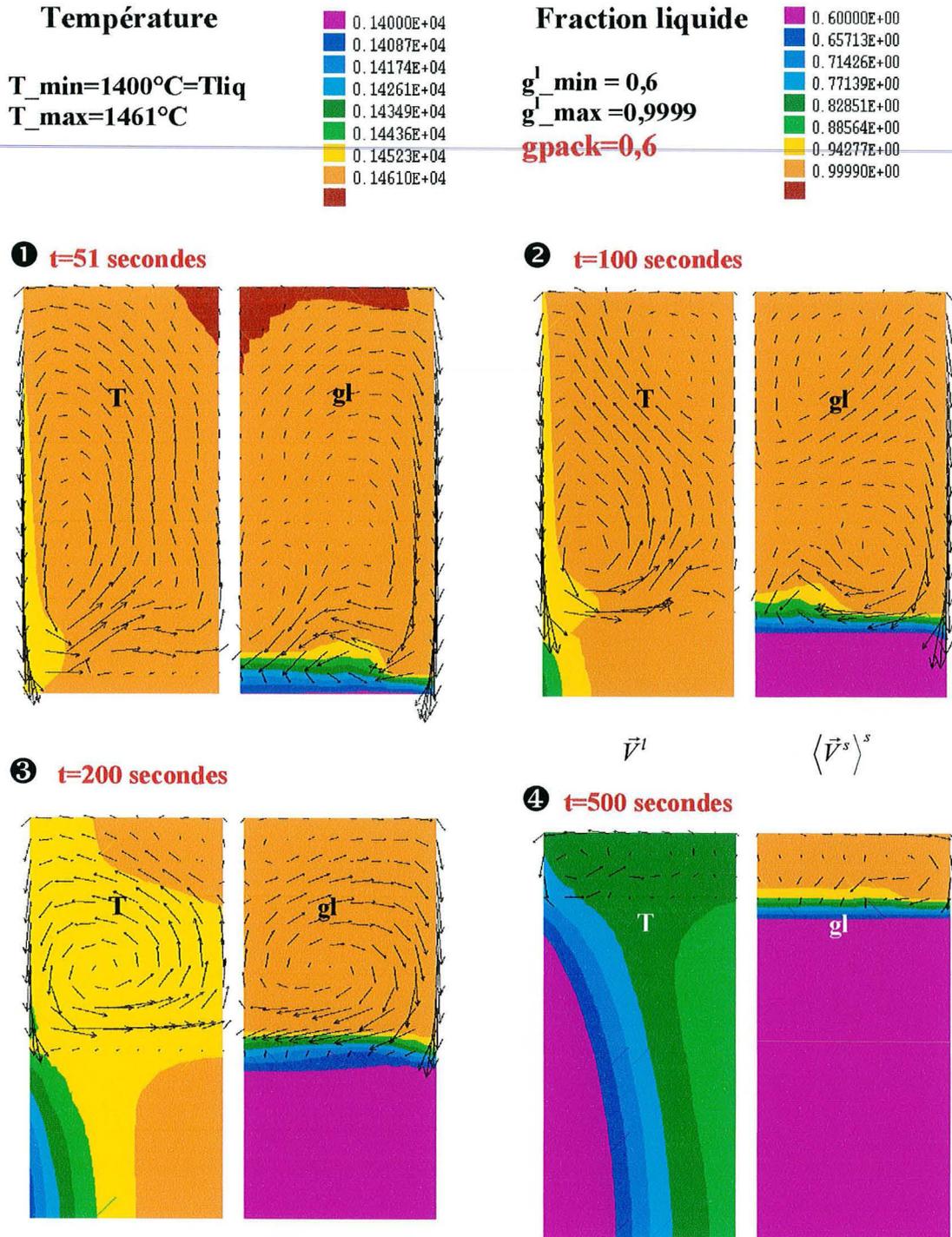


figure V. 20 : Cartes de température et de fraction de liquide pendant la solidification. Les champs de vitesse correspondent à la vitesse intrinsèque de la phase solide sur la partie droite du domaine et à la vitesse moyenne débitante de la phase liquide sur la partie gauche.

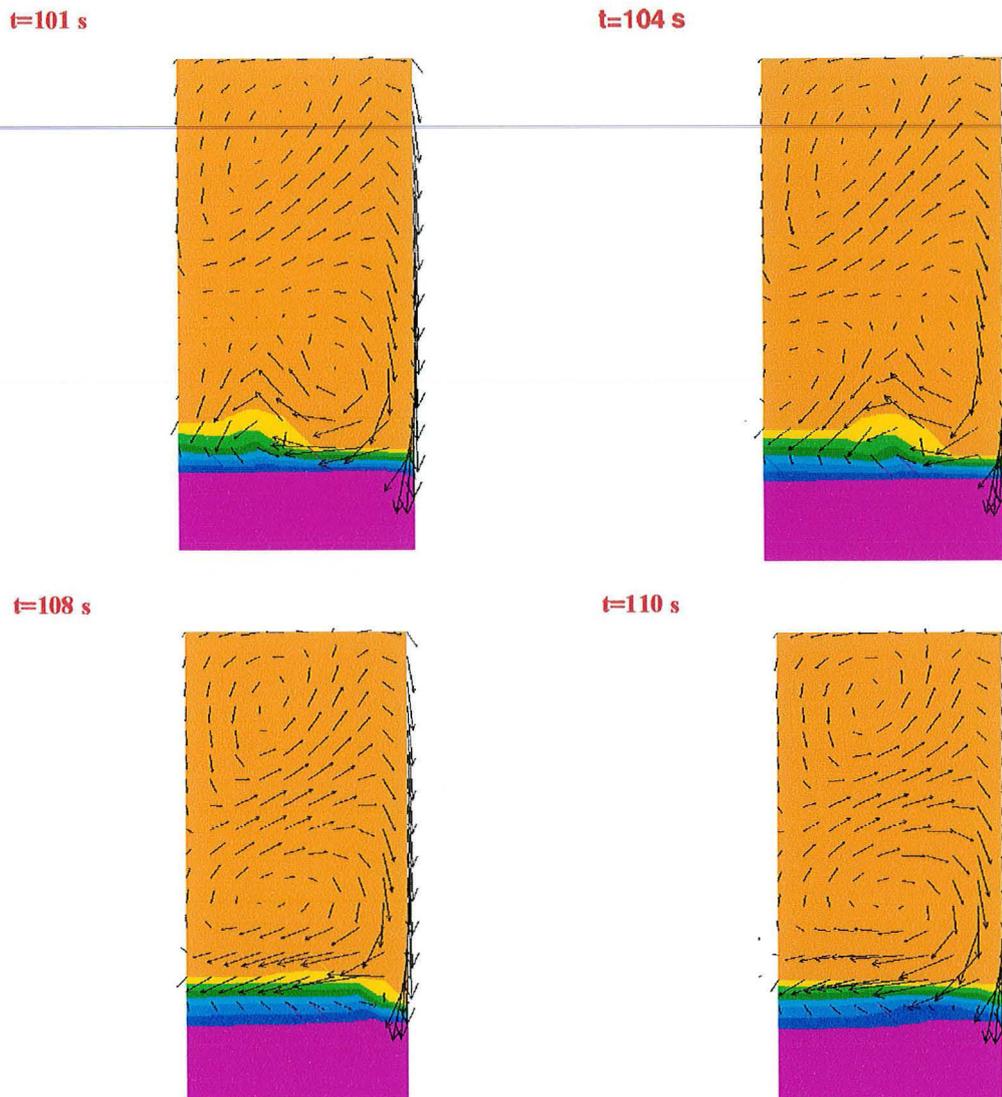


figure V 21: remplissage du domaine du centre vers la paroi

La figure V 22 représente les cartes finales du titre massique moyen en carbone pour le modèle **vs#vl** (figure V 22 ❶) et pour le modèle solide fixe (figure V 22 ❷). La figure V 22 ❶ montre qu'une macroségrégation négative s'étend du bas du domaine jusqu'à mi-hauteur. Cette dernière est plus importante en pied car cette zone se trouve au départ à la composition nominale et les premiers grains déposés dans cette zone sont pauvres en élément d'alliage. En remontant dans le lingot, les grains se retrouvent dans des zones enrichies en carbone, ce qui explique cette décroissance de la ségrégation négative en fonction de la hauteur. En tête de la cavité, une macroségrégation positive est obtenue.

Lorsqu'on considère le modèle $v_s=0$ (figure V 22 ②), on constate que la macroségrégation obtenue est négligeable par comparaison à celle obtenue par le modèle $v_s=v_l$. En conclusion, la différence en ordre de grandeur dans les résultats présentés ci-dessus sur la macroségrégation, montre que la prise en compte du mouvement de la phase solide peut conduire à des macroségrégations très différentes.

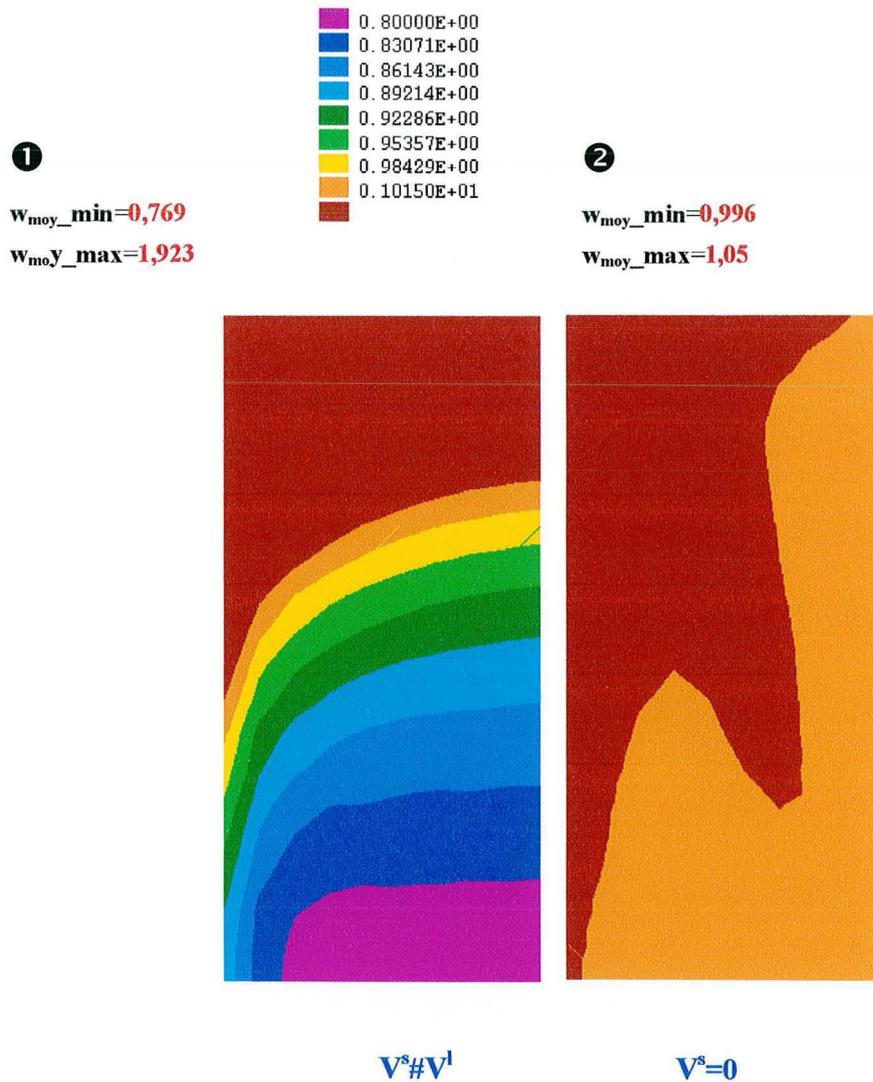


figure V 22 : cartes finales des macroségrégations obtenues par le modèle $v_s\#v_l$ et par le modèle $v_s=0$.

La figure V 23 présente la carte de densité volumique de grains en fin de solidification. On note une variation importante de cette grandeur contrairement aux résultats de calcul pour le modèle $v_s=v_l$. Les valeurs les plus faibles de densité sont obtenues le long de la paroi verticale refroidie et au pied du domaine. Il y a une forte accumulation de grains dans la partie centrale en haut du domaine.

N_v [grains.m⁻³]

Val min=0.26267E+10

Val max=0.90336E+11

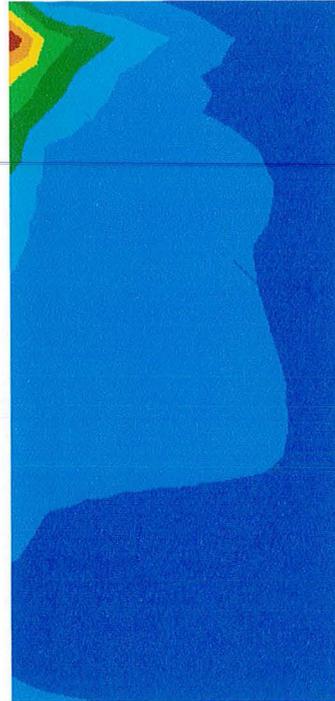
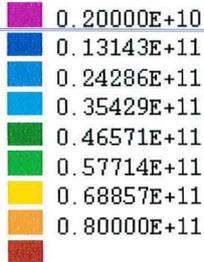
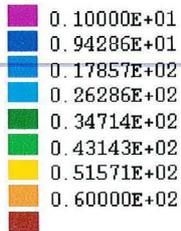


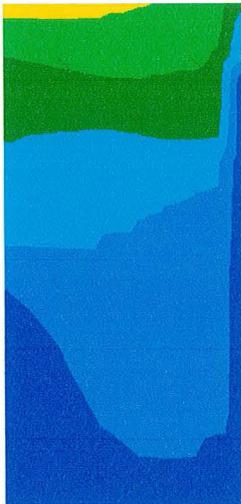
figure V 23 : carte finale de la densité volumique de grains (modèle vs#vl)

Les cartes de la figure V 24 représentent la distribution du temps de début de solidification pour les quatre modèles. Ce temps est défini comme le premier instant où localement la fraction de liquide passe en dessous de 1. On peut remarquer à nouveau la grande différence entre le modèle vs=0 et les trois autres modèles. Ces derniers conduisent à des temps de début de solidification plus faibles dans la partie centrale de la cavité. On note aussi dans le cas du modèle vs#vl, l'effet de la sédimentation des grains qui a tendance à augmenter le temps de début de solidification dans la zone supérieure par rapport au modèle vs=vl.

temps de début de solidification

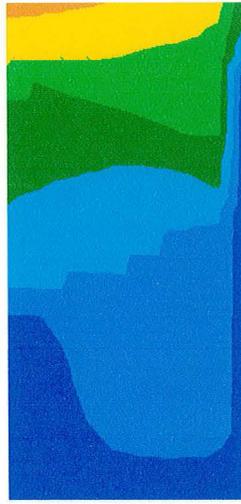


$t_{min}=1,975$ s
 $t_{max}=48$ s



$vs=vl+croissance$

$t_{min}=1,975$ s
 $t_{max}=53$ s



$vs=vl+bras\ de\ levier$

$t_{min}=1,975$ s
 $t_{max}=55$ s



$vs\#vl$

$t_{min}=1,83$ s
 $t_{max}=148$ s



$vs=0$

figure V 24 : cartes de distribution du temps de début de solidification pour les quatre modèles

Sur la figure V 25 nous avons reporté les cartes du temps local de solidification pour les quatre modèles. Dans les cas des modèles $vs=0$ et $vs=vl$, les courbes d'iso-temps local de solidification sont quasiment des droites verticales. Le temps local de solidification est un peu plus court pour le modèle $vs=0$. Pour le modèle $vs\#vl$, la forme des courbes d'iso-temps local de solidification est modifiée. Dans le quart inférieur du domaine, la carte est similaire à celle obtenue avec le modèle $vs=0$. Dans le centre du domaine, elle tend à se rapprocher de celle obtenue avec les modèles $vs=vl$. Enfin, dans le quart supérieur, le temps local de solidification est plus long.

temps local de solidification

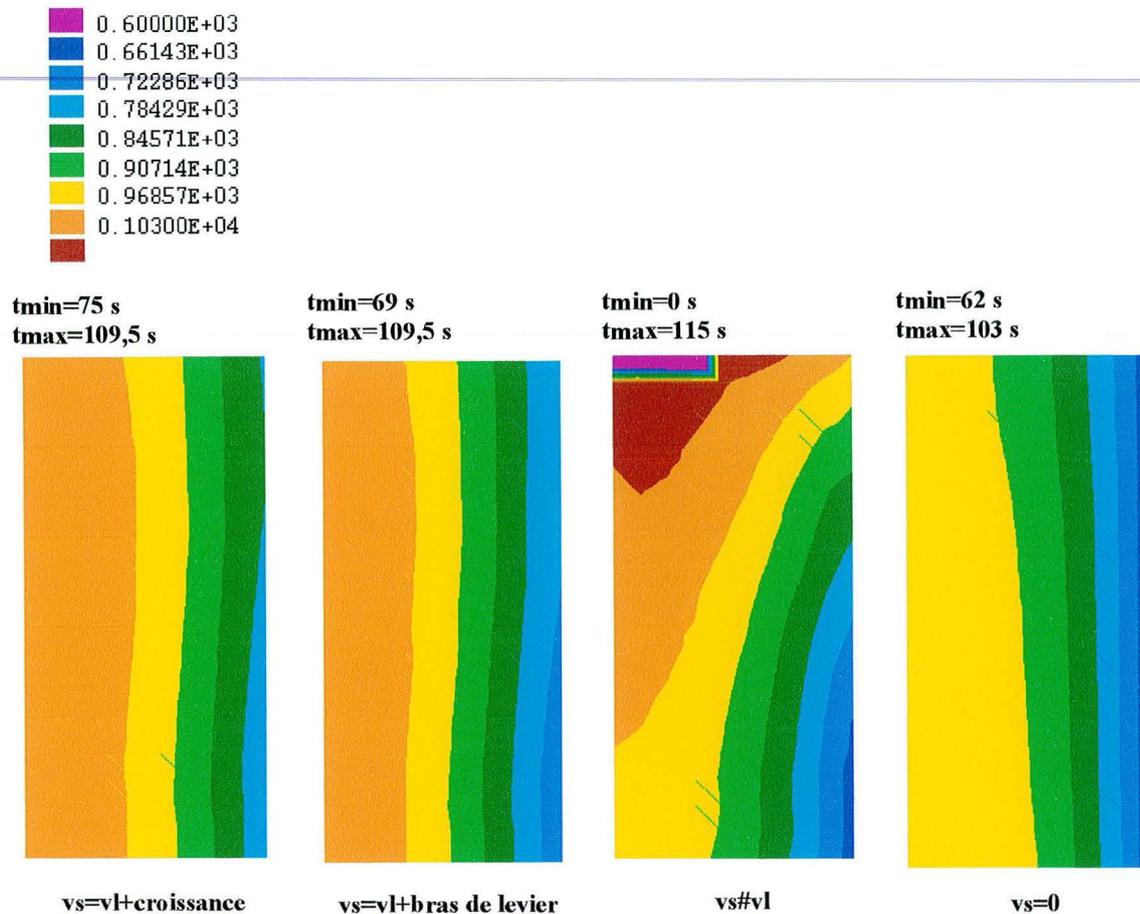


figure V 25 : cartes de distribution du temps local de solidification pour les quatre modèles

V - 3.1.2. Etude paramétrique :

Cette étude paramétrique a été réalisée pour étudier l'influence de la fraction liquide limite à partir de laquelle le solide est immobile et l'influence de la loi d'injection de fragments cristallins.

➤ *Influence de la fraction liquide limite (**gpack**) :*

Le Tableau V. 8 regroupe les compositions moyennes minimales et maximales obtenues à la fin de la solidification, ainsi que leurs variations relatives, pour les différentes valeurs de **gpack** testées. Les résultats reportés dans ce tableau montrent que l'intensité de la macroségrégation est moins importante lorsqu'on bloque à une plus forte fraction de liquide le mouvement de la phase solide. Dès l'instant où les grains sont immobilisés, la vitesse de la phase liquide dans cette zone devient faible et la composition moyenne n'évolue pratiquement

plus, d'où l'importance de **gpack**, puisque la macroségrégation est induite principalement par le mouvement et l'accumulation des grains.

gpack	0,5	0,6	0,7	0,8	0,95	0,97	Vs=0
W_{moy_MIN} (% mass)	0,706	0,7725	0,832	0,899	0,96	0,988	0,996
W_{moy_MAX} (% mass)	2,495	1,994	1,61	1,29	1,14	1,07	1,05
$\frac{W_{moy_min} - W_{moy}^0}{W_{moy}^0}$	-30%	-24%	-17%	-10%	-6,40%	-2,70%	-1,87%
$\frac{W_{moy_max} - W_{moy}^0}{W_{moy}^0}$	+146%	+96%	+61%	+29%	12,32%	5,42%	3,45%

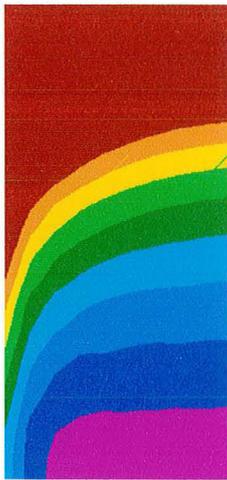
Tableau V. 8 : macroségrégations finales en fonction de la fraction liquide limite

Sur la figure V 26 nous avons présenté les cartes finales de macroségrégation obtenues pour différentes valeurs de fraction de liquide de blocage. On constate que, plus on bloque rapidement les grains et plus on s'approche de la carte de macroségrégation obtenue avec le modèle solide fixe. Le Tableau V. 8 montre en effet que lorsqu'on bloque rapidement le mouvement de la phase solide ($gpack=0,97$) pour le modèle vs#vl, on obtient des compositions moyennes maximales et minimales voisines de celles obtenues avec le modèle solide fixe.



$w_{moy_min}=0,7725$
 $w_{moy_max}=1,994$

$g_{pack}=0,6$



$vs\#v1$

$w_{moy_min}=0,899$
 $w_{moy_max}=1,29$

$g_{pack}=0,8$



$Vs\#V1$

$w_{moy_min}=0,9$
 $w_{moy_max}=1,28$

$g_{pack}=0,9$



$Vs\#V1$

$w_{moy_min}=0,96$
 $w_{moy_max}=1,14$

$g_{pack}=0,95$



$Vs\#V1$

$w_{moy_min}=0,988$
 $w_{moy_max}=1,07$

$g_{pack}=0,97$



$Vs\#V1$

$w_{moy_min}=0,996$
 $w_{moy_max}=1,05$

$Vs=0$



figure V 26 : cartes finales de macroségrégation obtenues avec le modèle $vs\#v1$ et avec le modèle $vs=0$.

➤ **Influence de la densité de flux de fragments cristallins :**

Dans nos calculs, la densité de flux de fragments est utilisée comme une donnée d'entrée dans le code de calcul. Pour étudier son influence, nous avons réalisé des calculs avec différentes valeurs de cette grandeur. Les principaux résultats obtenus sont reportés dans le Tableau V. 9.

\dot{n}_s (frag.m ⁻² .s ⁻¹)	$V^s=V^l$ (10 ⁶)	10 ⁶	10 ⁷	10 ⁸	10 ⁹
N_{v_MIN} (frag.m ⁻³)	5,03.10 ⁹	2,410 ⁹	10 ¹⁰	10 ¹⁰	10 ¹⁰
N_{v_MAX} (frag.m ⁻³)	5,06.10 ⁹	7,910 ¹⁰	5,57.10 ¹¹	8.10 ¹¹	5,8.10 ¹²
$\frac{N_{v_MAX} - N_{v_MIN}}{N_{v_MIN}}$	0,004	32	55,6	79	579
R_{g_MIN} (m)	352.10⁻⁶	139.10⁻⁶	69.10 ⁻⁶	65.10 ⁻⁶	32.10 ⁻⁶
R_{g_MAX} (m)	353.10⁻⁶	421.10⁻⁶	180.10 ⁻⁶	109.10 ⁻⁶	37.10 ⁻⁶
W_{moy_MIN} (% masse)	1,015	0,7725	0,772	0,862	0,9
W_{moy_MAX} (% masse)	1,015	1,994	1,9	1,49	1,35
$\frac{W_{moy_min} - W_{moy}^0}{W_{moy}^0}$		-23,89%	-23,94%	-13,8%	-11,3%
$\frac{W_{moy_max} - W_{moy}^0}{W_{moy}^0}$		+96%	87%	49%	35%

Tableau V. 9 : principaux résultats obtenus pour la densité de grains, leur taille et la ségrégation en fonction de la densité de flux de fragments cristallins

Ces résultats montrent que la répartition de la densité volumique des grains dans le lingot est hétérogène avec des écarts importants entre les valeurs minimales et maximales. Cette variation de densité provient de la différence de taille des grains au moment de leur entassement. On constate une densité de grains plus forte à la base du domaine. La taille de grain (rayon) varie entre 32 µm et 400 µm, suivant la densité de flux de fragments utilisée. Elle diminue en valeur moyenne lorsque la densité de flux de fragment augmente. On constate par ailleurs que lorsque la densité de flux de fragment augmente, l'intensité de la macroségrégation est moins importante. En effet, si l'on augmente la densité de grains, leur vitesse de croissance va diminuer, les grains vont être en mouvement plus longtemps et avoir une composition moyenne en éléments d'alliage plus forte. Nous avons reporté également dans le Tableau V. 9 les valeurs pour le modèle $v^s=v^l+croissance$ avec une densité de flux de fragments de 10⁶ fragments.m⁻².s⁻¹. Les écarts entre les valeurs minimales et maximales de densité de grains sont beaucoup plus faibles avec ce modèle.

V - 4. CONCLUSIONS :

L'étude numérique a été menée sur un cas académique, dans un premier temps pour trois modèles : $v_s=0$ +bras de levier, $v_s=v_l$ +bras de levier, $v_s=v_l$ +croissance. Il ressort de cette étude que le mouvement de la phase solide accélère l'évacuation de la surchauffe du fait du transport de grains dans le puits liquide et de leur refusion. Pour les deux modèles $v_s=v_l$, la densité de grains est homogène en fin de solidification, les écarts obtenus entre les valeurs minimales et maximales de densité de grains sont en effet très faible. Le mode de création des grains : créés en surface ou germés en volume, n'a pas affecté ce résultat. Bien que le temps de solidification diffère en fonction des modèles, le temps de fin de solidification est très proche. En un point, il est possible de distinguer deux périodes, une première période où les grains peuvent bouger et une deuxième où ils sont fixes. Une fois qu'un point est entré dans cette période, son évolution thermique ne dépend pratiquement plus du modèle de microségrégation. Dans un deuxième temps, nous avons complété cette étude avec le cas $v_s \neq v_l$ +croissance. Les plus fortes différences ont été observées pendant la période où les grains sont en mouvement. Le temps de fin de solidification en un point n'est pas modifié de façon sensible. Du fait de la différence de vitesse entre les phases solide et liquide, il est possible de distinguer trois zones pendant la solidification. Une zone où les grains sont immobiles. Au voisinage de cette zone, une région où les grains bougent et croissent rapidement, ce qui les conduit à sédimenter. Enfin, la troisième zone peut contenir des grains, mais de faible diamètre et où la fraction de liquide est proche de 1. L'immobilisation des grains en un point conduit à un saut brusque de la densité de grains, de la fraction de liquide et de la composition moyenne en éléments d'alliage. Une macroségrégation significative a été observée en fin de solidification, de même la carte de densité de grains n'est plus uniforme. Ces deux cartes sont fortement dépendantes de la fraction de liquide de blocage des grains.

V - 5. APPLICATION DU MODELE DIPHASIQUE A UN LINGOT INDUSTRIEL :

Après avoir appliqué le modèle $vs\#vl$ au lingot de référence de géométrie cartésienne et de taille : **10 cm x 10 cm**, nous l'avons appliqué à un lingot industriel. Les calculs que nous avons entrepris sur ce dernier, visaient les objectifs suivants :

- Appliquer le modèle à l'échelle d'un lingot industriel.
- Retrouver ou approcher le mieux possible les résultats expérimentaux de macroségrégation.
- Comprendre les différences entre le modèle et l'expérience.

Le lingot industriel étudié est un lingot dont on connaît bien l'histoire de sa solidification et la carte de macroségrégation finale. Ce lingot a été coulé par la société **ASCOMETAL** dans le cadre de la thèse de Mazet [2]. L'acier coulé correspond à la nuance 100C6 et le lingot pèse 6,2 tonnes.

V - 5.1. Application du modèle au Lingot ASCOMETAL de 6,2 tonnes :

➤ Caractéristiques du Lingot :

La nuance 100C6 d'ASCOMETAL est un acier fortement allié. Compte tenu de sa forte composition nominale en carbone, il présente de fortes ségrégations. Dans l'industrie, il est utilisé comme alliage de base pour l'élaboration de roulements.

➤ Géométrie de la lingotière :

La géométrie de la lingotière dans laquelle on solidifie le lingot est représentée sur la figure V. 27. La lingotière est en fonte et son épaisseur est de 12 cm. Un réfractaire de 3 cm d'épaisseur est cloué dans sa partie supérieure. Les propriétés thermophysiques de la fonte et du réfractaire utilisées dans nos calculs sont données en annexe A.V.

➤ Géométrie du lingot et conditions adoptées pour les calculs :

La géométrie du lingot 100C6 est représentée sur la figure V 28. Il est de forme carrée avec des angles arrondis. Dans les calculs réalisés, nous avons utilisé une géométrie axisymétrique. Les conditions aux limites et initiales imposées sont :

- Adiabaticité dans la partie supérieure (tête) de la lingotière, entre l'acier et l'air.
- Une condition de Fourier aux interfaces moule-air avec un coefficient d'échange fixé à 100 $W m^{-2} K$ et une température extérieure de 20 °C.

- La température de liquidus de l'alliage binaire Fe- 1,015% mass C est de 1461 °C et celle de solidus de 1345 °C, conduisant à un intervalle de solidification de 116 °C.
- La température initiale de l'acier est de 1500°C et celle de la lingotière de 20°C.
- Le rayon du lingot a été calculé de façon à ce que la masse du lingot soit respectée.

Les données thermophysiques et thermodynamiques de l'alliage binaire Fe- 1,015% mass C, sont reportées dans le Tableau V. 2.

Les cartes de structure et de macroségrégation de ce lingot ont été établies dans le cadre de la thèse de Mazet [2]. Notamment, nous disposons de profils radiaux de composition à différentes hauteurs du lingot. La localisation de ces coupes est indiquée sur la figure V 28.

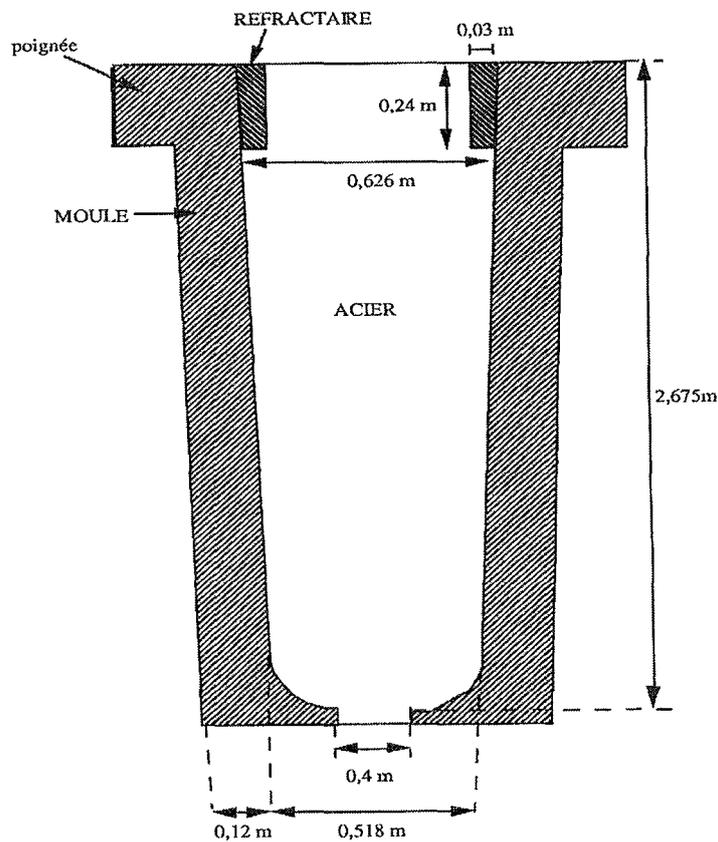


figure V. 27: Schéma représentatif de la lingotière [2]

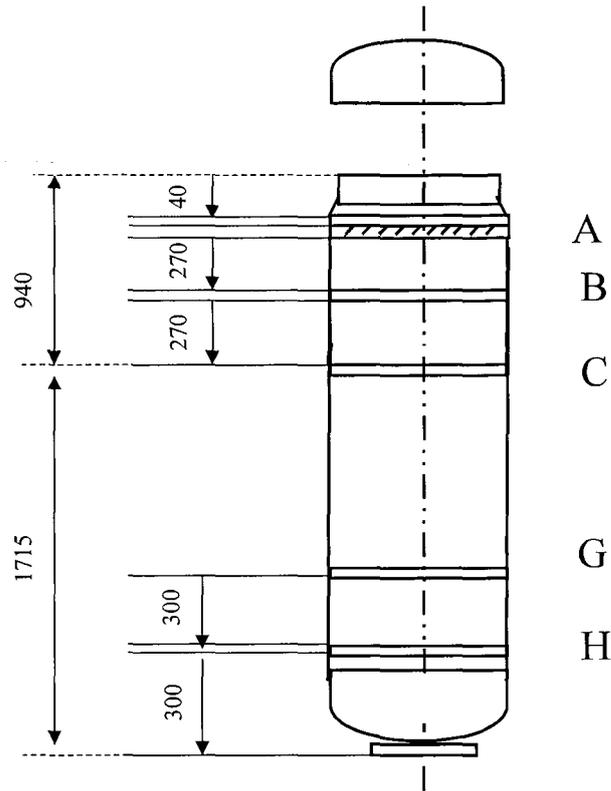


figure V 28 : Schéma indiquant la position des coupes radiales sur le lingot ASCOMETAL de nuance 100C6 [2]. L'unité des dimensions est le millimètre. Les lettres désignent les hauteurs des différentes coupes pour la mesure de composition en carbone

V - 5.1.1. Calculs réalisés et conditions imposées :

Plusieurs types de calculs ont été réalisés. Dans un premier temps, comme pour le lingot de référence, nous avons considéré les conditions suivantes :

❶ **Loi d'injection de fragments :**

Nous avons supposé que les fragments sont formés à la paroi si la température (T) est inférieure à la température de liquidus (T_L) et si la fraction de liquide g^l reste supérieure à 0.9. La densité de flux de fragments utilisée est de 10^7 fragments $m^{-2} s^{-1}$ et la taille initiale (rayon) des grains est égale à $1 \mu m$.

❷ **Fraction liquide de blocage (gpack) :** la fraction de liquide de blocage du mouvement de la phase solide est égale à 0,6

❸ **Maillage :** le maillage utilisé est composé de mailles carrées régulières de dimensions : $\Delta X = \Delta Y = 3$ cm

❹ **Pas de temps de calcul :** le pas de temps de calcul est de 10^{-2} s

V - 5.1.2. Résultats et discussions :

La figure V 29 présente les cartes de température et de fraction de liquide 6 minutes après le début de la solidification. Cet instant correspond au moment où la surchauffe est

complètement évacuée du bain liquide. Les échelles imposées permettent d'une part, de montrer l'évolution thermique du bain liquide et d'autre part de délimiter par la fraction de liquide la zone où les grains sont fixes et celle où ils sont en mouvement.

La carte de fraction de liquide montre qu'à cet instant, les grains ne sont en mouvement qu'en tête de la lingotière, c'est la zone par laquelle la surchauffe est évacuée en dernier et où la fraction de liquide est encore supérieure à **gpack**. Dans cette zone, les grains croissent et sédimentent. Dans la zone de talus, la solidification se poursuit en progressant depuis les parois de la lingotière.

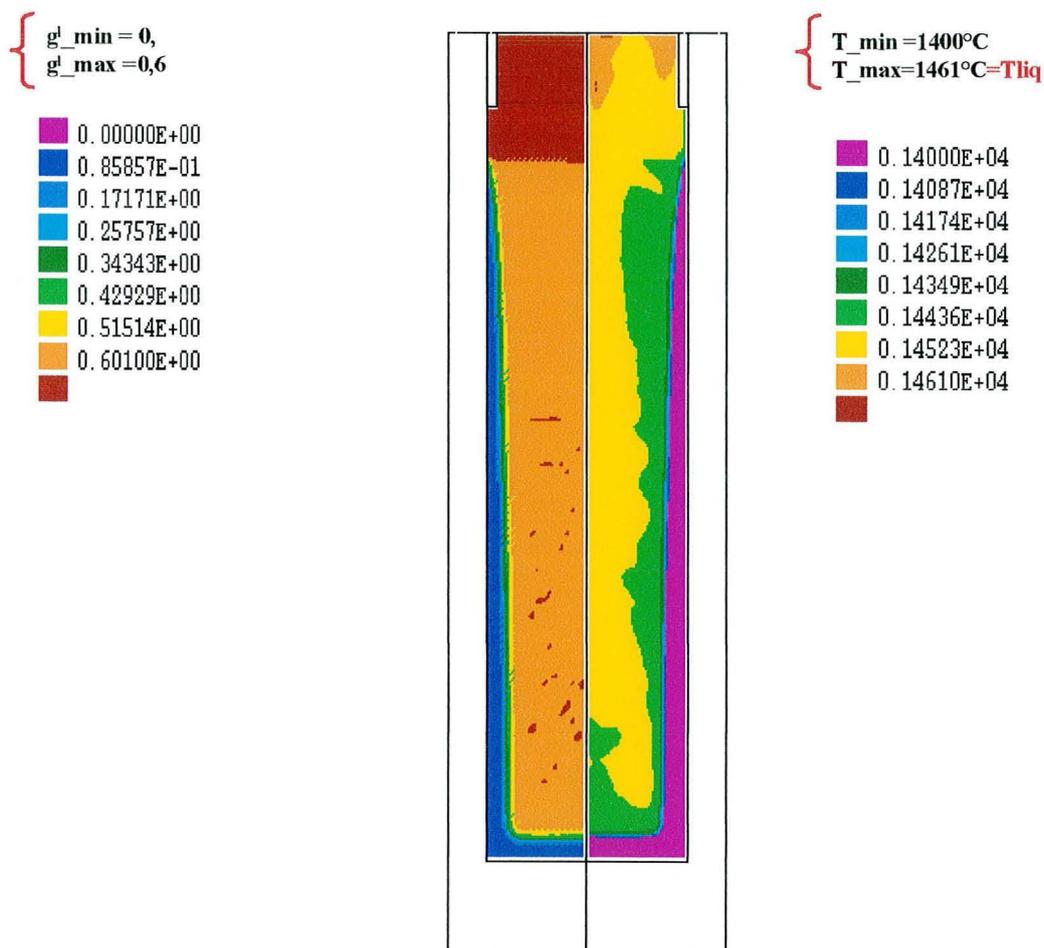


figure V 29: cartes de température et de fraction de liquide au temps $t : 6$ min

La figure V 30 (a) présente le temps de montée du front de cohérence (le front de cohérence est défini comme la frontière entre la zone où les grains bougent et la zone où le solide est fixe) dans le lingot. Avec cette loi d'injection, on constate qu'après 700 s le front de cohérence arrive au niveau de la masselotte. On constate que le lingot se remplit rapidement de

grains. La partie supérieure de la zone masselottée reste longtemps à une fraction de liquide supérieure à g_{pack} et la solidification totale est obtenue au bout de 1h 30 min. Ainsi, pour la plus grande partie du lingot, le temps de montée du front de cohérence est faible comparé au temps total de solidification.

Sur la figure V 30 (b) nous avons reporté le temps de montée du front de cohérence pour les modèles $v_s \neq v_l$ et $v_s=0$. On peut ainsi observer la grande différence entre les temps, le modèle $v_s=0$ conduisant pour les hauteurs comprises entre 0 et 2 m à des temps en moyenne 10 à 20 fois plus grands. Ainsi, le mouvement des grains peut amener très rapidement la partie centrale à des fractions de solide non nulles. Ceci peut être rapproché de la notion de prise de masse de la zone centrale rapportée dans la littérature.

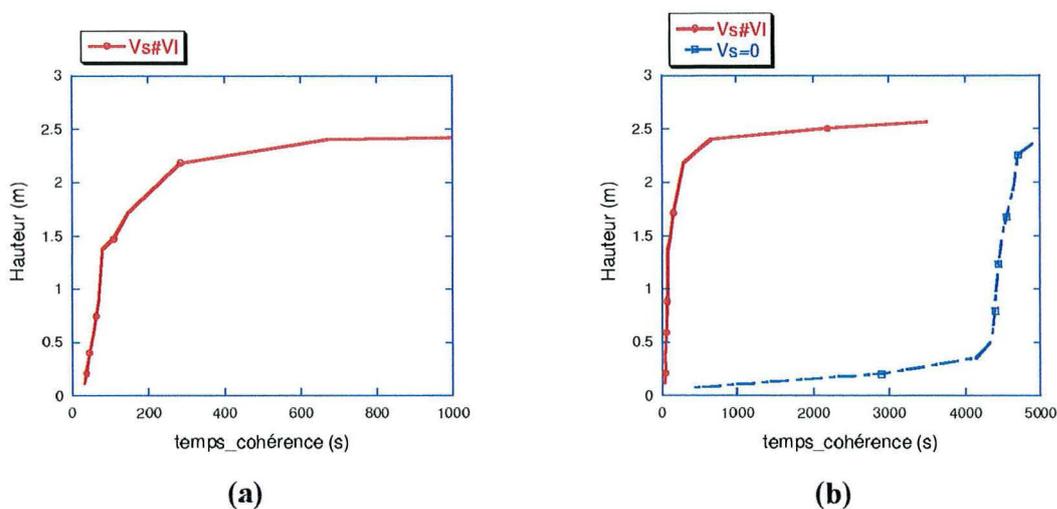


figure V 30 : Montée du front de cohérence au cours du temps

La figure V. 31 (a) présente la carte de composition moyenne finale en carbone. L'échelle imposée met en évidence la macroségrégation négative, s'étendant du pied du lingot jusque sous la masselotte, où son intensité est la plus forte. La confrontation de la macroségrégation axiale calculée avec celle mesurée expérimentalement par Th.Mazet [2] (figure V. 31 (b)), montre que les deux résultats sont proches de puis le pied du lingot jusqu'à l'altitude de 1,8 m. Ensuite un écart entre les deux résultats est observé dans la zone située en dessous de la masselotte. A cet endroit, les calculs révèlent une macroségrégation négative maximale contrairement à l'expérience. Ce résultat s'explique par de fortes accumulations de grains (voir figure V. 32), provoquées par la loi d'injection de fragments utilisée. Il a été révélé par les observations métallurgiques que les grains sont de morphologie dendritique dans cette zone. Ce type de morphologie n'est pas pris en compte dans le modèle. De plus, la morphologie de grain dendritique correspond en principe à des densités de grains faibles. Les calculs conduisent à

une densité de grains forte dans la région située sous la masselotte. La loi d'injection de fragments est sans doute trop simplifiée pour pouvoir décrire les phénomènes.

Nous avons reporté dans le Tableau V 10 les valeurs de temps pendant lequel un point de la paroi du lingot est actif pour l'injection de nouveaux fragments. Les cinq premières hauteurs correspondent à des points situés sous la masselotte. On remarque que le temps d'injection augmente avec l'altitude et qu'il est beaucoup plus important dans la zone de la masselotte. La solidification dans cette zone est très lente et il n'est pas évident que la même loi de création de fragments puisse s'appliquer.

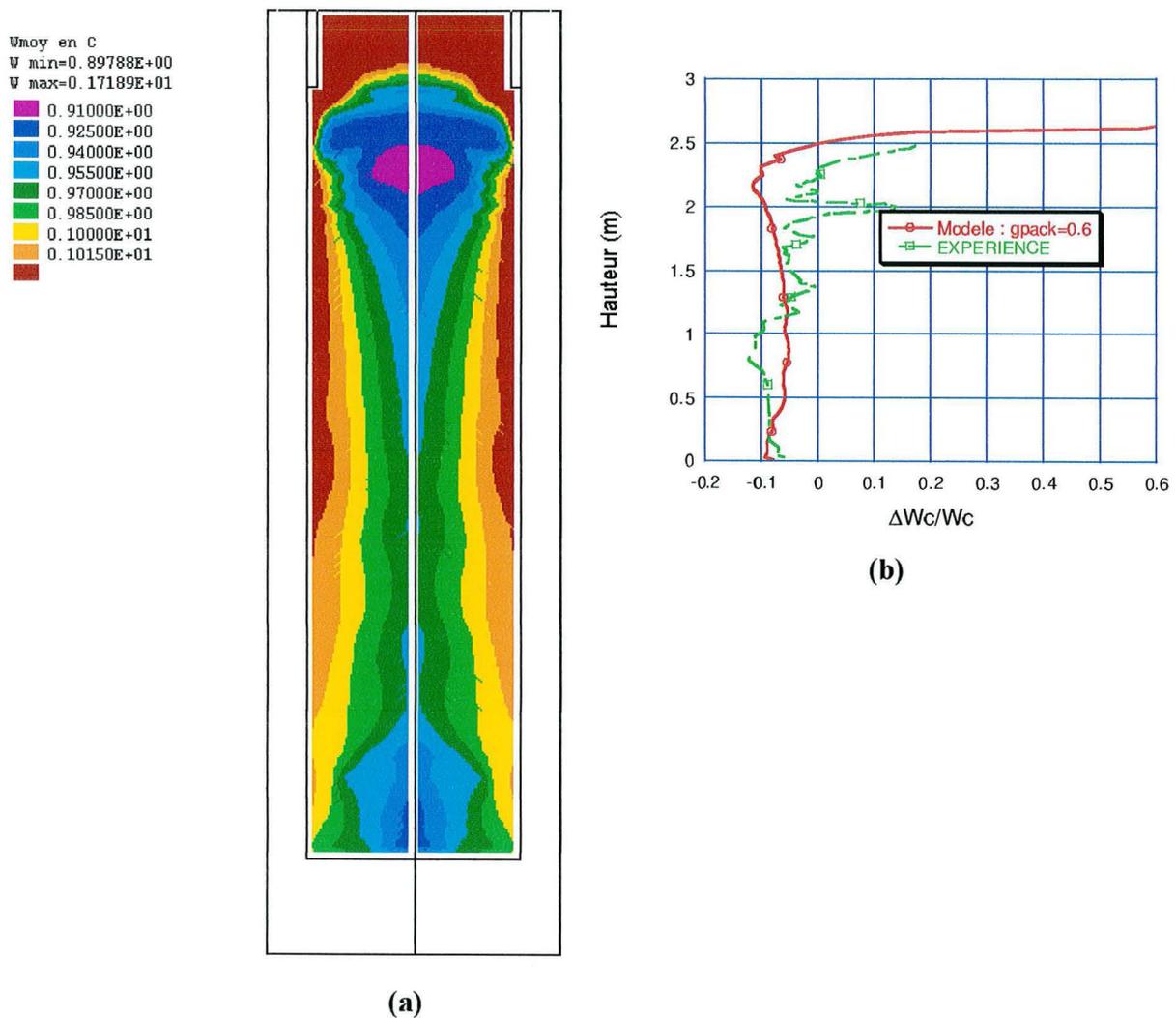


figure V. 31 : Carte de la macroségrégation finale calculée (a)- Comparaison avec les résultats expérimentaux (Mazet [2]) obtenus à l'axe de symétrie du lingot (b)

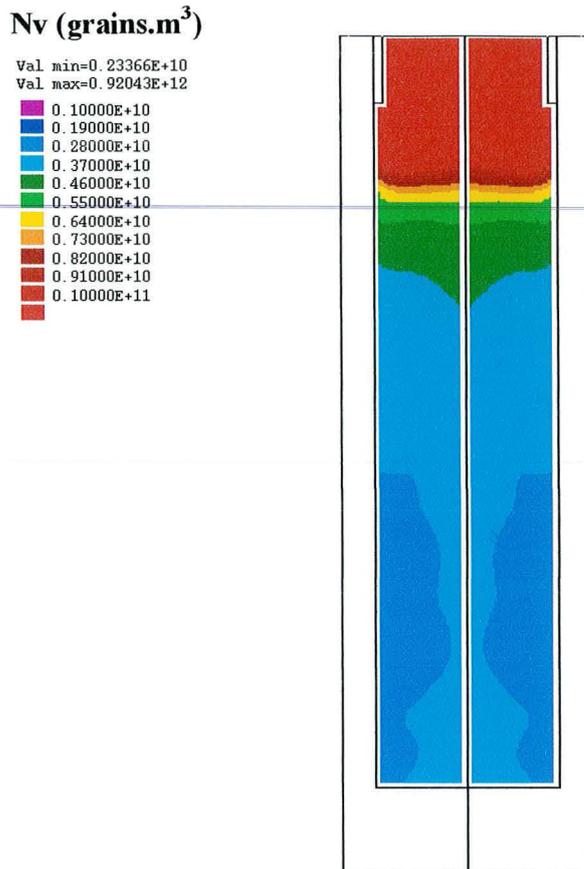


figure V. 32 : carte de la densité volumique de grains équiaxes

Hauteur (m)	0,5	1	1,5	2	2,5	2,84
Temps de début d'injection (s)	3	3	3	3	3	350
Temps d'injection (s)	13	24	38	39	113	2100

Tableau V 10 : temps d'injection à différentes hauteurs du lingot

En plus de la confrontation Modélisation - Expérience, nous avons confronté le modèle $vs\#vl$ avec le modèle $vs=0$ (solide fixe) [4] (voir figure V. 33). Les résultats obtenus montrent que seul le modèle $vs\#vl$ peut conduire à une ségrégation centrale négative pour des altitudes comprises entre 0 et 2 m.

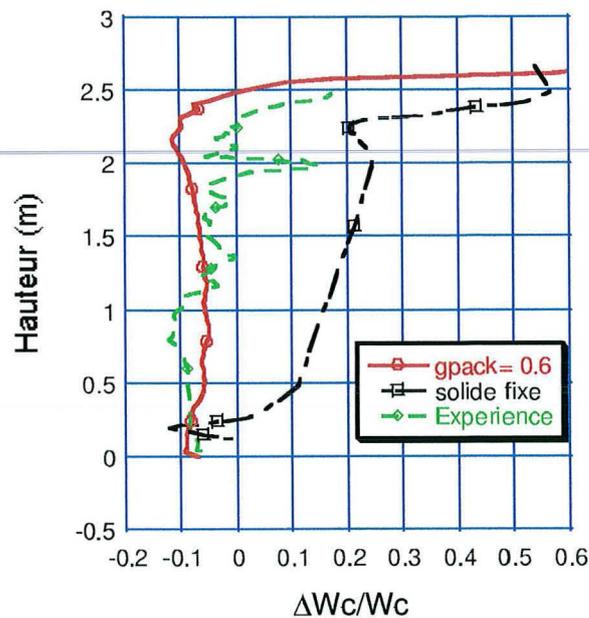


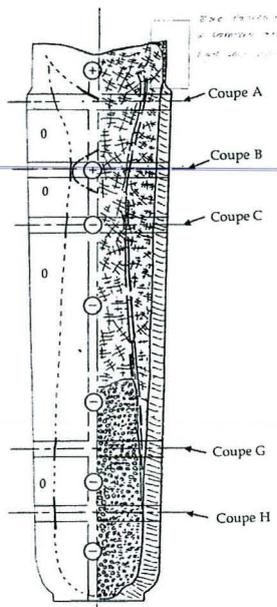
figure V. 33 : évolution de la macroségrégation axiale

Les profils radiaux de composition moyenne en carbone pour l'expérience et les modèles $vs\#vl$ et $vs=0$, sont présentés sur la figure V. 34 pour les coupes : H, G, C, B et A. Sur la figure V. 34, pour la coupe H située à 0,45 m du pied du lingot, on constate que l'évolution du titre massique moyen en carbone obtenu avec le modèle $vs\#vl$ concorde bien avec l'expérience, alors que le profil correspondant au modèle solide fixe s'en écarte complètement. Pour la coupe G (figure V. 34) située à 0,75 m du pied du lingot, il existe toujours un bon accord entre les résultats du modèle $vs\#vl$ et l'expérience. On peut cependant remarquer plus de fluctuations sur les résultats expérimentaux. Les résultats du modèle solide fixe sont encore différents dans la région centrale où le calcul prévoit une macroségrégation positive au lieu d'une négative. Dans la région des rayons compris entre 0,1 et 0,35 m, on peut observer que le modèle solide fixe est également en bon accord avec l'expérience, les variations non monotones du titre massique en carbone sont même décrites par ce modèle. Si l'on revient à la carte des structures de solidification du lingot, il est intéressant de remarquer que dans cette zone, les structures sont dendritiques. On peut donc supposer que le modèle solide fixe arrive à représenter l'expérience car les structures dendritiques se mettent en place rapidement avec des fractions volumiques de phase solide faibles.

Pour la coupe C (figure V. 34) située à 1,8 m du pied du lingot, les résultats du modèle $vs\#vl$ commencent à s'écarter des résultats expérimentaux. La macroségrégation négative dans la région centrale devient plus forte dans le modèle que dans l'expérience. On peut attribuer cet écart à la morphologie des grains qui sont dendritiques dans l'expérience, alors que le modèle

ne considère qu'une seule morphologie : globulaire. Le modèle solide fixe, pour cette coupe, conduit aux mêmes remarques que pour la coupe G. Au niveau de la coupe B, l'écart entre le modèle $v_s \# v_l$ et l'expérience a encore augmenté, la macroségrégation centrale est négative avec le modèle, alors qu'elle est devenue positive dans l'expérience. Cette zone pour le modèle correspond même à la zone de ségrégation négative la plus forte. Cet écart peut être attribué à la morphologie des grains. On note également pour cette coupe, avec le modèle, le développement d'une macroségrégation positive contre la lingotière qui n'existe pas sur les mesures. Cette ségrégation positive s'intensifie sur la coupe A.

Le modèle $v_s \# v_l$ permet donc d'améliorer la prédiction des macroségrégations dans les zones où les cristaux sont globulaires. Il apparaît cependant que la morphologie des grains est un facteur important qui n'est pas pris en compte dans le modèle et de fait ne permet pas encore une bonne description de la macroségrégation dans la partie supérieure du lingot.



(Carte 1)

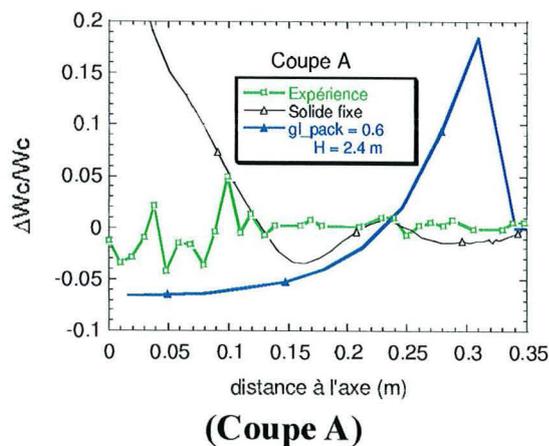
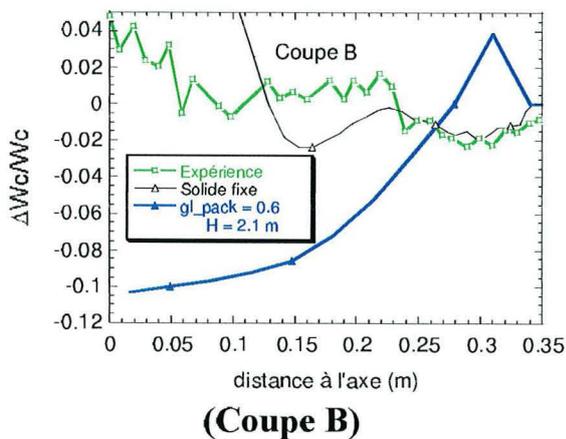
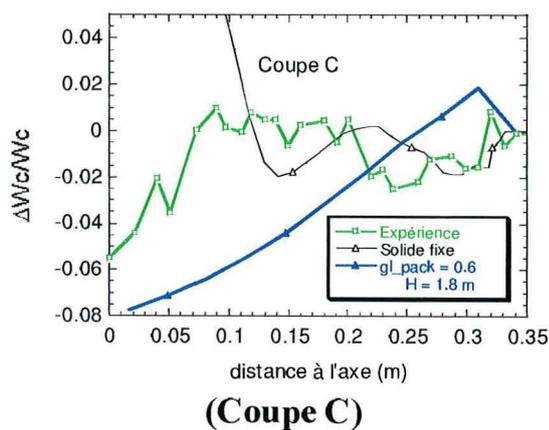
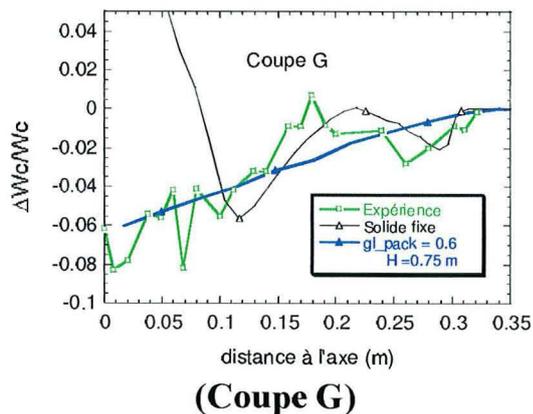
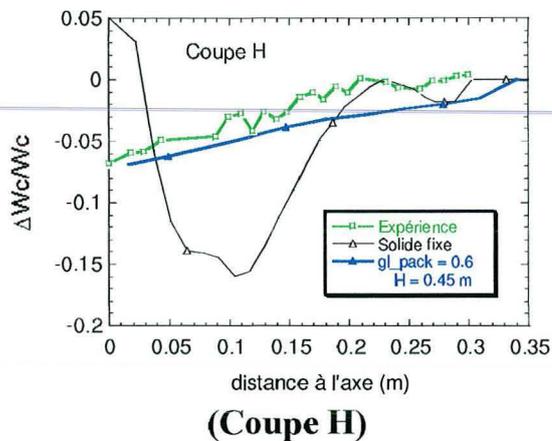


figure V. 34 : Evolution de la macroségrégation radiale à différentes hauteurs de la lingotière

➤ **Influence du maillage :**

Pour étudier l'influence du maillage, nous avons réalisé un calcul en divisant la taille des mailles de moitié : $\Delta X = \Delta Y = 1,5$ cm.

La figure V. 35 montre que le maillage est un paramètre à prendre en compte dans nos calculs. Nous avons vérifié précédemment que la méthode de séparation utilisée pour la résolution du système d'équations du modèle dépendait essentiellement de trois paramètres: le maillage, le pas de temps et la vitesse.

Les résultats obtenus, représentés sur la figure V. 35, montrent que les deux maillages utilisés conduisent à des résultats proches dans la majeure partie du domaine, sauf en tête du lingot où l'effet d'accumulation de grains est significatif. Le pied du lingot est moins ségrégué dans le cas du maillage fin, la différence provient du temps pendant lequel un point de la surface du lingot peut injecter des grains. Du fait des mailles plus fines, ce temps se trouve réduit comme on peut le constater en consultant les résultats présentés dans le Tableau V 11.

Hauteur (m)	0,5	1	1,5	2	2,5	2,84
Maillage $\Delta x = \Delta y = 3$ cm (injection à la paroi)						
Temps de début d'injection (s)	3	3	3	3	3	270
Temps d'injection (s)	13	24	38	39	113	2100
Maillage $\Delta x = \Delta y = 1,5$ cm (injection à la paroi)						
Temps de début d'injection (s)	1	1	1	1	1	350
Temps d'injection (s)	3	3	3	67	156	2350

Tableau V 11 : temps de début d'injection et durée d'injection de fragments

La carte de composition est également plus accidentée dans le cas du maillage fin. Nous n'avons pas approfondi l'étude de ces "accidents" faute de temps.

grains. On peut remarquer l'effet ce phénomène sur la figure V 44 (b) où le titre massique moyen passe soudainement à une valeur importante au niveau de cette zone. On remarque que la courbe expérimentale présente également un saut à une altitude similaire de l'ordre de 2 m. On pourrait ainsi imaginer que la formation de la zone équiaxe centrale passe par deux étapes. Dans une première étape, des grains sont injectés et ils vont participer au remplissage du pied du lingot jusqu'à une altitude de l'ordre de 2 m. Dans une deuxième étape, la zone de la masselotte va se former, avec un mécanisme de création de grains qui arrive plus tard pendant l'étape de solidification. Le Tableau V 12 contient les temps pendant lesquels un point de l'interface zone colonnaire/équiaxe a injecté des fragments pour cet essai et pour l'essai sans colonnaire avec masselotte. On constate que les temps de début d'injection de fragments sont plus grands dans le cas "avec zone colonnaire" et que l'injection ne commence pas au même instant. Elle commence plus tard lorsque l'altitude du point augmente. Les temps d'injection sont plus longs dans le cas "avec zone colonnaire", sauf pour les points situés dans la zone de la masselotte. Ceci explique le défaut de grains dans la partie supérieure du domaine.

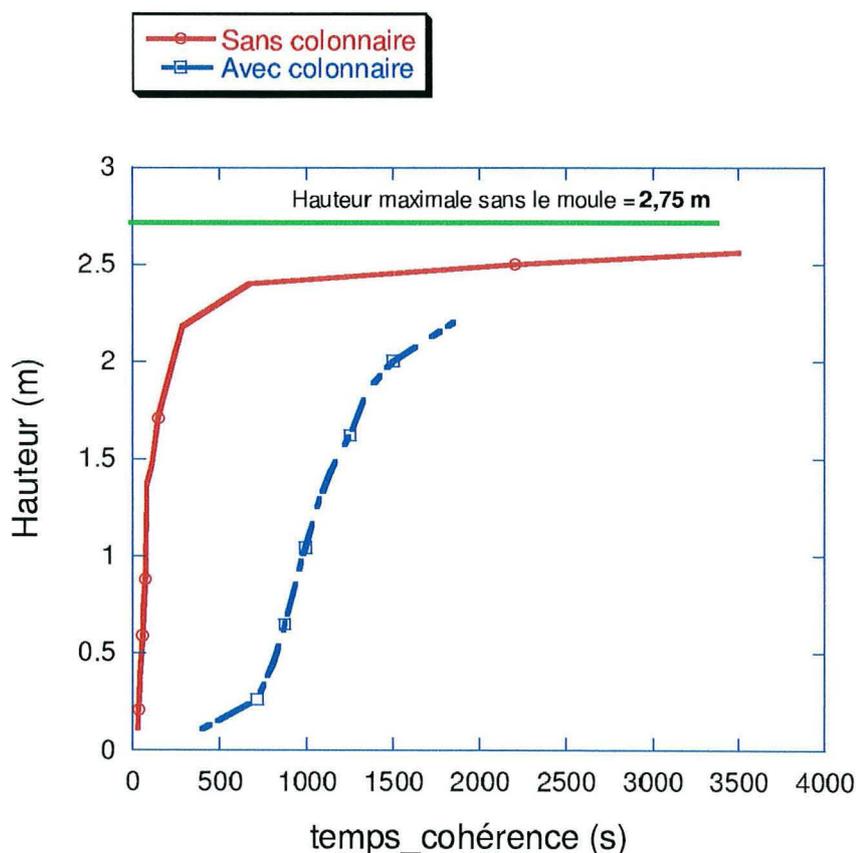


figure V 43 Montée du front de cohérence au cours du temps

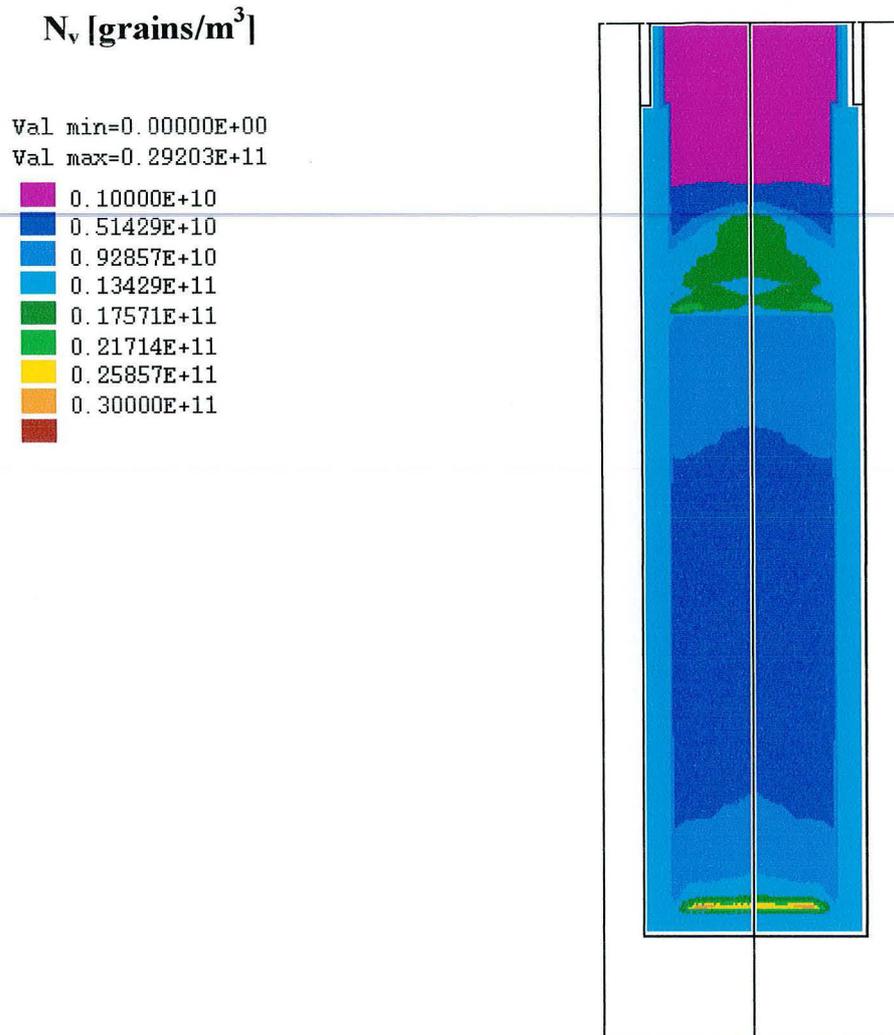


figure V 42 : carte de la densité volumique de grains au temps de 1h 53 min
(maillage $\Delta x = \Delta y = 1,5$ cm)

Ce résultat peut s'expliquer par les temps de montée du front de cohérence très différents entre les deux lois utilisées. Sur la figure V 43, on constate que lorsque les grains sont formés à la paroi verticale, le lingot est rapidement rempli par les grains et conduit à de fortes densités volumiques en tête de ce dernier, alors qu'avec le critère de formation de grains devant le front colonnaire, le lingot met beaucoup plus de temps à devenir pateux. Cette montée tardive du front de cohérence dans le cas colonnaire s'explique par le temps nécessaire pour la formation complète de la zone colonnaire dans le domaine imposé dans nos calculs, l'injection et le transport de grains n'étant possible que si la zone colonnaire est formée. Ce temps induit un décalage de l'ordre de 500 s de la courbe de montée du front de cohérence. La pente de la courbe est également plus faible. De plus, du fait de la présence d'une zone colonnaire le long du réfractaire, cette partie n'est toujours pas active pour l'injection de grains après 1 h 53 min de solidification et la partie supérieure du lingot ne peut continuer à se solidifier faute de

La figure V 41 (a) présente la carte finale du titre massique moyen en carbone. La figure V 41 (b) montre qu'avec la même valeur de densité de flux de fragments que celle imposée dans les essais précédents, les macroségrégations obtenues sont différentes. Avec la présence de la zone colonnaire, la macroségrégation est plus forte en pied du lingot. Au niveau de la masselotte, la macroségrégation négative obtenue dans les simulations précédentes n'existe plus. En effet, à cet endroit, la densité volumique de grains accumulés est moins importante que dans le cas sans la zone colonnaire.

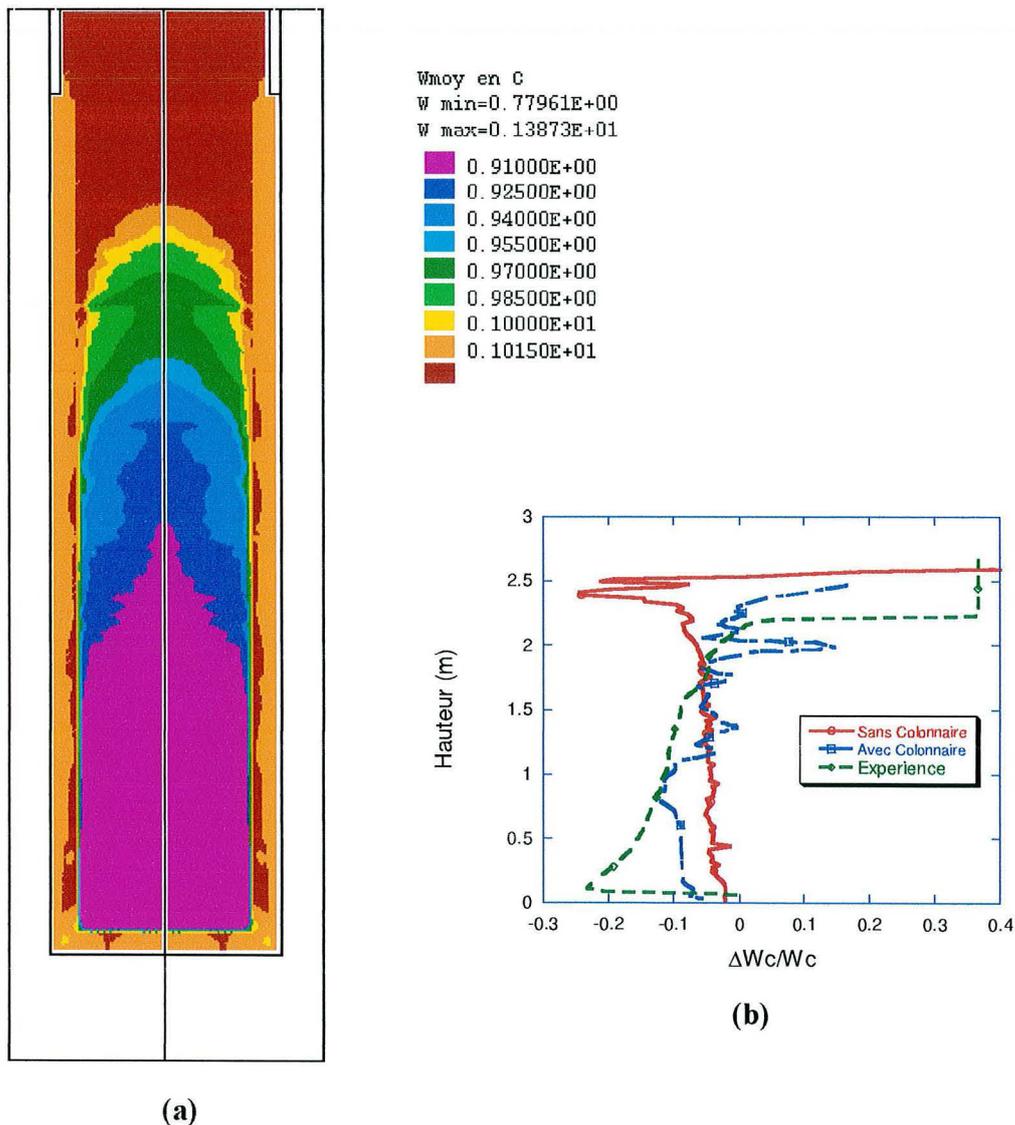


figure V 41 : carte de titre massique moyen en carbone au temps $t = 1 \text{ h } 53 \text{ min}$ (a) et évolution de la macroségrégation axiale (b) (maillage $\Delta x = \Delta y = 1,5 \text{ cm}$)

- ② La cinétique de croissance globulaire est imposée dans tout le domaine (zones colonnaire et équiaxe).
- ③ Deux lois de création de fragments sont utilisées. La première loi considère une création en surface, mais cette fois les fragments sont formés devant le front colonnaire au lieu de la paroi et avec le critère suivant : les fragments sont formés devant le front si la température (T) est inférieure à la température de liquidus (T_L) et si la fraction de liquide g^l reste supérieure à 0,9. La densité de flux de fragments utilisée est égale à 10^7 **fragments $m^2 s^{-1}$** et la taille initiale (rayon) des grains est égale à **1 μm** . Le choix de cette loi suppose que la transition colonnaire-équiaxe se produise au moment où le flux de fragments détachés du front colonnaire devient important. La deuxième loi de création est utilisée dans la zone colonnaire. Dans cette zone, nous considérons une germination en volume des grains en supposant que: *les fragments cristallins germent en volume instantanément lorsque la température (T) est égale à la température de liquidus (T_L)*. Une densité volumique de 10^{10} **germes m^{-3}** et un rayon initial de grains de 1 μm sont alors utilisés.

Tous les autres paramètres sont pris à des valeurs identiques aux valeurs des calculs précédents.

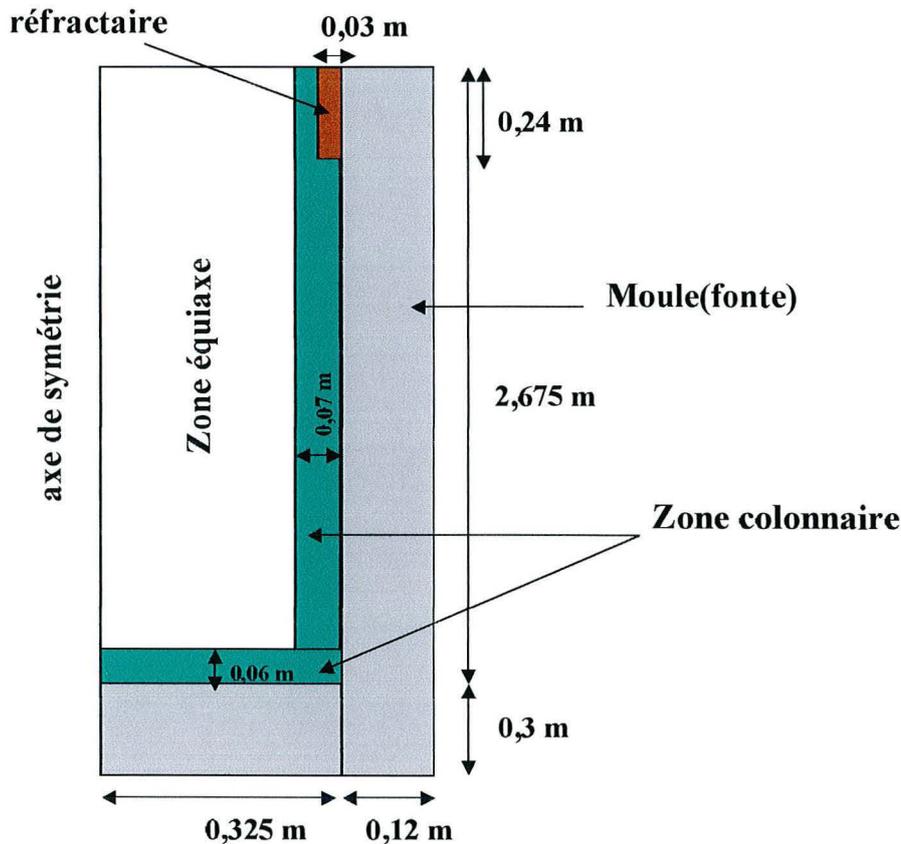


figure V 40 : carte représentative des zones (colonnaire et équiaxe) d'étude du domaine

$Nv_{\min} = 1,7 \cdot 10^9 \text{ grains/m}^3$
 $Nv_{\max} = 1,2 \cdot 10^{12} \text{ grains/m}^3$

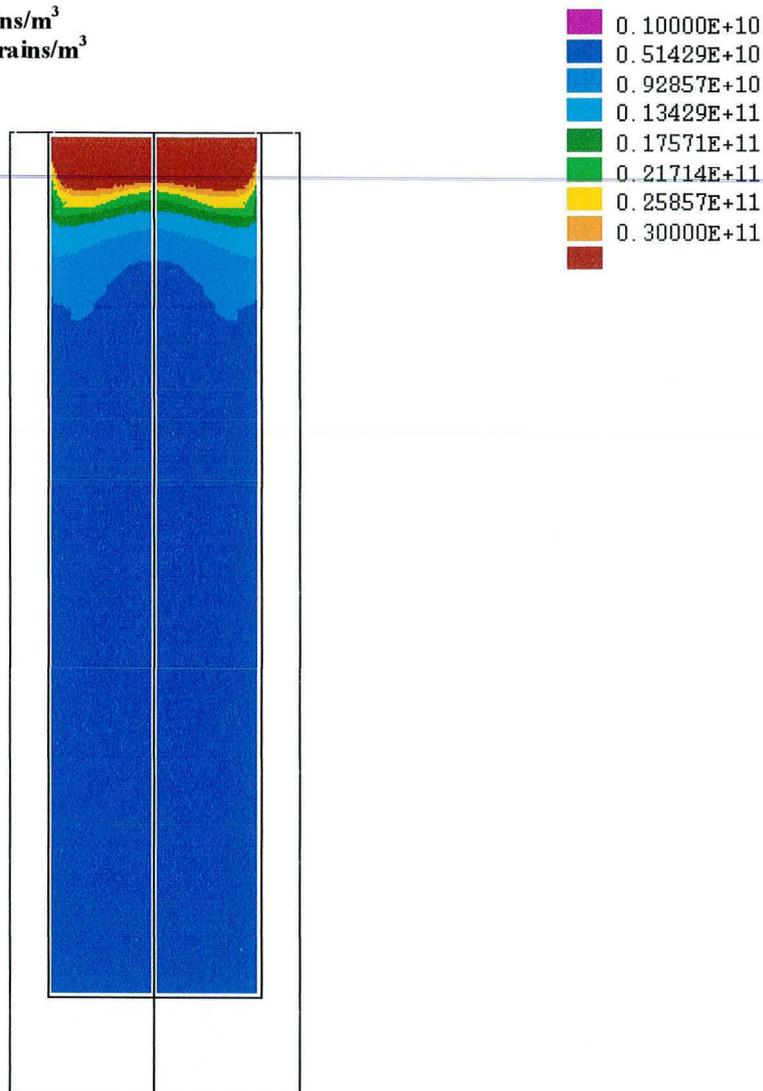


figure V 39 : carte de la densité volumique de grains
 (maillage $\Delta x = \Delta y = 1,5 \text{ cm}$)

➤ *Influence de la zone colonnaire :*

Th. Mazet a montré que le lingot présente une zone colonnaire. Dans nos calculs, cette zone n'a pas été jusqu'à la prise en compte. La zone colonnaire se développe au voisinage des parois de la lingotière et peut influencer la macroségrégation. Pour vérifier l'influence de sa présence, nous avons réalisé un calcul en supposant :

❶ deux zones distinctes de solidification : colonnaire et équiaxe. L'étendue de la zone colonnaire telle que mesurée expérimentalement est imposée. Sur la figure V 40 les zones équiaxes et colonnaires imposées dans le calcul sont imposées.

masselotte. En effet, lorsque la masselotte n'est pas utilisée, l'isolation thermique imposée en tête du lingot n'existe plus. Ceci a pour effet de limiter le temps pendant lequel des fragments sont injectés en tête du lingot.

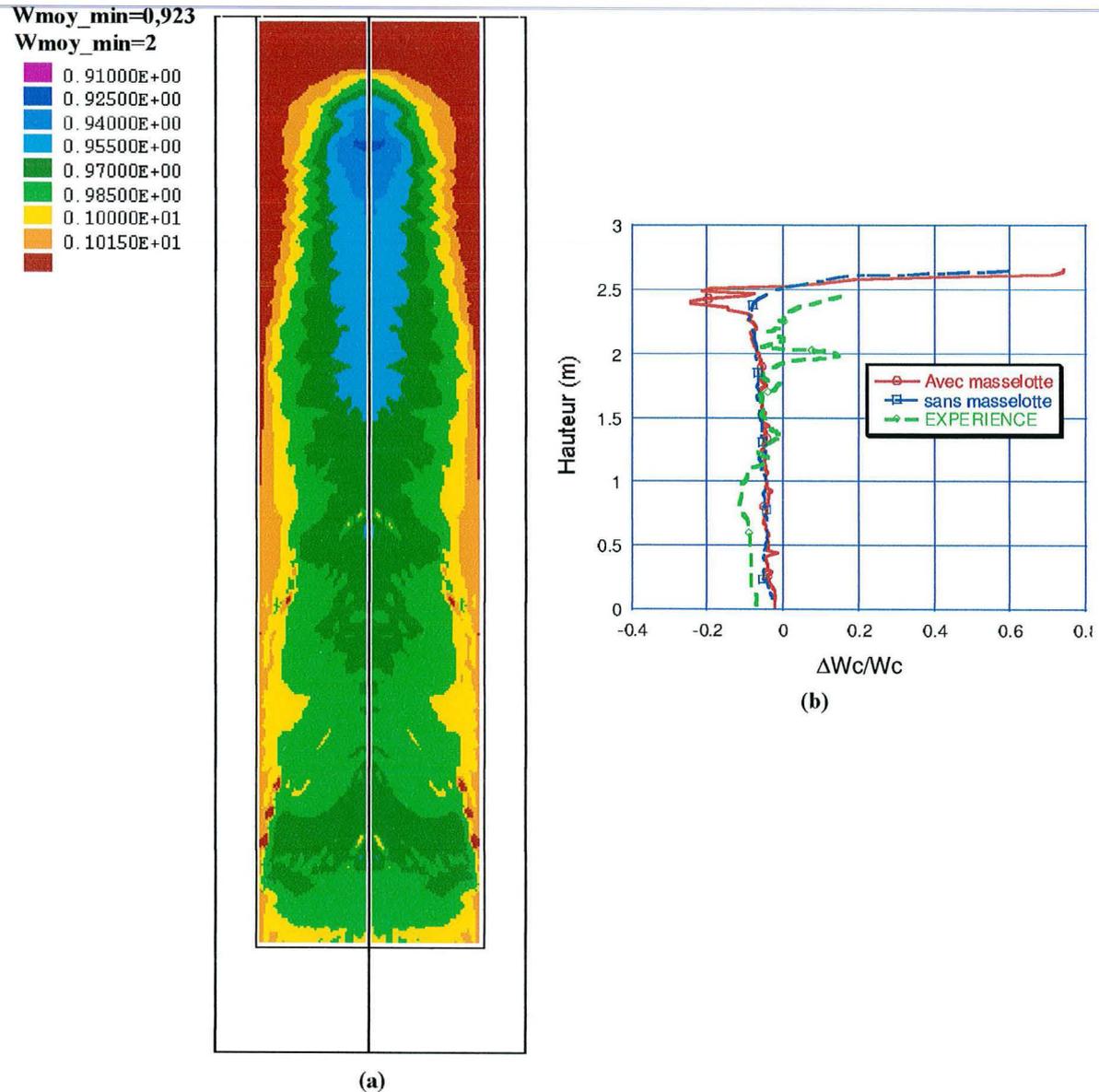


figure V. 38 : carte finale de macroségrégation (a) et évolution de la macroségrégation axiale pour un calcul avec et sans masselotte (maillage $\Delta x = \Delta y = 1,5$ cm)

blocage devient très faiblement perméable et les mouvements du liquide deviennent négligeables. On peut remarquer sur la figure V. 37, qu'avec la valeur de 0,8 pour la fraction de blocage, la macroségrégation est mieux prédite dans la zone d'altitude comprise entre 1,5 m et 2,3 mètres. Nous avons déjà rapporté que dans cette zone, l'analyse métallographique a montré que les grains équiaxes présentaient une morphologie dendritique. Bien que la morphologie des grains n'est pas prise en compte dans ce modèle, on peut supposer que si les grains sont dendritiques, la vitesse de croissance de leurs bras principaux est plus rapide que celle de sphères pleines. L'arrêt des grains se produit alors pour des plus faibles valeurs de fraction de solide.

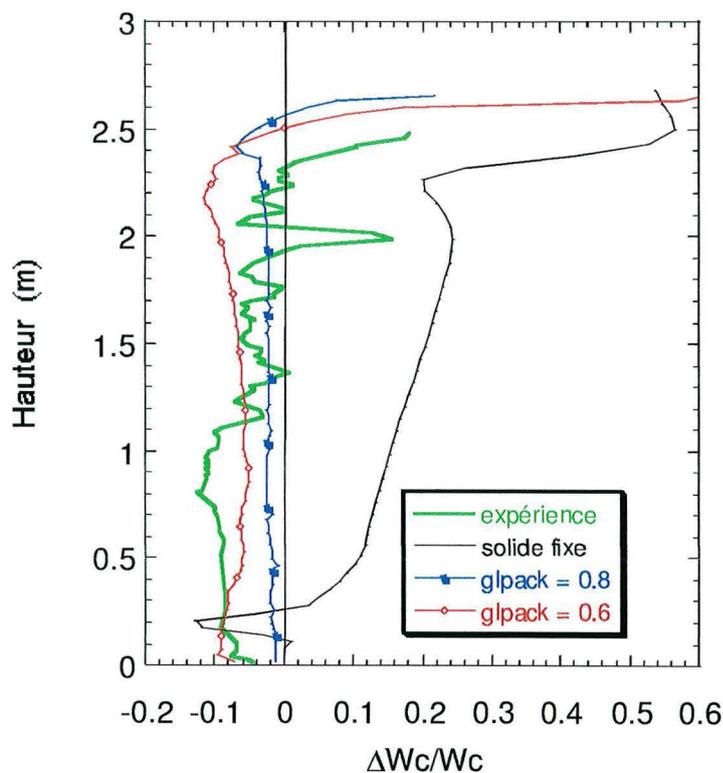


figure V. 37 : Influence de **gpack** sur la macroségrégation (maillage $\Delta x = \Delta y = 3$ cm)

➤ *Influence de la masselotte (maillage fin) :*

Sur la figure V. 38 (1), nous avons confronté les résultats précédents avec ceux obtenus avec l'hypothèse que la masselotte n'existe pas en tête du lingot (pas de réfractaire). On constate que les résultats sont similaires sauf en tête du lingot où, dans le cas sans masselottage, la ségrégation négative est moins importante. Précédemment, nous avons expliqué qu'à cet endroit, cette ségrégation négative maximale résulte de la loi de création de fragments. Ces résultats de calculs montrent que cet effet d'accumulation est minimisé par l'absence de

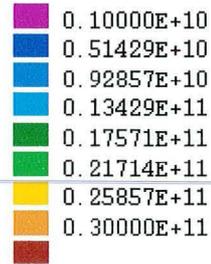
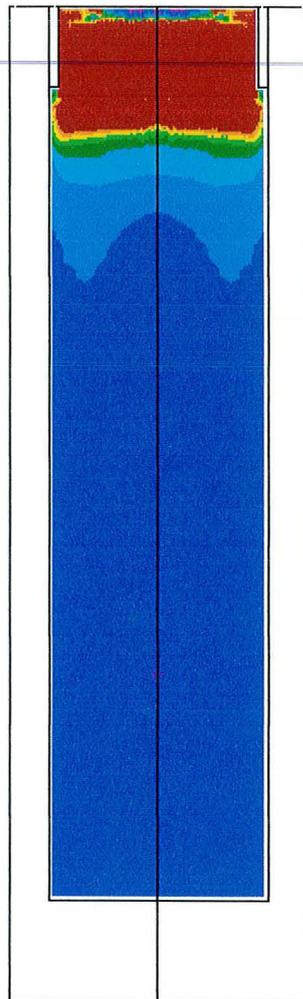
$Nv_min=0 \text{ grains/m}^3$
 $Nv_max=1,36.10^{12} \text{ grains/m}^3$


figure V 36 : carte de la densité volumique de grains
(maillage $\Delta x = \Delta y = 1,5 \text{ cm}$)

➤ **Influence de la fraction de liquide limite (*gpack*) :**

La fraction de liquide à partir de laquelle on considère la phase solide fixe est une grandeur physique importante dans le modèle. L'étude paramétrique réalisée précédemment sur un cas académique a montré que l'intensité de la macroségrégation est dépendante de cette valeur limite. La figure V. 37 montre en effet que lorsque la phase solide est bloquée très tôt, à 0,8 au lieu de 0,6, l'intensité de la macroségrégation diminue. A partir du moment où les grains sont immobilisés, l'évolution de la composition moyenne locale s'arrête, parce que la zone de

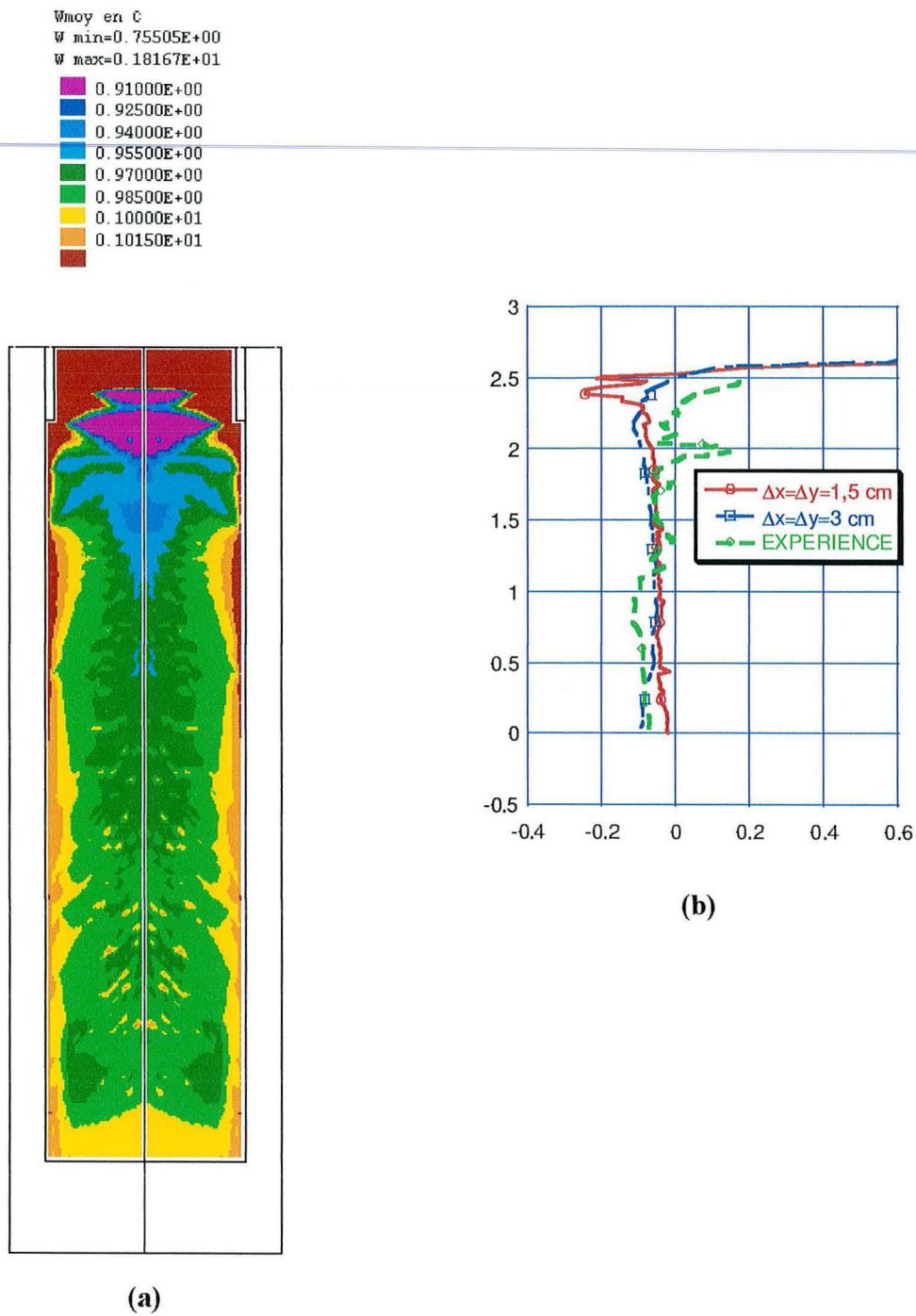


figure V. 35 : carte finale de macroségrégation (a) et Influence du maillage sur la macroségrégation (b) pour le calcul avec un maillage fin.

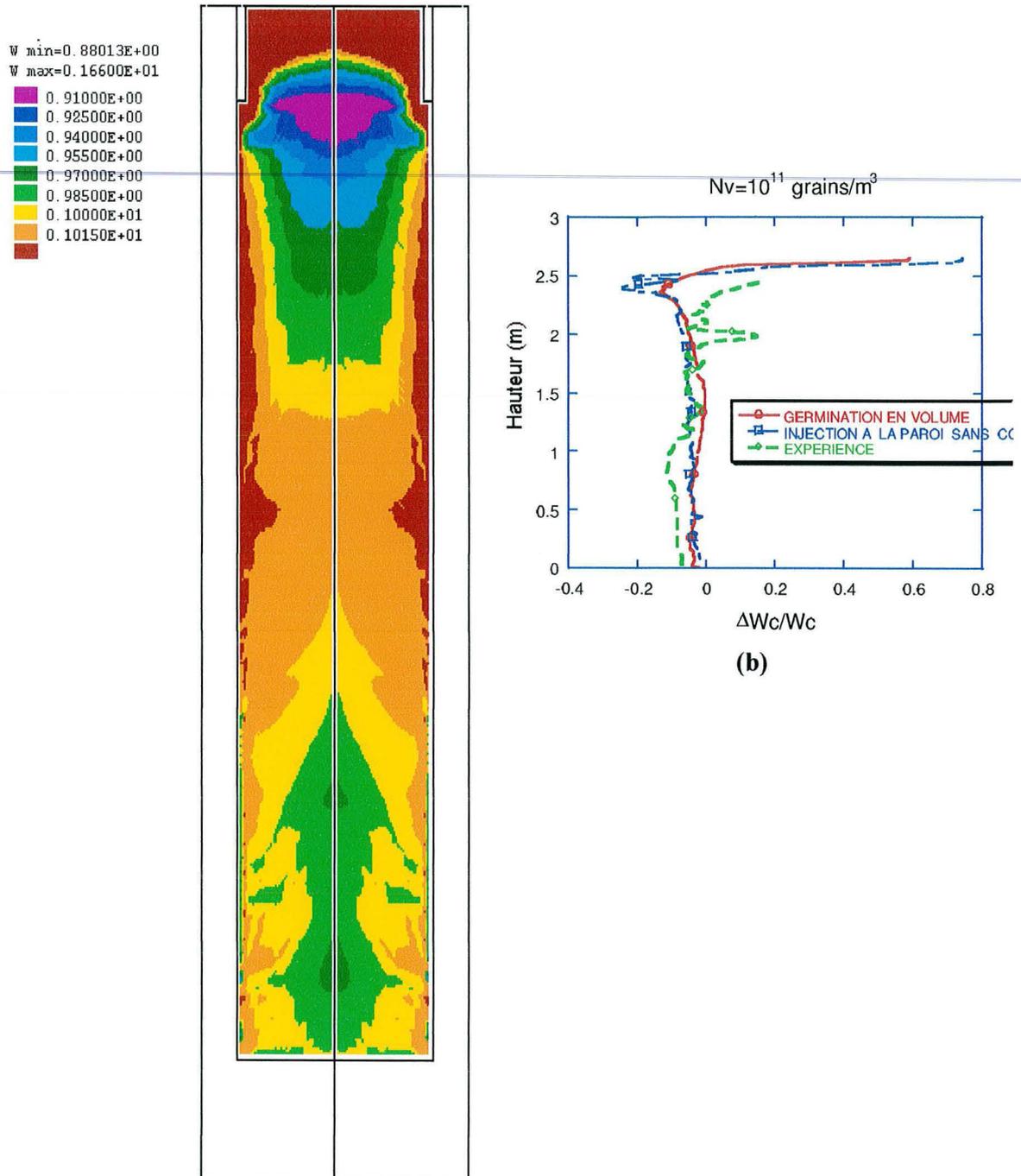
Hauteur (m)	0,5	1	1,5	2	2,5	2,84
Calcul avec colonnaire : Maillage $\Delta x = \Delta y = 1,5$ cm						
Temps de début d'injection (s)	127	137	163	195	275	1020
Temps d'injection (s)	56	53	47	50	40	330
Calcul sans colonnaire : Maillage $\Delta x = \Delta y = 1,5$ cm						
Temps de début d'injection (s)	1	1	1	1	1	350
Temps d'injection (s)	3	3	3	67	156	2350

Tableau V 12 : temps de début d'injection et durée d'injection de fragments

➤ **Influence de la loi de germination de grains en volume :**

Jusqu'à présent, nous avons imposé dans tous nos calculs que les fragments naissent à la surface de la paroi de la lingotière ou du front colonnaire, alors que dans la littérature ([21], [22], [24], [25], [26],...), les germes sont le résultat d'une germination hétérogène. Pour étudier l'influence de la loi de germination, nous avons réalisé une étude numérique avec une loi de germination hétérogène où l'on suppose que : « *les fragments cristallins germent en volume instantanément, lorsque la température (T) est égale à la température de liquidus (T_L)* ». La densité volumique de germes utilisée pour le calcul est de 10^{11} germes/m³.

La figure V 44 (a) présente la carte finale de titre massique moyen en carbone obtenue. La figure V 44 (b) montre que la macroségrégation négative obtenue en tête de lingot est légèrement plus faible par comparaison au cas où les fragments sont injectés aux parois. Une accumulation de grains en tête de lingot est toujours obtenue (voir figure V 45). Dans le cas de la germination en volume, dans la zone comprise entre les altitudes 1 m et 1,5 m, le niveau de ségrégation devient presque nul, ce qui n'est pas le cas avec l'injection de fragments aux parois. Cette tendance est également observée sur la courbe de ségrégation axiale expérimentale.



(a)

figure V 44 : carte finale de la macroségrégation dans le cas d'une loi de germination en volume (a) et évolution de la macroségrégation axiale (b) (maillage $\Delta x=\Delta y=1,5$ cm)

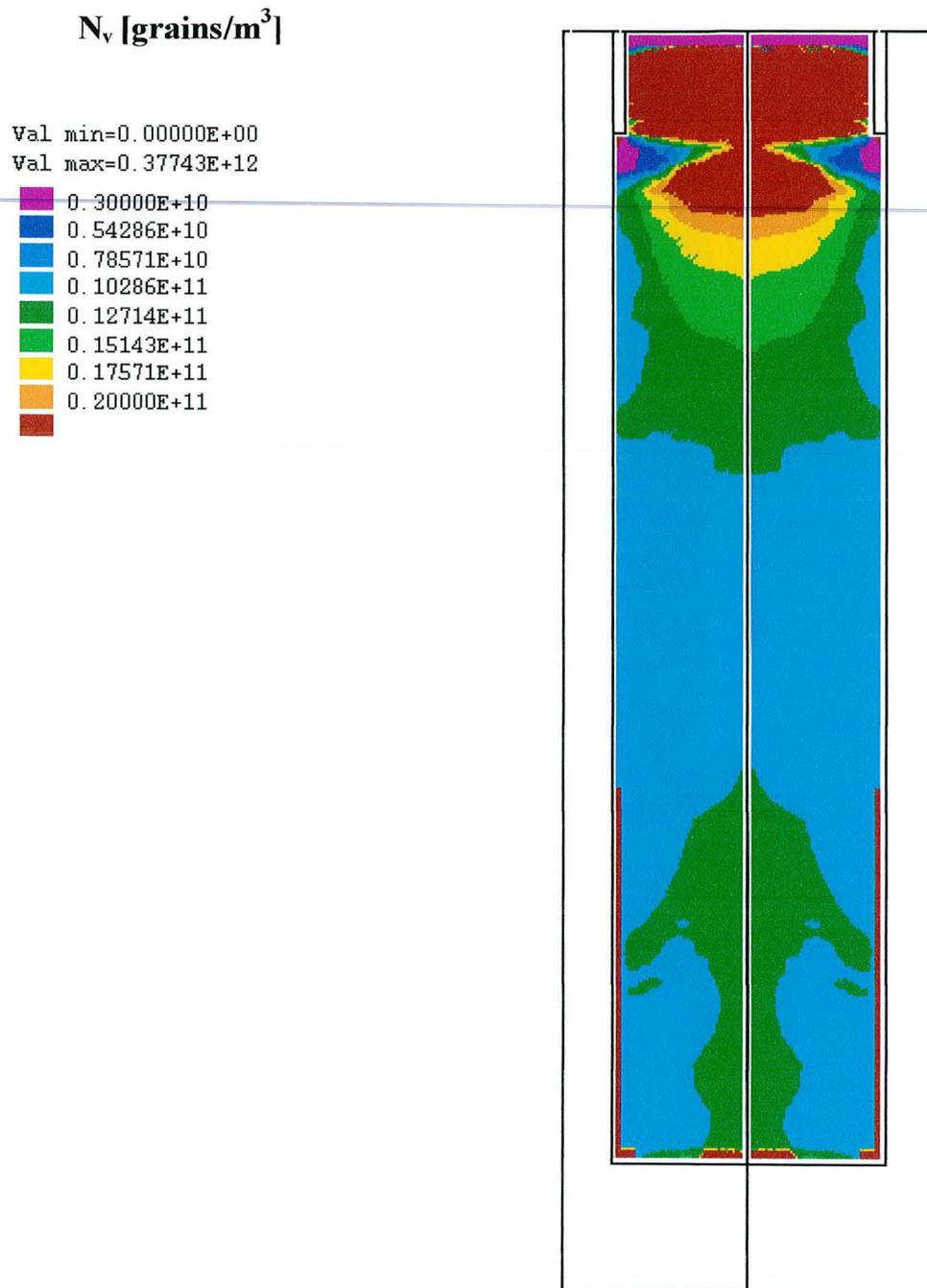


figure V 45 : carte finale de la densité volumique de grains dans le cas d'une loi de germination en volume (maillage $\Delta x = \Delta y = 1,5$ cm).

V - 6. CONCLUSIONS :

Les analyses numériques réalisées dans cette étude ont été obtenues avec un modèle qui suppose que la phase solide est en mouvement dans un intervalle de fraction de liquide et que les grains refondent ou croissent suivant une cinétique valable pour des grains de morphologie globulaire. Ces grains naissent aux parois ou devant le front colonnaire avec une densité de flux imposée, ou germent en volume. L'intervalle de fraction de liquide dans lequel la phase solide est en mouvement est défini par une fraction de liquide limite qui est une donnée imposée dans le code de calcul. Au cours de cette étude, nous avons montré que cette grandeur joue un rôle important sur la l'intensité de la macroségrégation finale. Dans l'ensemble des calculs réalisés sur les lingots industriels, nous avons fixé sa valeur à **gpack=0,6**, elle est en effet la valeur de la fraction de liquide de blocage qui approche le mieux les résultats expérimentaux.

Les cartes expérimentales établies par Mazet [2] ont révélé qu'il existe deux formes de croissance de grains équiaxes : **globulaire** et **dendritique**. Dans l'état actuel du modèle, la cinétique mise en place considère que les grains sont de morphologie globulaire et les applications numériques réalisées sur le lingot industriel ont montré que le modèle concorde avec l'expérience dans les zones où la croissance globulaire est prédominante. Il reste maintenant à compléter le modèle par la prise en compte de la morphologie dendritique et décrire ainsi les zones où les grains croissent suivant cette morphologie.

Dans cette étude, nous avons mis en évidence l'influence de la loi de formation de grains équiaxes. Cette formation de grains qui est l'origine de la zone équiaxe reste encore pour nous, un paramètre mal connu.

Un autre phénomène qui n'est pas encore traité dans le code de calcul actuel est la **croissance des zones colonnaires**.

En résumé, avec le modèle **vs#vl**, les deux points qui restent à traiter rigoureusement sont :

- ① Croissance dendritique des grains équiaxes.
- ② Croissance colonnaire.

Finalement, sur cette étude on conclut qu'un modèle diphasique prenant en compte le mouvement relatif de la phase solide par rapport à la phase liquide a été développé. Ce modèle permet d'étudier l'évolution des grains équiaxes globulaires en mouvement, la formation du cône de sédimentation et la macroségrégation qui en résulte. Son application sur un lingot industriel a montré que le modèle concorde avec l'expérience dans les zones où la croissance globulaire est prédominante. Il reste cependant à compléter le modèle par la prise en compte de la morphologie des grains. On a également mis en évidence l'influence de la loi d'injection de grains qui reste un paramètre encore mal connu.

CONCLUSION GENERALE

Dans ce travail de recherche nous nous sommes intéressés à l'origine de la formation de la zone équiaxe et à l'étude du mouvement et de la croissance - refusion des grains équiaxes pendant la solidification.

Dans la première partie de cette étude, nous nous sommes intéressés plus particulièrement aux grains équiaxes qui se forment du fait de la fragmentation du tissu dendritique colonnaire. La recherche bibliographique réalisée sur cette thématique a permis d'identifier les principaux phénomènes physiques responsables de la fragmentation du tissu dendritique. Ces phénomènes physiques sont essentiellement :

- Les effets de courbure interfaciale
- La décélération du front colonnaire
- La convection.

Nous avons ensuite quantifié à partir de l'exploitation de résultats expérimentaux les densités de flux de fragments générées par des structures dendritiques d'alliages métalliques : **Pb-Sb**. Nous avons ensuite mis en évidence les effets de la convection et de la teneur en éléments d'alliages sur la fragmentation. On a conclu que :

- La composition nominale de l'alliage qui détermine avec les conditions thermiques, notamment le nombre de bras secondaires présents dans la zone pâteuse et la perméabilité de cette zone est un paramètre sensible. Nous avons constaté que plus l'alliage est chargé et plus on détache de fragments.
- L'augmentation de l'intensité des mouvements de convection accroît le détachement de fragments.

Enfin, les résultats de nos travaux et ceux rapportés dans la littérature ont permis de fixer une fourchette de la densité de flux de fragments, suivant la nature de l'alliage.

Les fragments détachés du tissu dendritique sont instantanément transportés dans le puits liquide où ils refondent ou croissent. Un modèle développé pour la croissance-refusion des grains équiaxes globulaires a permis de décrire les évolutions de ces derniers dans le puits liquide. Ce modèle a été appliqué à l'expérience mise au point par Moukassi [3]. Les résultats obtenus ont montré que pour la nuance Pb-4%Sb, le modèle concorde avec l'expérience. Par

contre, pour la nuance Pb-2%Sb, une différence entre la modélisation et l'expérience est obtenue. Cette différence entre les deux résultats peut s'expliquer par le mode de croissance qui peut être dendritique au lieu de globulaire comme supposé par le modèle ou par la loi de germination utilisée.

Dans cette étude, nous avons étudié la sensibilité du modèle à certaines grandeurs physiques, nous en avons conclu que :

- La surchauffe initiale est un paramètre qui n'influence en aucun cas la croissance. Elle retarde ou avance seulement son commencement.
- La surfusion aux pointes des dendrites colonnaires influence la croissance et les tailles finales des grains, mais pas sur leurs évolutions.

Le dernier point que nous avons traité dans cette étude concerne l'incidence de la prise en compte des mouvements des grains équiaxes. Dans cette partie, un modèle diphasique qui tient compte du mouvement de la phase solide a été établi et introduit dans le code de calcul **SOLID**. Pour cela, une méthode de séparation a été mise au point pour résoudre de façon efficace l'ensemble des équations couplées. Cette méthode de séparation consiste à découpler le système d'équations en deux parties : une partie transport et diffusion à l'échelle macroscopique et une partie liée à la croissance locale.

Une étude numérique a été ensuite réalisée sur un cas académique :

- Dans un premier temps, nous avons supposé que les grains se déplacent avec le liquide à la même vitesse. Elle a servi à mettre au point la méthode de résolution et l'algorithme de calcul. Les résultats quantitatifs obtenus montrent l'influence de la prise en compte du mouvement et de la croissance - refusion des grains, surtout dans les zones surchauffées. Cependant, avec ce type d'approche, la macroségrégation n'existe pas.
- Dans un deuxième temps, un modèle qui prend en compte le cas où localement la phase solide est fixe ou suit un mouvement différent de celui de la phase liquide, a été développé. Suivant cette approche, nous sommes arrivés à décrire et comprendre la formation de la macroségrégation, en tout cas partiellement.
Son application sur un lingot industriel a montré que le modèle concorde avec l'expérience dans les zones où la croissance globulaire est prédominante.
La lecture des résultats obtenus a apporté plusieurs éléments de réponse pour la compréhension de la formation de la zone équiaxe centrale. Cependant, à ce stade de développement, le modèle est encore incomplet. Il ne traite pas encore la croissance dendritique et la croissance colonnaire.

Finalement, le modèle diphasique développé au cours de ce travail, permet d'étudier les évolutions des grains équiaxes globulaires en mouvement, la formation du cône de sédimentation et la macroségrégation qui en résulte.

Perspectives :

A l'état actuel, le modèle diphasique ne permet pas de décrire la croissance dendritique et la formation de la zone colonnaire, il reste donc à compléter par la prise en compte de la morphologie des grains et de la croissance colonnaire.

Un travail de recherche approfondi sur la loi d'injection de grain qui reste un paramètre encore mal connu est nécessaire.

REFERENCES
BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] [LESOULT 1986] G.Lesoult, Solidification : Cristallisation et Microstructures, Techniques de l'Ingénieur, M 58, tome M1 1986
- [2] [MAZET 1995] Th.Mazet, Etudes des structures de solidification et des ségrégations des lingots d'acier, Thèse de doctorat de l'INPL, 1995
- [3] [MOUKASSI 1988] M.Moukassi, Influence du brassage du métal liquide sur le déroulement de la solidification des alliages métalliques. Application à la formation de la zone équiaxe dans la coulée continue, Thèse de doctorat de l'INPL, 1988
- [4] [VANNIER 1995] I.Vannier, Modélisation de la solidification des lingots d'acier, Thèse de doctorat de l'INPL, 1995
- [5] [NI 1995] J.Ni and P.Incropera, Int.J.Heat and Mass Transfer, Vol 38, 1995, pp 1271-1284
- [6] [LESOULT 1982] G.Lesoult, P.New and J.P.Birat, Proceedings of the Symposium of the International Union of Theoretical and Applied Mechanics Trinity-College, Cambridge, UK, September 1982, pp 169-179
- [7] [ESAKA 2000] H.Esaka, T.Wakabayashi, K.Shinozuka and M.Tamura, Proceeding of the Ninth International Conference on Modelling of Casting, Welting and Advanced Solidification Processes IX, Germany, August 20 to 25, 2000
- [8] [JACKSON 1966] K.A.Jackson, J.D.Hunt, D.R.Uhlman and T.P.Seward, Trans, TMS AIME, 1966, Vol 236, pp. 149-158
- [9] [HANSEN 1996] G.Hansen, A.Hellawell, S.Z.Lu and R.S.Steube, Metallurgical Materials Transactions A, 1996, Vol 27A, pp. 569-581
- [10] [PARADIES, 1992] C.J.Paradies and M.E.Glincksman, S.H. Davis et al. (Ed.), Dynamics of convection and solidification, Kluner academic publishers, Netherlands, 1992, pp. 81-91
- [11] [PARADIES, 1997] C.J.Paradies, R.N.Smith and M.E.Glincksman, Metallurgical Materials Transactions A, 1997, Vol 28A, pp 875-87
- [12] [PILLING 1992] J.Pilling and A.Hellawell, Metallurgical and Materials Transactions A, 1996, Vol 27A, pp 229-232
- [13] [SALVADORI 1990] D.Salvadori, G.Lesoult et E.Bobadilla, Rapport d'avancement, IRSID 1990
- [14] [SATO 1987] T.Sato, W.Kurz and K.Ikawa, Trans Japan Institute of Metals, 1987, Vol 12, pp.1012 - 1021
- [15] [GAO 1999] J.W.Gao and C.Y.Wang, Trans ASME 1999, Vol 121, pp 430-

- [16] [GASKELL 1996] D.R. Gaskell, Matthew John M. Krane and Frank P. Incropera, Inter Journal of Heat and Mass Transfer, Vol 39, Iss 17, November 1996, pp 3567-3579
- [17] [BENNON 1987] W.D.Bennon and F.P. Incropera, International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol 30, No 10, March 1987, pp.2171-2187.
- [18] [KRANE 1996] M.J.M.Krane and F.P Incropera,int, J.Heat ans Mas Transfer, Vol 40, No 16, 1996, pp3827-3835
- [19] [KRANE 1996] M.J.M.Krane and F.P Incropera,int, J.Heat ans Mas Transfer, Vol 40, No 16, 1996, pp3837-3847
- [20] [VREEMANN 1999] C.J.Vreeman, M.J.M.Krane, F.P. Incropera, International Journal of Heat and Mass Transfer, 43, May 1999, pp. 677-686.
- [21] [NI 1993] J.Ni and C.Beckermann, J. Materials Processing and Manufacturing Science, Vol. 2, pp. 217-231, 1993
- [22] [ROWE 1965] P.N.Rowe, K.T.Claxton, Trans. instn. Chem. Engrs, Vol 43, 1965, pp T321-T331
- [23] [NI 1991] J.Ni, C.Beckermann, Metallurgical Transactions B, Vol. 22B, June 1991, pp. 349-361.
- [24] [BECKERMANN 1996] C.Beckermann, J.Ni, Heat and Mass Transfer, Vol. 3, 1996, pp. 315-324.
- [25] [WANG 1996] G.Y.Wang, C.Beckermann, Metallurgical and Materials transactions A, Vol. 27A, September 1996, pp. 2765-2782.
- [26] [LUDWIG 2002] A.Ludwig, M.Wu, Metallurgical and Materials Transactions A, Vol 33A, December 2002, pp 3673-3683
- [27] [RAPPAZ 1989] M.Rappaz, Modeling of microstructure formation in solidification processes, Int.Mater. Rev. 34,1889, pp 93-123
- [28] [KRANE 2004] M.J.M.Krane, App.Math.Modelling, Vol 28, 2004, pp 95-107
- [29] [APPOLAIRE 1999] B.Appolaire, Prise en compte du mouvement des critaux équiaxes dans la modélisation de la solidification des lingots d'acier coulée en fonderie, Thèse de doctorat de l'INPL,1999
- [30] [ANANTH 1991] R.Ananth et W.N.Gill, J.Cryst. Growth, Vol 108, 1991, pp 173
- [31] [HAZOTTE 1999] A.Hazotte, Outils Mathématiques pour la Microscopie Quantitative, Stage CNAM-CACEMI EA 10 Analyse d'Images et Microscopie Quantitative, Septembre 1999
- [32] [ILEGBUSI 1998] O.J.Ilegbusi and M.D.Mat, Materials Science and Engineering A, Vol 247, 1998, pp.135-141.

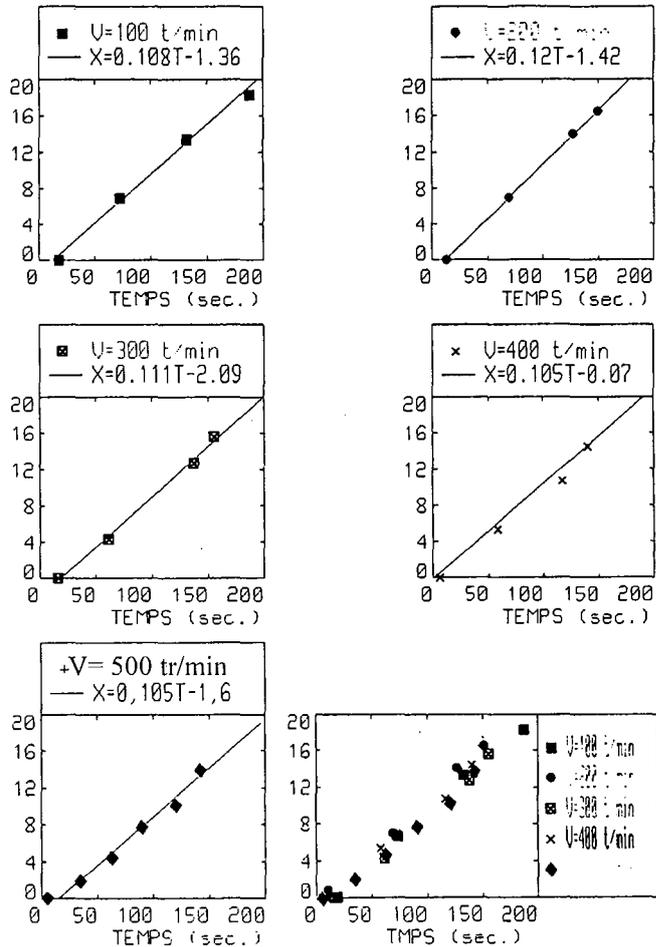
- [33] [Chong 1971] J.S Chong, E.B.Christiansen and A.D.Bear, Rheology of concentrated dispersions. *J.Mecan. Theor. Appl. Polymer Sci.* 15, pp 2007-2021
- [34] [KIM 1997] Jaehee Kim and Seog Yeon Cho, *Atmosph Environ*, Vol 31, Iss 15, August 1997, pp 2215-2224
- [35] [SPORTISSE 2000] Bruno Sportisse, Guy Bencteux and Pierre Plion, *Envir Modell & Softw*, Vol 15, Iss 6-7, September 2000, pp 673-679
- [36] [THEVOZ 1989] Ph.Thevoz, J.L.Desbiolles, M.Rappaz, *Metall. Trans. A*, Vol 20 A, 1989, pp 311-322
- [37] [GANDIN 1996] Ch. Gandin and M.Rappaz, *Acta Mater* Vol 45, N^o 5, 1997, pp 2187-2195
- [38] [PATANKAR 1980] S.V.PATANKAR, *Numerical Heat Mass Transfer and Fluid*, Hemisphere Pub, Washington, 1980
- [39] [SWAMINATHAN 1992] C.R.Swaminathan, V.R.Voller, A general enthalpy method of modelling solidification process, *Metal.Trans B*, Vol 23B Octobre 1992, pp 651
- [40] [DEHOFF 1968] R.T.Dehoff , F.N.Rhines, *Quantitative Microscopy* Edition, McGraw Hill Book Company, 1968
- [41] [FREDRIKSSON 1972] H.Fredriksson and M.Hillert, *Metallurgical Transactions*, Vol 3, February 1972, pp 565-570
- [42] [FLEMINGS 1974] M.C.Flemings, *Solidification processing*, Materials science and Engineering Series Mac Graw-Hill 1974
- [43] [MURAKAMI 1984] K.Murakami and T.Okamoto, *Metal Science* Vol. 18, February 1984, pp 103-111
- [44] [GAYE 1986] H.Gaye, M.Wanin(IRSID), P.Gugliemina(SOLMER), P.Schittly(SOLLAC), *Revue de Métallurgie CIT*, November 1986, pp 793-806
- [45] [KURZ 1986] W.Kurz, D.J.Fischer, *Fundamentals of solidification*, Trans Tech Publications, 1986.
- [46] [RUBINSTEIN 1989] E.R.Rubinstein, PhD thesis, Rensselaer Polytechnic, Institute, Troy, N.Y.1989
- [47] [LESOULT 1989] G.Lesoult, *Solidification : Macrostructures et qualité des produits*, Techniques de l'Ingénieur, M 59 et 60, tome M1 1989
- [48] [STEFANESCU 1990] D.M.Stefanescu, G.Upadhyya and D.Bandyopadhyay, *Metall.Trans.A*, Vol 21A, 1990, pp 997-1005
- [49] [PRESCOT 1991] P.J Prescott and F.P. Incropera, *Metallurgical Transactions B*,

- Vol 22B, August 1991, pp 529-540.
- [50] [SMITH 1991] D.M. Smith, J.A.Eady, L.M.Hogan and D.W.Irwin, Metal Trans A, 1991, Vol 22A, pp 575-584
- [51] [DURAND 1992] F.Durand, S.H.Davis, H.E.Huppert and U.Mueller Interactive Dynamics of Convection and Solid, , NATO ASI series E, Kluiver, Hingham, M.A,1992, Vol 29, pp 55-59
- [52] [ROCH 1992] These INPL,1992
- [53] [RAIHLE 1993] C.M.Raihle, Formation of while bands when using eletro-magnetic stirring in continious casting, PHD, the Royal Institut of Technology, StokhÖlm, August 1993.
- [54] [VANNIER 1993] I. Vannier, H. Combeau and G. Lesoult, Materials Science and Engineering A, Vol 173, Issues 1-2, 20 December 1993, pp.317-321.
- [55] [SHWARZ 1994] M.Shwarz, A.Karma, K.Eckler and D.M.Herlach, Physical Review Letters, Vol 73,September. 1994, pp.1380-1383
- [56] [SCHNEIDER 1995] M.C.Schneider and C.Beckermann, International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol 38, No 18, January 1995, pp.3455-3473.
- [57] [BECKERMANN 1996] C.Beckermann, G.Y.Wang, Metallurgical and Materials transactions A, Vol. 27A, September 1996, pp. 2784-2795.
- [58] [WANG 1996] G.Y.Wang, C.Beckermann, Metallurgical and Materials transactions A, Vol 27A, September 1996, pp. 2758-2764.
- [59] [BECKERMANN 1997] C.Beckermann, JOM 1997,pp 13-17
- [60] [HELLAWELL 1997] A.Hellawell, S.Liu and S.Z.Lu, JOM 1997, pp 18-20
- [61] [GU 1997] J.P.Gu, C.Beckermann and A.F.Giamei, Metallurgical and Materials transactions A, Vol 28A, July 1997 pp.1533-1542.
- [62] [REDDY 1997] A.J.Reddy and C.Beckermann, Metallurgical transactions B, Vol.28B, June 1997, pp. 479-489.
- [63] [KARMA 1998] A.Karma, International Journal of Non-Equilibrium processing, 1998, Vol 11, pp 201-233
- [64] [MONTGOMERY 1998] W.C.Montgomery and F.P.Incropera, Experimental Heat transfer, 1998, Vol 11, pp 59-86
- [65] [STEFANESCU 1998] D.M.Stefanescu and H.Pang, Elsever Science Ltd, 1998, pp.230-240
- [66] [LI 1999] M.Li and G.Yang, Y.Zhou, Journal of Cristal Growth, 1999, pp 413-417
- [67] [COMBEAU 2000] H.Combeau, Récents Progrès dans la Compréhension et la

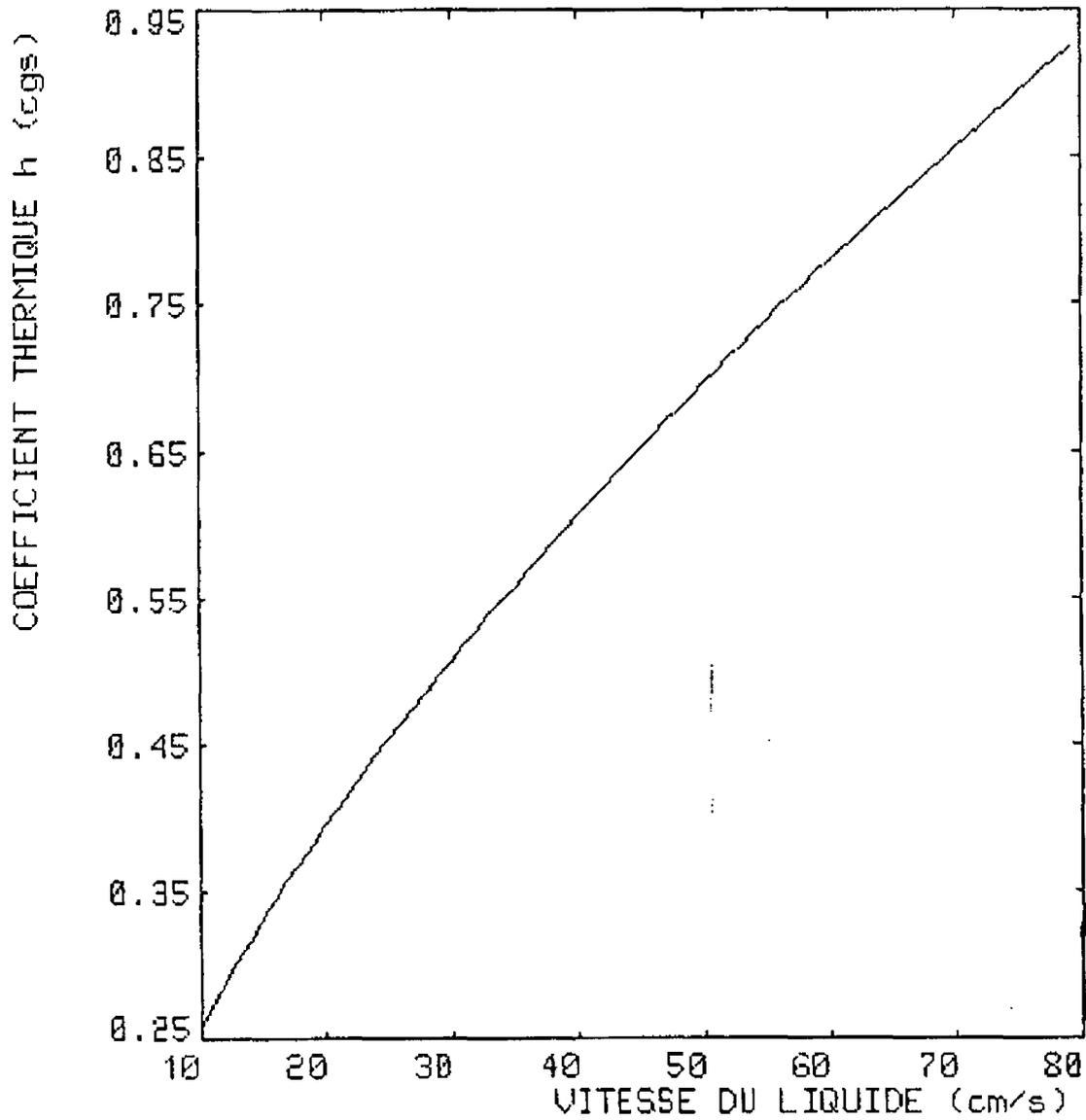
- Prédiction des Macro et mésoségrégations, Diplôme d'Habilitation à Diriger la Recherche, INPL, 2000
- [68] [GERARDIN 2000] S.Gerardin, H.Combeau et G.Lesoult, Société française de Génie des Procédés, Nancy 2000, Vol 14, N° 73, P 71-75.
- [69] [PATANKAR 2001] N.A.Patankar and D.D Joseph, International Journal of Multiphase Flow, Vol 27, 2001, pp.1659-1684
- [70] [BECKERMANN 2002] C.Beckermann, International Materials Reviews, Vol 45, No 5, 2002, pp. 243-261.
- [71] [LIU 2002] Shan Liu, shu-Zu lu and Angus Hellawell, Journal of Crystal Growth 234, 2002, pp. 740-750.
- [72] [RERKO 2003] R.S.Rerko, H.C. de Groh, and C.Beckermann, Materials Science and Engineering A347, 2003, pp 186-197.
- [73] [ESTON 2003] M.Eston, D.St John, The origin of equiaxed crystals in grain refined aluminium alloys, acceptée pour publication dans Aluminium Transactions.
- [74] [WU 2003] M.Wu, A.Ludwig, A.Bührig-Polaczek, M.Fehlbier, P.R.Sahn, International Journal of Heat and Mass Transfer, 46, January 2003, pp. 2819-2832.
- [DOUR 2004] Gilles Dour, Alliages, Procédés, Propriétés d'usage, Défauts, Dunod 2004
- [75] [RAPPAZ 1987] M. Rappaz and Ph. Thévoz, Acta Metal, Vol35, Iss7, July 1987, Pages 1487-1497
- [76] [NI 1995] J.Ni and P.Incropera, Int.J.Heat and Mass Transfer, Vol 38, 1995, pp 1271-1284
- [77] [CAUSSOT 1999] Ph.Causot et Ch.Ance, Rheophysique des Pates et des Suspensions, 1999

ANNEXES

Courbes d'évolution de l'épaisseur, X en fonction du temps, mesuré expérimentalement pour différentes vitesses de brassage ω



Evolution du coefficient de transfert thermique K_{conv} , à l'interface solide/liquide en fonction de la vitesse du liquide



L'unité du coefficient thermique est donnée en cgs qui correspond à 10^3 W/m²/s.

EQUATIONS DE TRANSFERT MACROSCOPIQUE :

Dans cette annexe nous présentons les équations de transferts macroscopiques obtenues suite à la transposition du modèle diphasique de Beckermann à l'expérience de solidification en brassage mécanique mis en place par Moukassi. Ces équations de transfert sont les suivantes :

1. Bilan de conservation de la masse dans la phase solide :

Le bilan de masse dans la phase solide avec la prise en compte de l'injection de fragments dans le bain liquide s'écrit comme suit :

$$\frac{\partial(g^s \rho^s)}{\partial t} + \text{div}(g^s \rho^s \cdot \langle \vec{V}^s \rangle^s) = \Gamma_s + \dot{n} \rho^s V_s^0 \quad \text{III.2}$$

Le terme $\dot{n} \rho^s V_s^0$ correspond à la masse de grains injectée à chaque instant dans le puits liquide.

L'intégration de l'équation III.2 sur un volume de contrôle s'écrit comme suit :

$$\int_{V(t)} \left(\frac{\partial(g^s \rho^s)}{\partial t} + \text{div}(g^s \rho^s \cdot \langle \vec{V}^s \rangle^s) \right) dV = \int_{V(t)} \dot{n} \rho^s V_s^0 dV$$

Sachant que :

$$\frac{d(\bar{g}^s \rho^s V)}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{V(t)} g^s \rho^s dV = \int_{V(t)} \frac{\partial(g^s \rho^s)}{\partial t} dV + \int_{s(t)} (g^s \rho^s)^* \vec{U}^* \cdot \vec{n}_{s/l} ds$$

$$d^3 \text{ où : } \int_{V(t)} \frac{\partial(g^s \rho^s)}{\partial t} dV = \frac{d(\bar{g}^s \rho^s V)}{dt} - \int_{s(t)} (g^s \rho^s)^* \vec{U}^* \cdot \vec{n}_{s/l} ds \quad \text{III.2.1}$$

avec : \vec{U}^* : vitesse de l'interface zone colonnaire/liquide.

alors :

$$\int_{V(t)} \frac{\partial(g^s \rho^s)}{\partial t} dV = \frac{d(\bar{g}^s \rho^s V)}{dt} - (g^s \rho^s)^* \frac{dV}{dt} \quad \text{III.2.2}$$

Comme hypothèse, nous considérons que : $g^{s*} = g^s$ (brassage parfait).

$$\text{On obtient : } \int_{V(t)} \frac{\partial(g^s \rho^s)}{\partial t} dV = V \frac{d(\bar{g}^s \rho^s)}{dt}$$

Nous supposons que $\langle \vec{V}^s \rangle^s$ est nul à l'interface puits liquide/zone colonnaire, donc :

$$\text{div}(g^s \rho^s \cdot \langle \vec{V}^s \rangle^s) = 0$$

Enfin, le bilan de masse sur la phase solide s'écrit comme suit :

$$V \frac{d(\bar{g}^s \rho^s)}{dt} = \int_{V(t)} (\Gamma_s + \dot{n} \rho^s V_s^0) dV = \Gamma_s V + \dot{n} \rho^s V_s^0 V \quad \text{III.2.3}$$

La création de grains n'a lieu que sur l'interface puits liquide/zone colonnaire, donc :

$$\int_{V(t)} \dot{n} dV = \int_{S(t)} \dot{n}_s dS = \dot{n}_s S \quad \text{III.2.4}$$

d'où :

$$V \frac{d(\bar{g}^s \rho^s)}{dt} = \Gamma_s V + \dot{n}_s \rho^s V_s^0 S \quad \text{III.2.5}$$

2. Bilan de conservation de la masse a l'interface puits liquide/zone colonnaire :

$$\bar{\Gamma}_s + \bar{\Gamma}_l = 0 \quad \text{III.3}$$

$$\text{avec : } \bar{\Gamma}_s = S_v \rho^s (\bar{V}^s - \bar{U}^*) \cdot \bar{n}^{l/s}$$

3. Bilan de conservation de la masse dans la phase liquide :

Le bilan de masse dans la phase liquide avec la prise en compte de l'injection de fragments dans le bain liquide s'écrit comme suit :

$$V \frac{d(g^l \rho^l)}{dt} = \bar{\Gamma}_l V - \dot{n}_s \rho^s V_s^0 S \quad \text{III.4}$$

le terme $-\dot{n}_s \rho^s V_s^0 S$ correspond à la masse de soluté dans phase solide qui est échangée (perdue) par unité de temps, par l'injection.

La combinaison de l'équation III.3 et de l'équation III.4 il vient :

$$V \frac{d(\bar{g}^l \rho^l)}{dt} = -\bar{\Gamma}_s V - \dot{n}_s \rho^s V_s^0 S \quad \text{III.4.1}$$

4. Bilan de conservation de la masse sur le constituant i dans la phase liquide :

Le bilan de conservation de la masse sur le constituant i dans la phase liquide avec la prise en compte de l'injection de fragments dans le bain liquide s'écrit comme suit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial(g^l \rho^l w_i^l)}{\partial t} + \text{div}(g^l \rho^l w_i^l \langle \bar{V}^l \rangle^l) = \\ \text{div}(D_i^{l*} g^l \rho^l \bar{\nabla}(w_i^l)) + w_i^{l*} \Gamma_l + \frac{S_v \rho^l D_i^l}{\delta_i^l} (w_i^{l*} - w_i^l) - \bar{w}_i^l \dot{n} \rho^s V_s^0 \end{aligned} \quad \text{III.5}$$

En négligeant les termes de diffusion macroscopique devant les autres termes, cette équation s'écrit comme suit :

$$\frac{\partial(g^l \rho^l w_i^l)}{\partial t} + \text{div}(g^l \rho^l w_i^l \langle \bar{V}^l \rangle^l) = w_i^{l*} \Gamma_l + \frac{S_v \rho^l D_i^l}{\delta_i^l} (w_i^{l*} - w_i^l) - \bar{w}_i^l \dot{n} \rho^s V_s^0 \quad \text{III.5.1}$$

le terme $(-\bar{w}' \dot{n} V_s^0 \rho^s)$ correspond à la masse de soluté dans phase liquide échangée par unité de temps, suite à l'injection de fragments.

L'intégration de cette équation sur le volume global donne :

$$\int_{V(t)} \frac{\partial(g' \rho' w'_i)}{\partial t} dV + \int_{V(t)} \text{div}(g' \rho' w'_i \langle \vec{V}' \rangle^l) dV = \int_{V(t)} (w_i^{*'} \Gamma_i + \frac{S_v \rho' D'_i}{\delta'_i} (w_i^{*'} - w'_i)) dV - \int_V \bar{w}'_i \dot{n} \rho^s V_s^0 dV$$

suite à l'application de la même approche mathématique utilisée précédemment, le bilan de conservation de la masse dans la phase liquide s'écrit comme suit :

$$\rho^l V \frac{d(\bar{g}' \bar{w}'_i)}{dt} = -\bar{w}_i^{*'} \bar{\Gamma}_s \cdot V + \frac{S_v \rho' D'_i}{\delta'_i} (\bar{w}_i^{*'} - \bar{w}'_i) \cdot V - \bar{w}'_i \dot{n}_s S \rho^s V_s^0 \quad \text{III.5.2}$$

5. Bilan de conservation de la masse sur le constituant i dans la phase solide :

Le bilan de conservation de la masse sur le constituant i dans la phase solide liquide avec la prise en compte de l'injection de fragments dans le bain liquide s'écrit comme suit :

$$\frac{\partial(g^s \rho^s w_i^s)}{\partial t} + \text{div}(g^s \rho^s w_i^s \langle \vec{V}^s \rangle^s) = \text{div}(D_i^{*s} g^s \rho^s \vec{\nabla}(w_i^s)) + w_i^{*s} \Gamma_s + \frac{S_v \rho^s D_i^s}{\delta_i^s} (w_i^{*s} - w_i^s) + w_i^{s-inj} \dot{n} \rho^s V_s^0 \quad \text{III.6}$$

En négligeant les termes de diffusion macroscopique devant les autres termes, cette équation s'écrit comme suit :

$$\frac{\partial(g^s \rho^s w_i^s)}{\partial t} + \text{div}(g^s \rho^s w_i^s \langle \vec{V}^s \rangle^s) = w_i^{*s} \Gamma_s + \frac{S_v \rho^s D_i^s}{\delta_i^s} (w_i^{*s} - w_i^s) + w_i^{s-inj} \dot{n} \rho^s V_s^0 \quad \text{III.6.1}$$

le terme $w_i^{s-inj} \dot{n} \rho^s V_s^0$ correspond à la masse de soluté dans phase solide qui est apportée par unité de temps, par l'injection.

le bilan conservation de la masse sur le constituant dans la phase solide s'écrit comme suit :

$$\rho^s V \frac{d(\bar{g}^s \bar{w}_i^s)}{dt} = \bar{w}_i^{*s} \bar{\Gamma}_s \cdot V + \frac{S_v \rho^s D_i^s}{\delta_i^s} (\bar{w}_i^{*s} - \bar{w}_i^s) \cdot V + w_i^{s-inj} \dot{n}_s S \rho^s V_s^0 \quad \text{III.6.2}$$

le terme $w_i^{s-inj} \dot{n} \rho^s V_s^0$ correspond à la masse de soluté dans phase solide qui est apportée par unité de temps, par l'injection.

6. Bilan de conservation de la masse sur le constituant i au interfaces :

Bilan de conservation de la masse sur le constituant aux interfaces liquide-solide est le suivant :

$$(\bar{w}_i^{l*} - \bar{w}_i^{s*})\bar{\Gamma}_s = \frac{S_v \rho^l D_i^l}{\delta_i^l} (\bar{w}_i^{l*} - \bar{w}_i^l) + \frac{S_v \rho^s D_i^s}{\delta_i^s} (\bar{w}_i^{s*} - \bar{w}_i^s) \quad \text{III.7}$$

Bilan de conservation d'énergie :

En tenant compte du transfert thermique par convection du liquide vers le front colonnaire et des échanges de la chaleur liquide-solide devant le front colonnaire qui est le résultat du flux de chaleur apporté par la fraction de solide qui entre dans le puits liquide et de celui qui est perdu à cause de la fraction liquide qui sort de ce dernier, le bilan d'énergie s'écrit comme suit :

$$\int_V \frac{\partial(\rho h)}{\partial t} dV = K_{conv} S(T_p - T) + \rho^s S \dot{n}_s V_s^0 (h^s - h^l) \quad \text{III.8}$$

Avec l'hypothèse suivante : $h^* = h$

L'équation III.8 s'écrit alors :

$$\rho V \frac{d\bar{h}}{dt} = K_{conv} S(T_p - \bar{T}) + \rho^s S \dot{n}_s V_s^0 (h^s - h^l) \quad \text{III.8.1}$$

avec :

$$\left\{ \begin{array}{l} h = c_p \bar{T} + (1 - g^s)L \\ \bar{\Gamma}_s + \bar{\Gamma}_l = 0 \\ h^l = c_p \bar{T} + L \\ V_s^0 = \frac{4}{3} \pi R_{fg}^0 \\ \bar{T} : \text{Température moyenne du puits liquide (zone équiaxe)} \end{array} \right.$$

Etapes suivies pour mettre en place le code de calcul utilisé pour modéliser les essais expérimentaux de Moukassi

Au temps $t=0$

A l'instant initial $t=0$, le bain liquide est monophasique, caractérisé par :

$$g^{j0} = 0, \quad t = 0s, \quad N_v^0 = 0, \quad T^0 = cste, R_{fg}^0, \dot{n}_s,$$

$$T^0 - T_L = \text{surchauffe} \quad R_g^0 = 0 \quad \mu m, \quad g^{s0} = 0, S_v^0 = 0, \Gamma_s^0 = 0, w_s^0 = 0$$

L'équilibre thermodynamique permet d'écrire (équations II.30 et II.31) :

$$w^{j0} = \frac{T_L - T_f}{m}$$

$$w^{j0*} = \frac{T^0 - T_f}{m}$$

$$w^{s0*} = w^{s0*}$$

au temps $t=t+\Delta t$, on obtient suite à l'injection, les grandeurs suivantes :

Calcul de la surface du front colonnaire et du volume global :

$$S = 2\pi H R_1$$

$$V = \pi H (R_{\text{ext}}^2 - R_1^2) + \pi (H_{\text{max}} - H) R_{\text{ext}}^2$$

avec : $R_1 = R_{\text{int}} + \text{épaisseur}$

R_1 : rayon du front colonnaire à un instant donné.

R_{int} : rayon du doigt refroidisseur égal à **20 mm**

R_{ext} : rayon du creuset égal à **62,5 mm**

H : hauteur du doigt refroidisseur égale à **310 mm**

H_{max} : hauteur du creuset égale à **310 mm**

Épaisseur : mesuré expérimentalement. Il suit une évolution linéaire (annexe A.I).

Calcul de la vitesse du fluide

$$V_f = \frac{1}{2} \left(\frac{2\pi R_1 \omega}{60} \right) \quad \text{avec } \omega = X \text{ tr/min} \quad \omega: \text{vitesse de rotation}$$

Rayon du grain après l'injection est donné par la relation suivante :

$$R_g = \left(\frac{R_{fg}^0 \frac{S}{V} \dot{n}_s \Delta t + (R_g^0)^3 N_v^0}{\left(\frac{S}{V} \dot{n}_s \nabla t + N_v^0 \right)} \right)^{1/3}$$

A.III.1

La densité volumique après injection :

$$N_v = N_v^0 + \frac{S}{V} \dot{n}_s \quad \text{A.III.2}$$

La fraction solide après injection :

$$g^s = \frac{4}{3} \pi R_g^3 N_v \quad \text{A.III.3}$$

La surface spécifique après injection :

$$S_v = 4\pi R_g^2 N_v \quad \text{A.III.4}$$

Titre massique dans la phase solide d'injection :

$$w^{s-inj} = K \frac{T_0 - T_f}{m_i} \quad \text{A.III.5}$$

titre massique dans la phase solide après injection :

$$w^s = \left(\frac{w^{s-inj} \dot{n}_s \frac{S}{V} \Delta t + w^{s0} N_v^0}{\dot{n}_s \frac{S}{V} \Delta t + N_v^0} \right) \quad \text{A.III.6}$$

Calcul de dh (équation III.8.1) avec la prise en compte de la fraction solide injectée :

$$\frac{dh}{dt} = \frac{1}{\rho V} \left[K_{conv} S (T_p - T) + \rho^s S \dot{n}_s V_s^0 (h^s - h^l) \right] \quad \text{A.III.7}$$

résolution de la cinétique :

$$\left. \begin{array}{l} 1. \quad (w^{l0*} - w^{s0*}) \Gamma_s = \frac{S_v \rho^l D^l}{\delta^l} (w^{l*} - w^l) + \frac{S_v \rho^s D^s}{R_g} (w^{s*} - w^s) \\ 2. \quad T = T_f + m.w^{l*} \\ 3. \quad dh = c_p dT - L.dg^s \\ 4. \quad \frac{dg^s}{dt} = \frac{\Gamma_s}{\rho^s} \\ 5. \quad w^{s*} = k.w^{l*} \end{array} \right) \quad \text{A.III.8}$$

La résolution de ce système d'équation permet de calculer les variable suivantes

$$\Gamma_s, T, g^s, w^{l*}, w^{s*} \text{ avec } g^l = 1 - g^s$$

calcul des titres massiques des phases liquide et solide :

$$w^l = \left[\frac{(g^l w^l)^0 + dt(-w^{l0*} \frac{\Gamma_s}{\rho^l} + (w^{l*} - w^l) \frac{S_v D^l}{R_g})}{g^l} \right] \quad \text{A.III.9}$$

$$w^s = \left[\frac{(g^s w^s)^0 + dt(w^{s0*} \frac{\Gamma_s}{\rho^s} + (w^{s*} - w^s) \frac{S_v D^s}{R_g})}{g^s} \right] \quad \text{A.III.10}$$

Calcul du rayon moyen des grains sphériques :

$$R_g = \left(\frac{3g^s}{4\pi N_v} \right)^{1/3} \quad \text{A.III.11}$$

ALGORITHME

Initialisation

$$g^{l0} = 0, \quad t = 0s, \quad N_v^0 = 0, \quad T^0, R_{fg}^0, \dot{n}_s, K_{conv}, S^0, V^0, V_f$$

$$T^0 - T_L = \text{surchauffe} \quad R_g^0 = 0 \quad \mu m, \quad g^{s0} = 0, S_v^0 = 0, \Gamma_s^0 = 0, w_s^0 = 0$$

$$w^{l0} = \frac{T_L - T_f}{m}, \quad w^{s0} = \frac{T^0 - T_f}{m}$$

$$t = t + \Delta t$$

$$S = 2\pi H R_1, \quad V = \pi H (R_{ext}^2 - R_1^2) + \pi (H_{max} - H) R_{ext}^2$$

$$R_g = \left(\frac{R_{fg}^0 \frac{S}{V} \dot{n}_s \Delta t + (R_g^0)^3 N_v^0}{\left(\frac{S}{V} \dot{n}_s \Delta t + N_v^0 \right)^{1/3}} \right)^{1/3}$$

$$N_v = N_v^0 + \frac{S}{V} \dot{n}_s \quad g^s = \frac{4}{3} \pi R_g^3 N_v, \quad S_v = 4\pi R_g^2 N_v$$

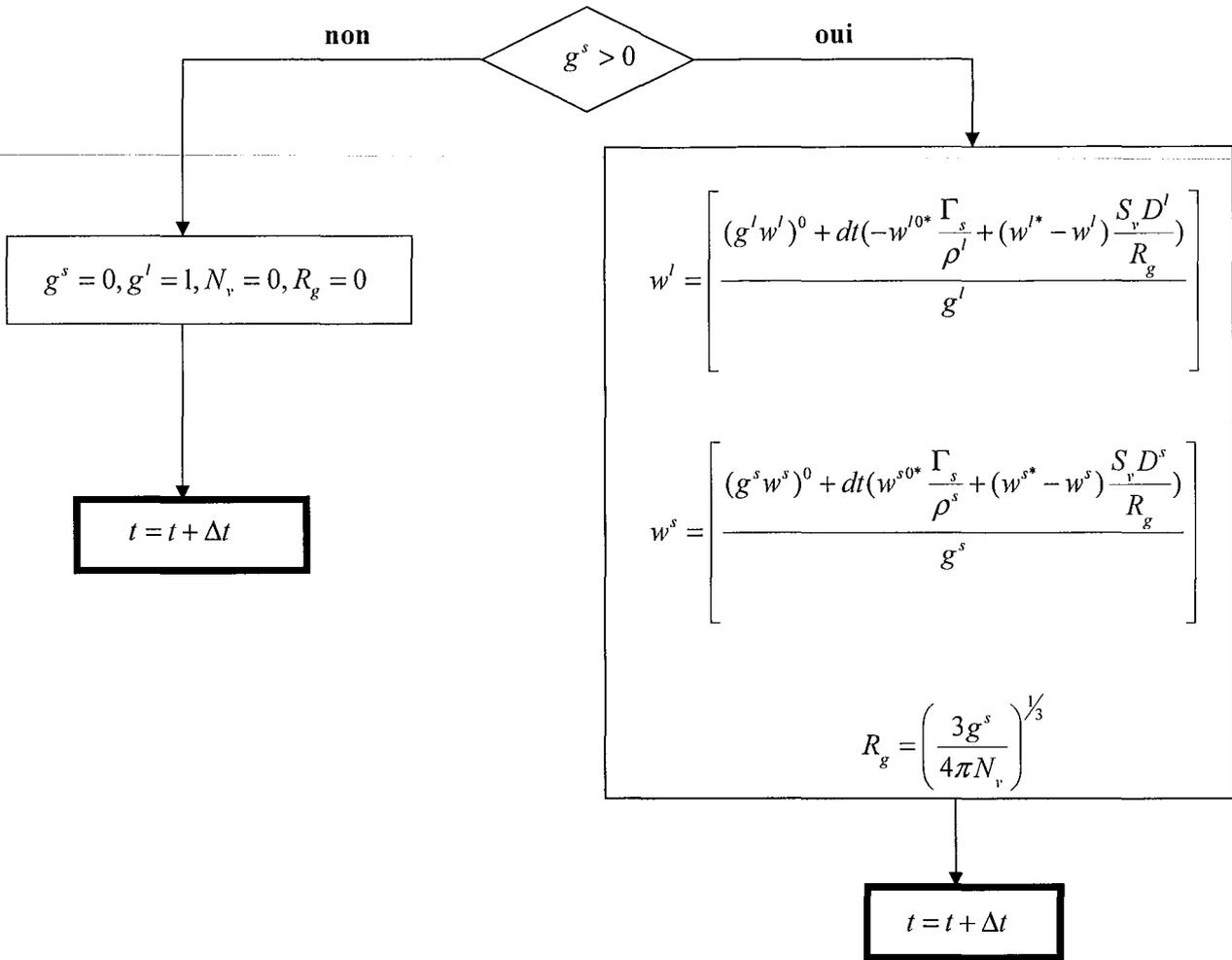
$$w^{s-inj} = K \frac{T_0 - T_f}{m_l}, \quad w^s = \left(\frac{w^{s-inj} \dot{n}_s \frac{S}{V} \Delta t + w^{s0} N_v^0}{\dot{n}_s \frac{S}{V} \Delta t + N_v^0} \right)$$

Calcul de dh

$$\frac{dh}{dt} = \frac{1}{\rho V} \left[K_{conv} S (T_p - T) + \rho^s S \dot{n}_s V_s^0 (h^s - h^l) \right]$$

calcul de la cinétique

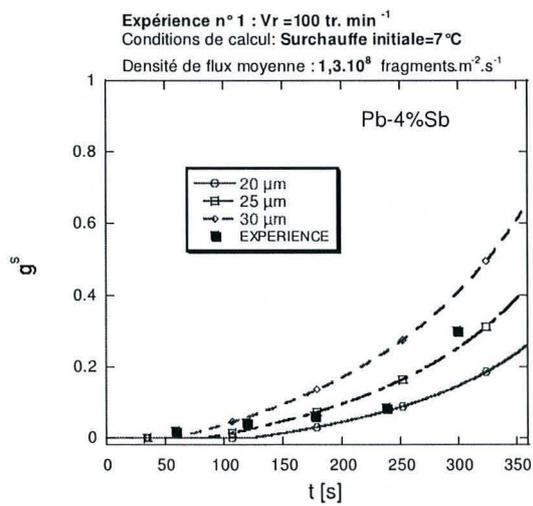
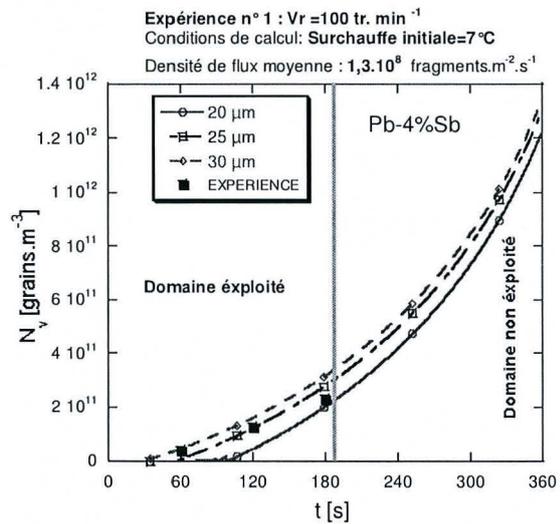
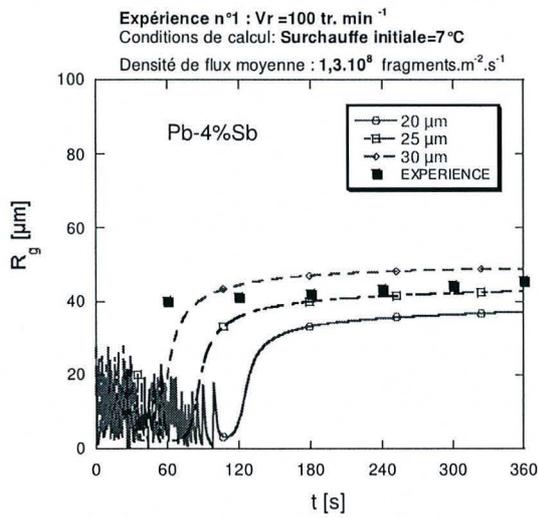
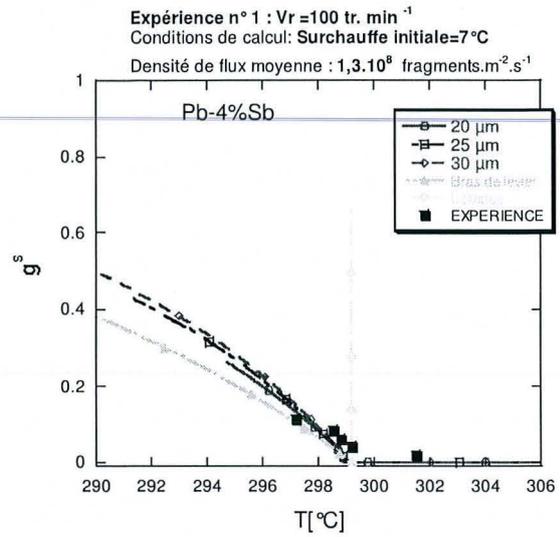
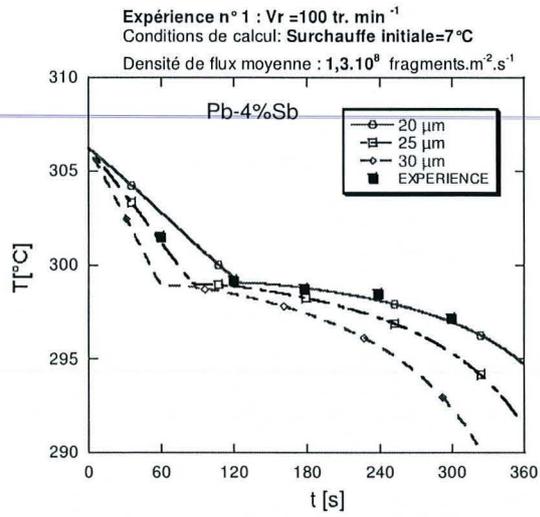
$$\Gamma_s, T, g^s, w^{l*}, w^{s*} \text{ avec } g^l = 1 - g^s$$

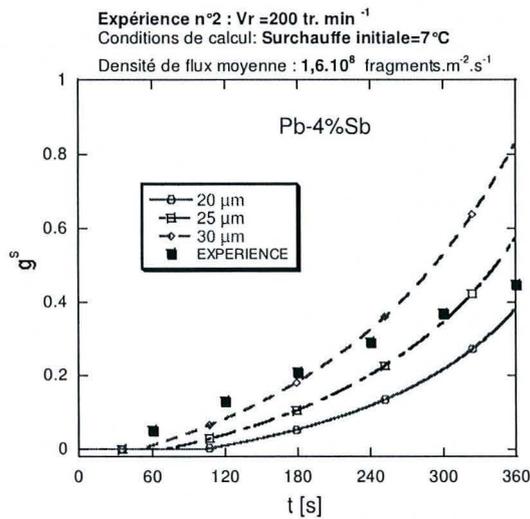
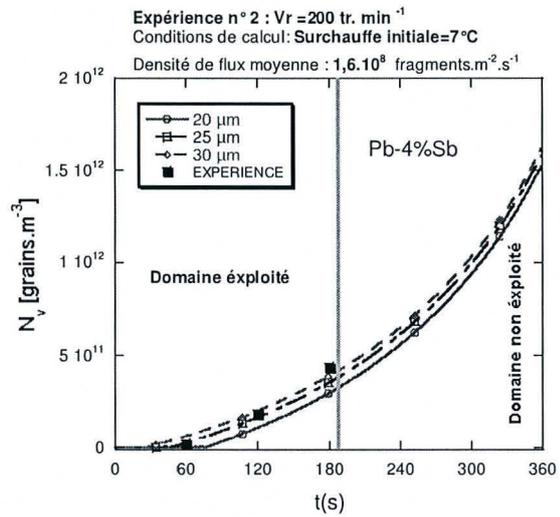
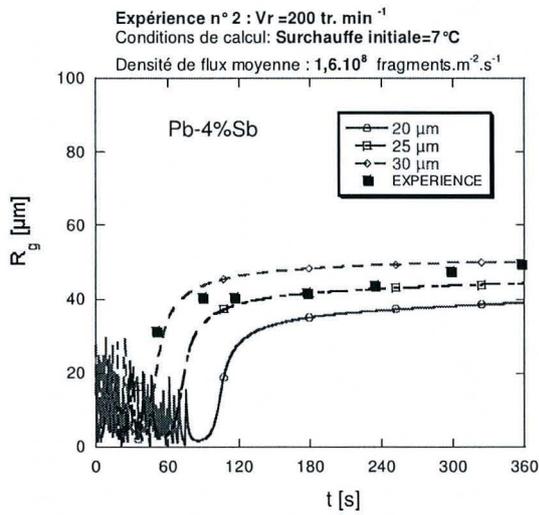
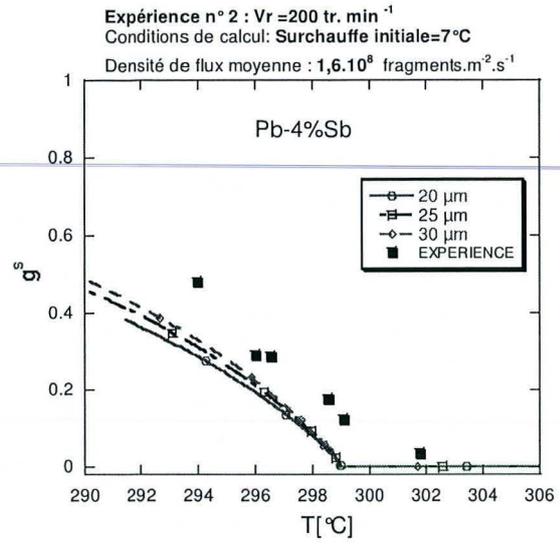
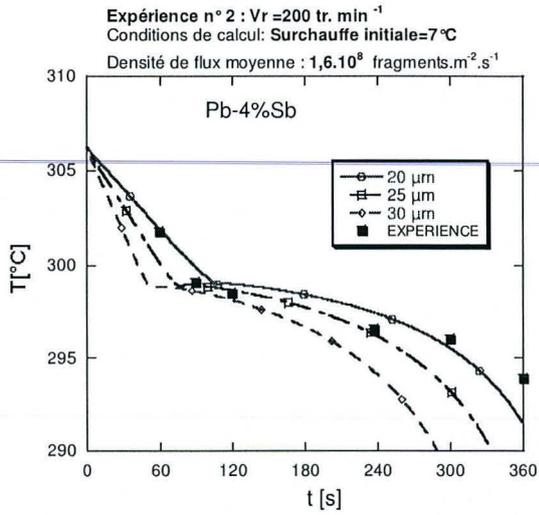


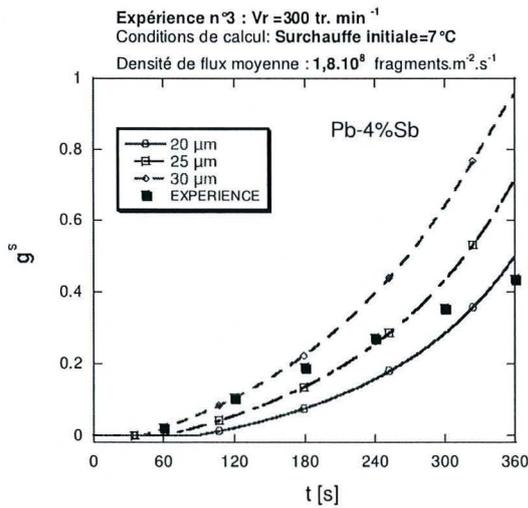
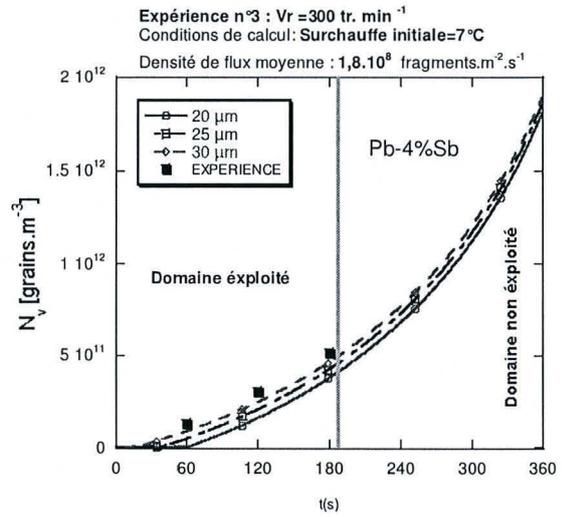
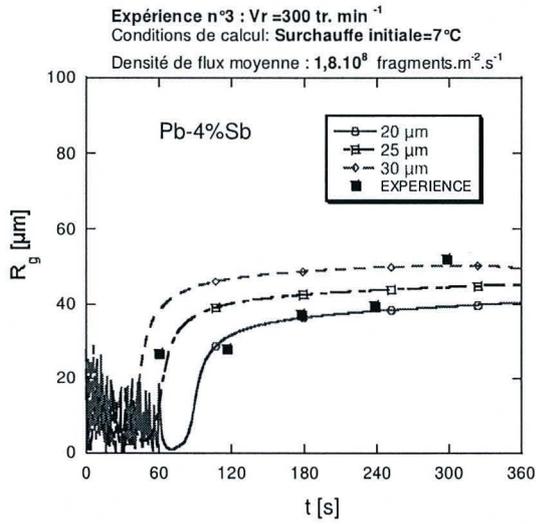
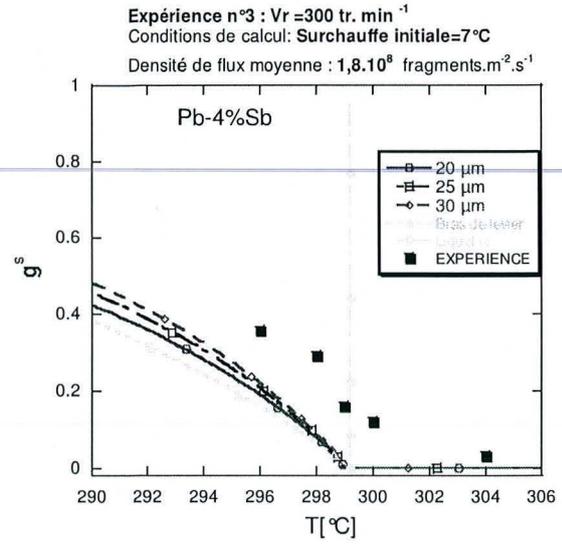
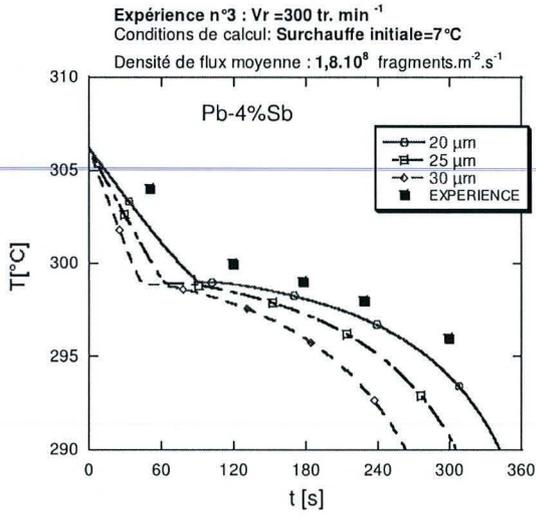
RESULTATS DES SUMILATIONS

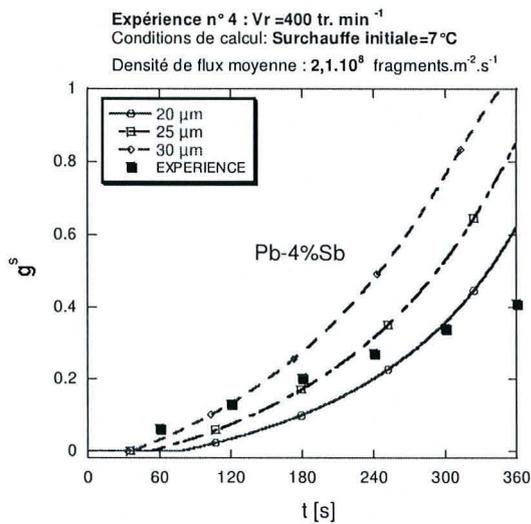
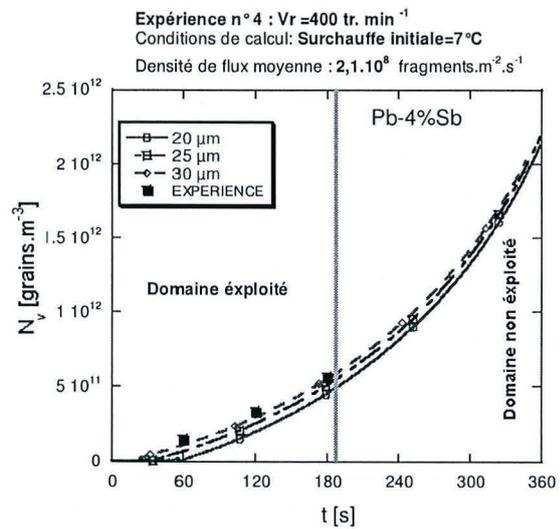
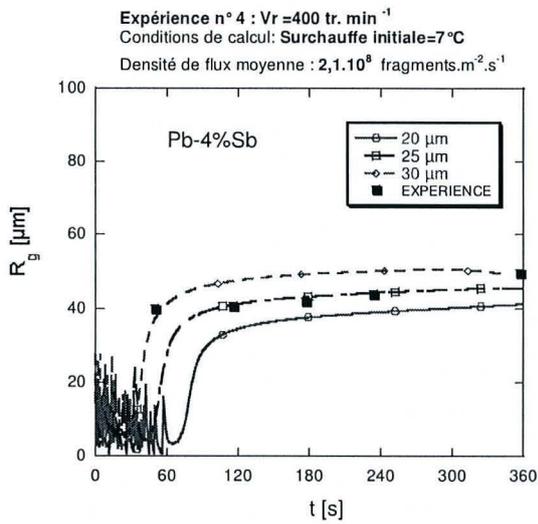
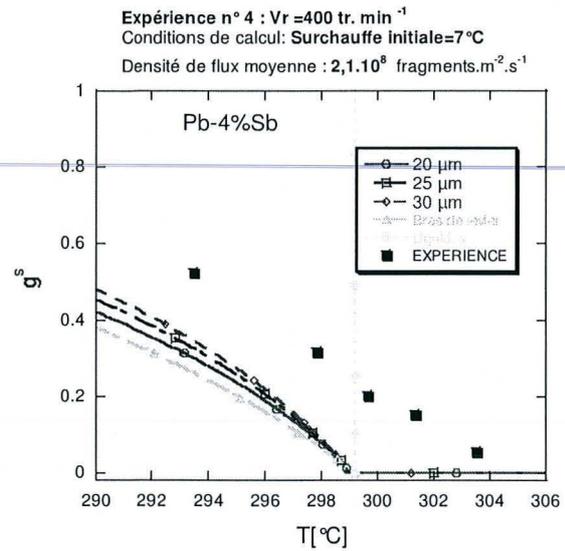
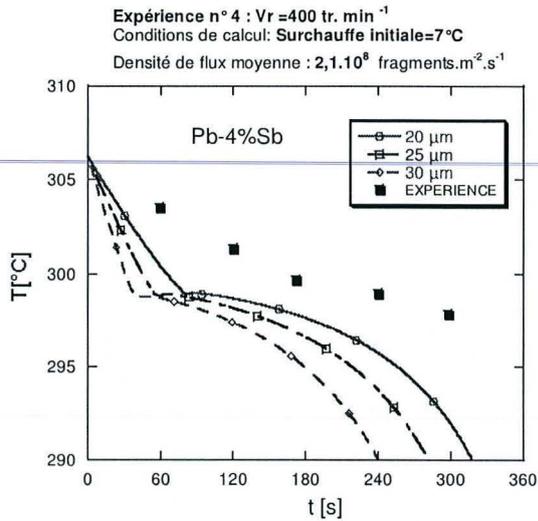
Les autres résultats de calcul obtenus sur les essais expérimentaux de Moukassi pour les deux nuances d'alliage Pb-Sb sont rapportés dans cette annexe :

Nuance Pb-4%Sb

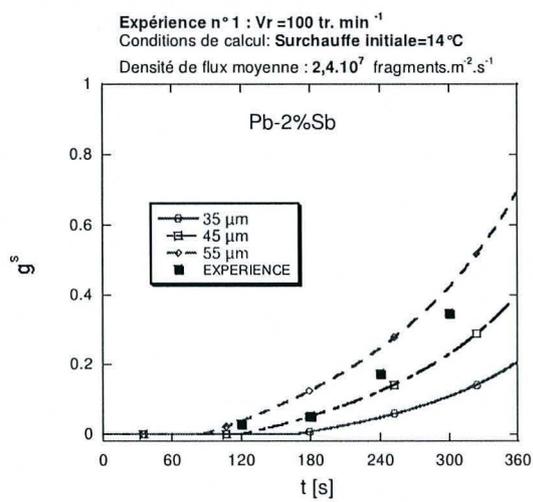
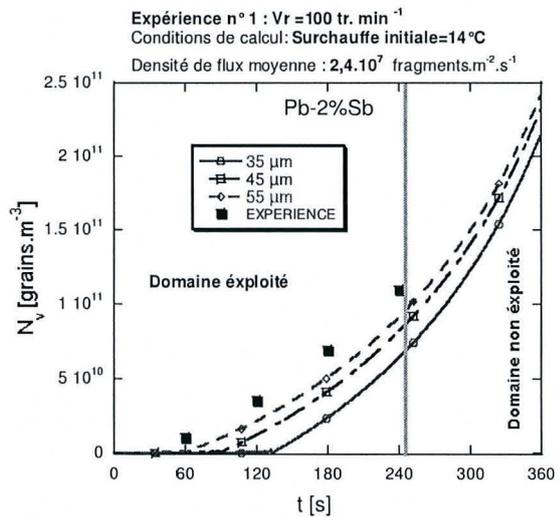
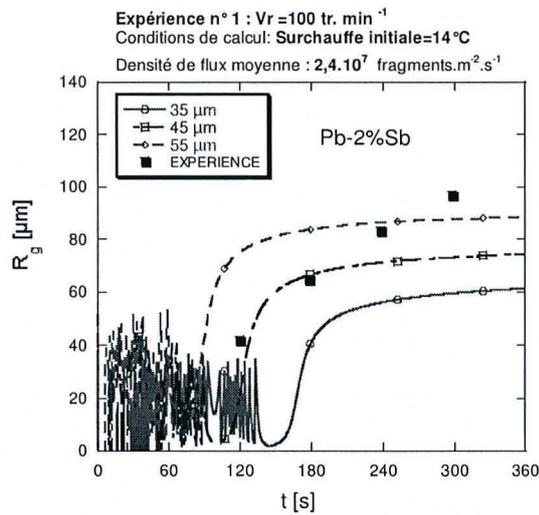
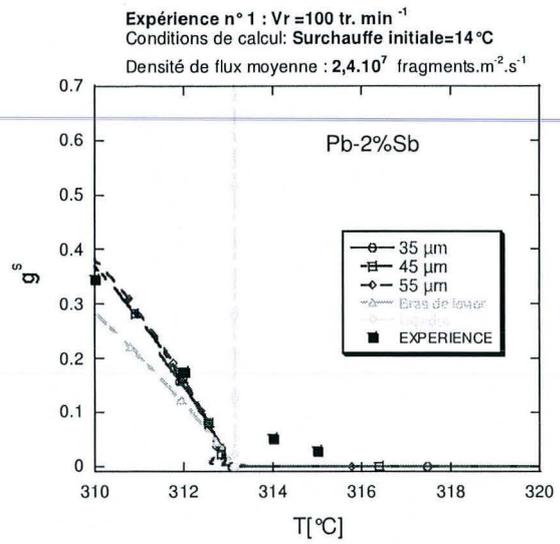
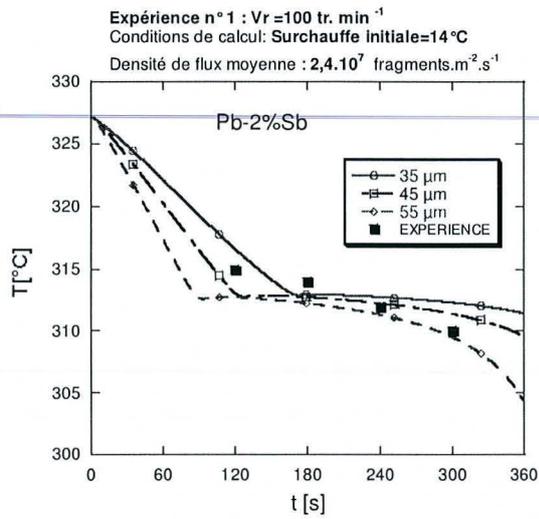


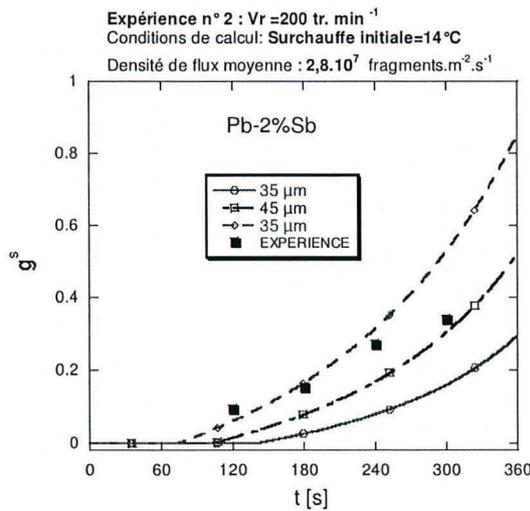
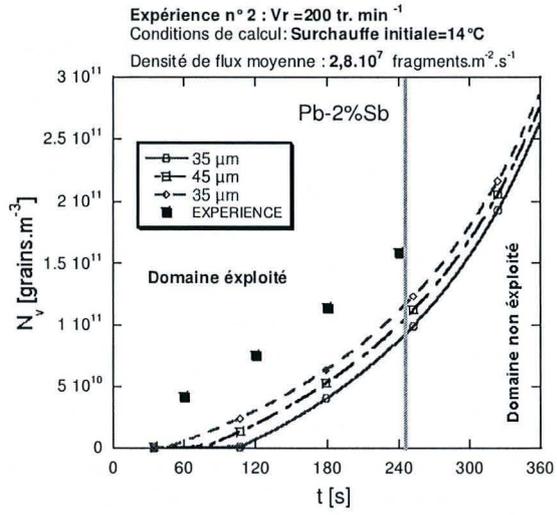
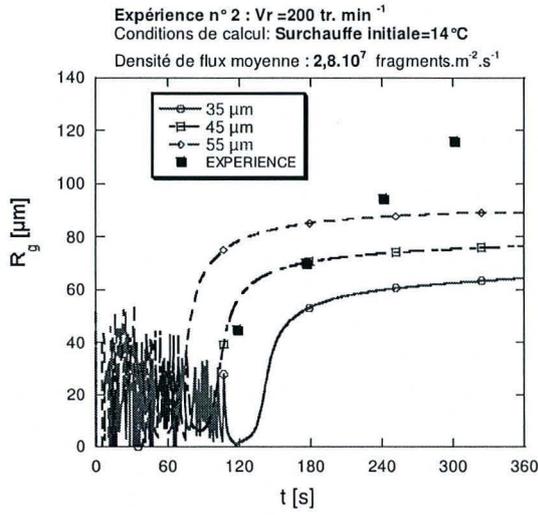
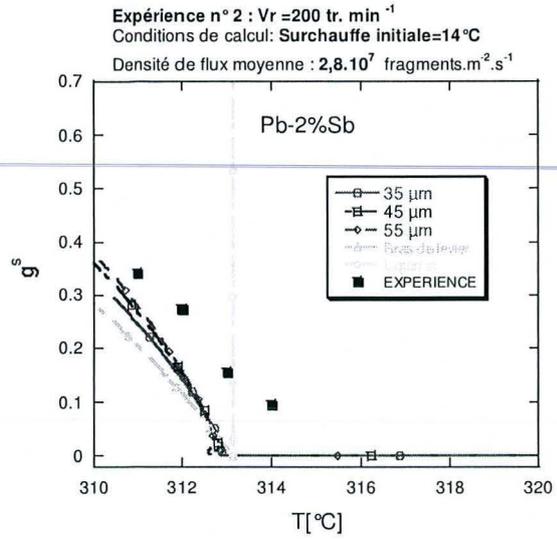
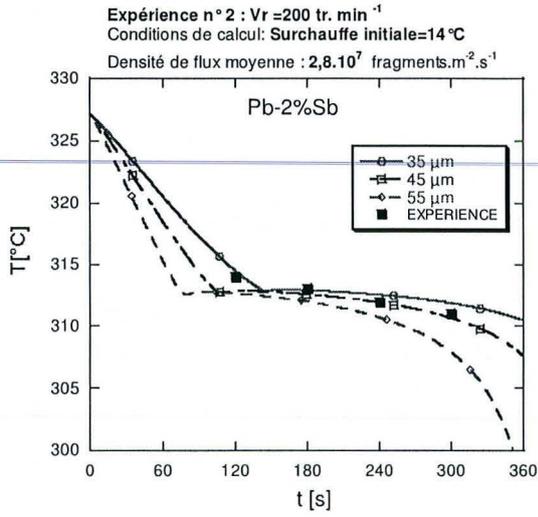


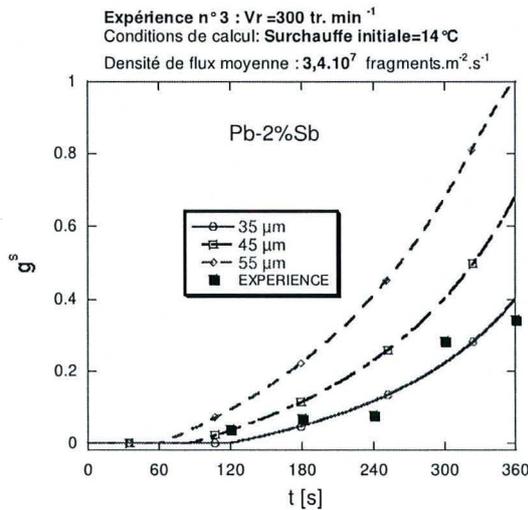
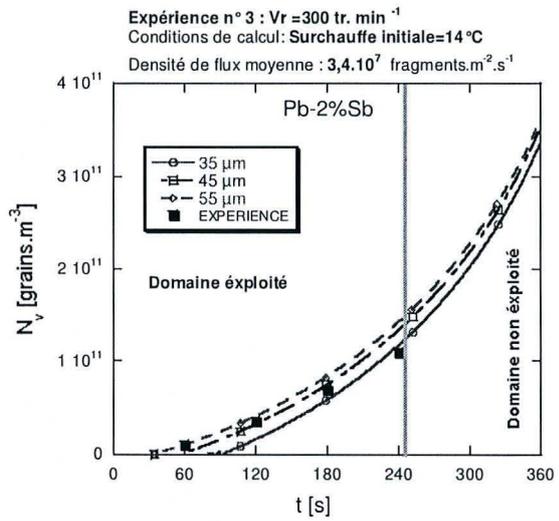
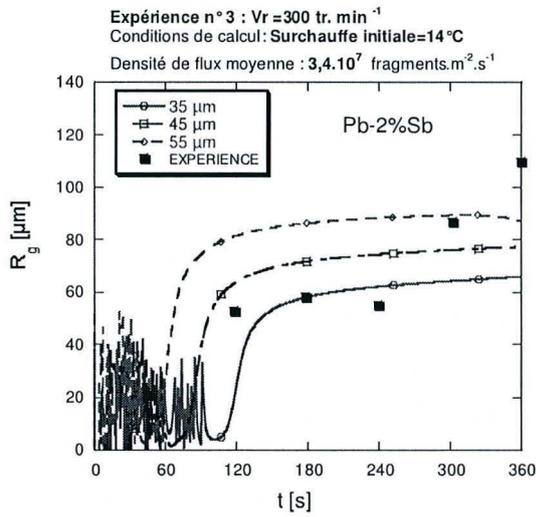
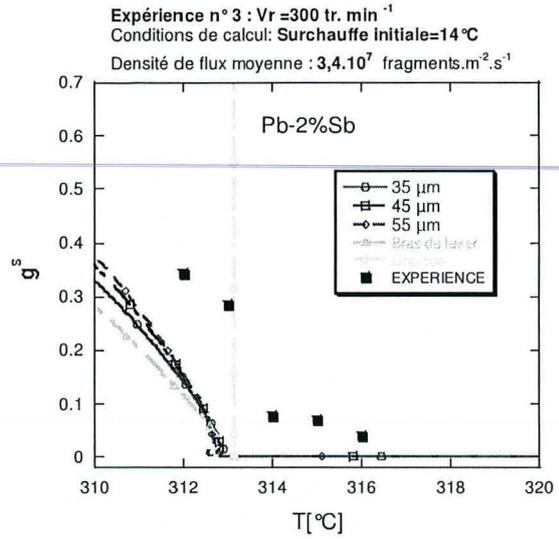
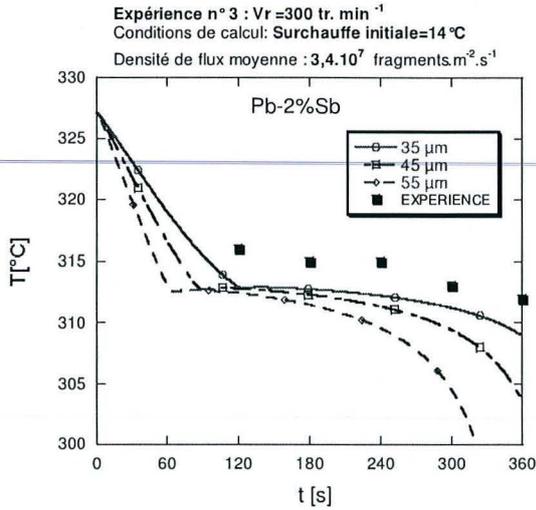




Nuance Pb-2%Sb







$$t = 0$$

calcul macroscopique

$$\frac{\partial(\bar{\rho}h)}{\partial t} + \bar{\rho}\vec{V}\nabla(h) = \nabla(\lambda_{eff}\bar{\nabla}(T)) - \bar{\rho}\vec{V}\nabla(h) - \bar{\rho}C_p\vec{V}\nabla(T) + \bar{\rho}L\nabla(\vec{V}^s) + \rho^s\dot{n}V_s^0(h^s - h^l)$$

Bilan de quantité de mouvement :

Si $\langle \vec{V}^l \rangle^l = \langle \vec{V}^s \rangle^s = \vec{V}$

$$\nabla(\bar{\rho}) = 0$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\vec{V})}{\partial t} + \nabla(\bar{\rho}\vec{V}.\vec{V}) = \nabla[\mu_{eff}\bar{\nabla}(\vec{V})] - \bar{\nabla}\hat{p} + (\bar{\rho} - \rho^{ref}).\vec{g}$$

Si $\langle \vec{V}^l \rangle^l \neq \langle \vec{V}^s \rangle^s \neq 0$

$$\nabla(\rho^s g^s \langle \vec{V}^s \rangle^s) = -\nabla(\rho^l g^l \langle \vec{V}^l \rangle^l)$$

$$\langle \vec{V}^s \rangle^s = \langle \vec{V}^l \rangle^l + \frac{4(2R_g)^2 g^l}{3 C_d \mu^l R_e} (-\nabla\hat{p} + (\rho^s - \rho^{ref})\vec{g})$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\vec{V}^l)}{\partial t} + \frac{1}{g^l} \nabla(\bar{\rho}\vec{V}^l.\vec{V}^l) = \nabla[\mu^l\bar{\nabla}(\vec{V}^l)] - \bar{\nabla}\hat{p} + (\bar{\rho} - \rho^{ref}).\vec{g}$$

Sinon : $\nabla(\bar{\rho}) = 0$

Si $\langle \vec{V}^s \rangle^s = \vec{0}$:

$$\frac{\partial(\rho^l\vec{V}^l)}{\partial t} + \frac{1}{g^l} \nabla(\rho^l\vec{V}^l.\vec{V}^l) = \nabla[\mu^l\bar{\nabla}(\vec{V}^l)] - \frac{g^l\mu^l}{K}\vec{V}^l - g^l\bar{\nabla}\hat{p} + g^l(\rho^l - \rho^{ref}).\vec{g}$$

Fsi

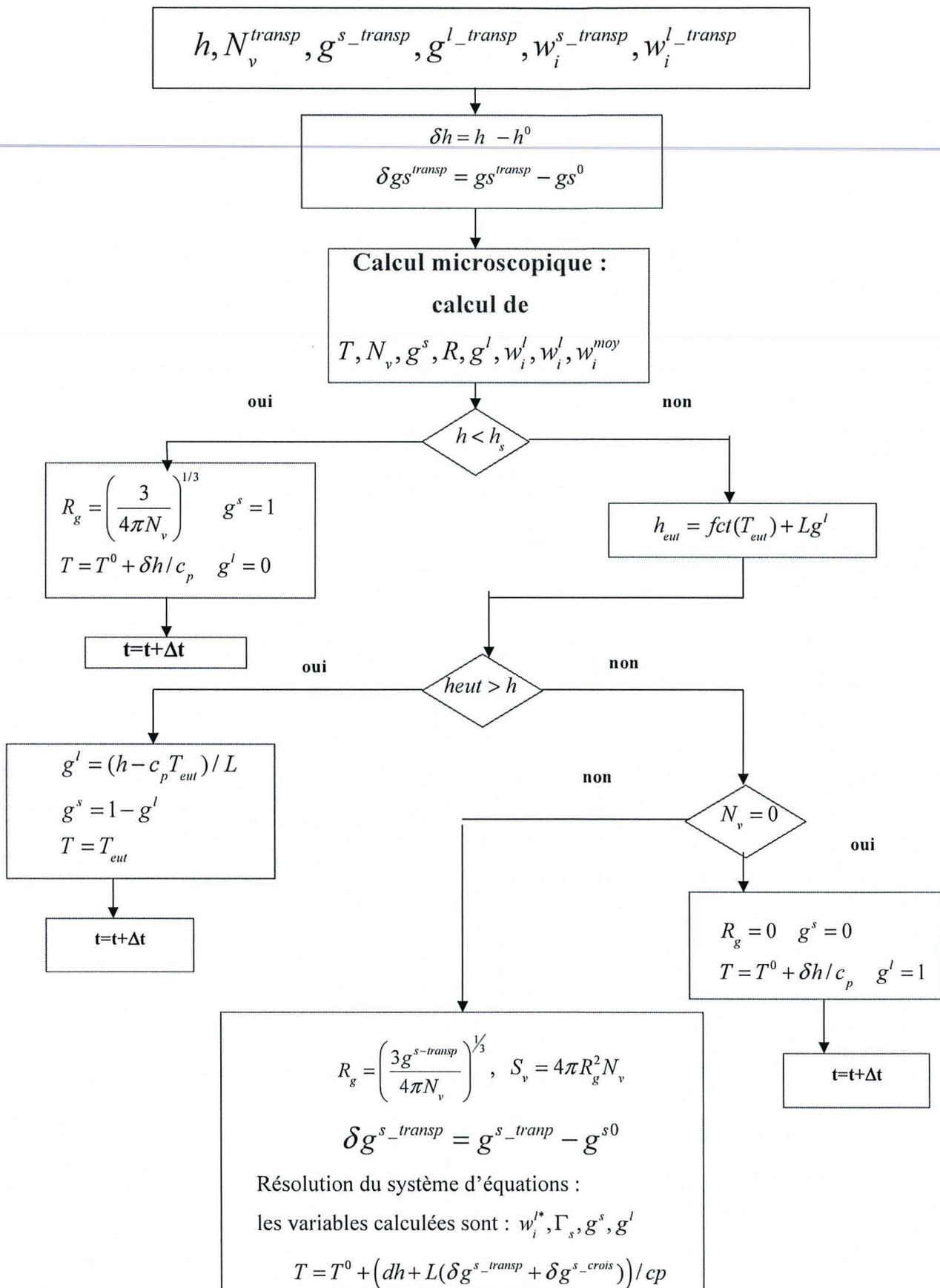
$$\frac{\partial N_v}{\partial t} + \nabla(N_v \langle \vec{V}^s \rangle^s) = \dot{n}$$

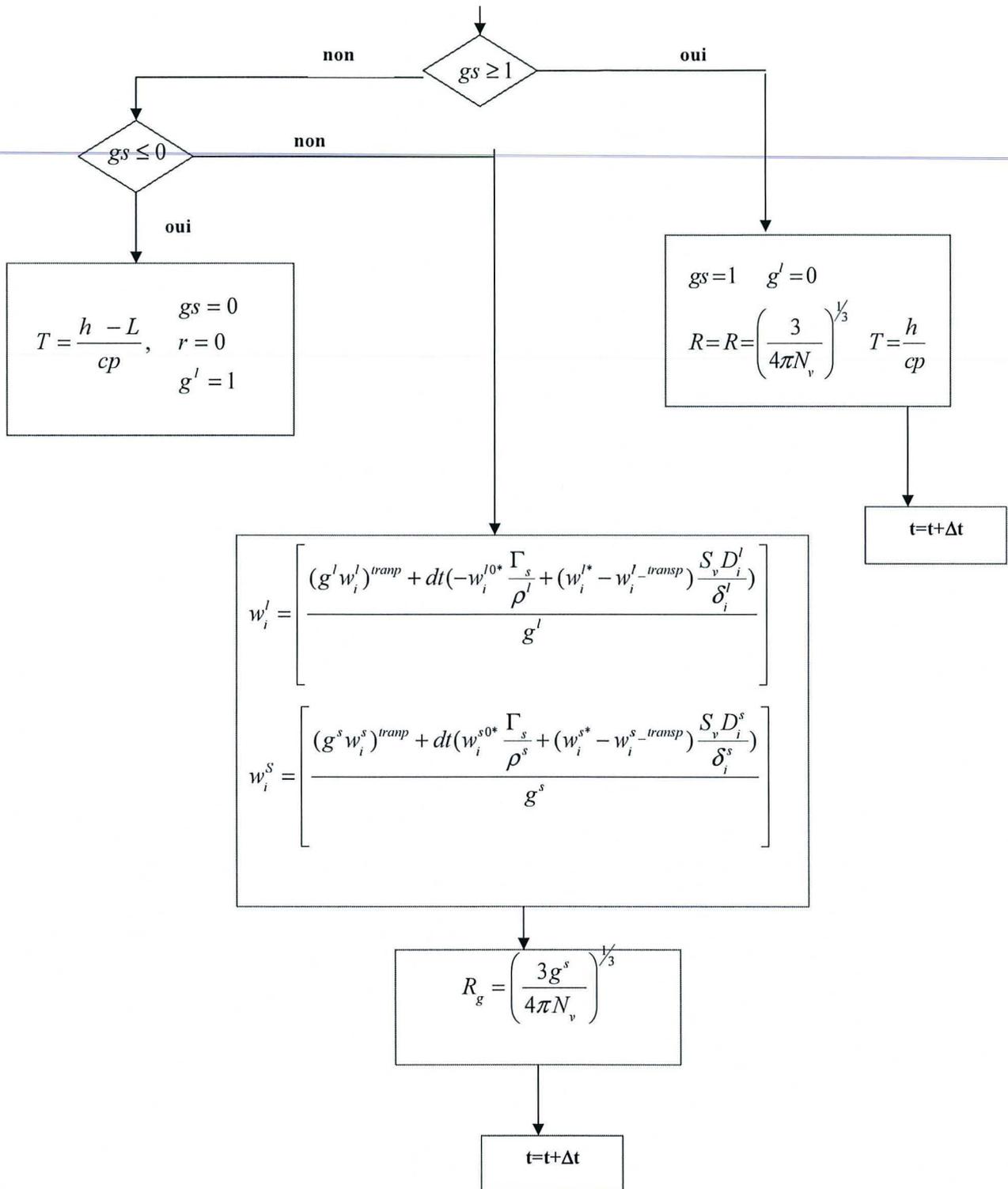
$$\frac{\partial \rho^s g^s}{\partial t} + \nabla(\rho^s g^s \langle \vec{V}^s \rangle^s) = \dot{n}_s \rho^s V_s^0 \quad g^l = 1 - g^s$$

$$\frac{\partial(\rho^l g^l w_i^l)}{\partial t} + \nabla(\rho^l g^l w_i^l \langle \vec{V}^l \rangle^l) = -w_i^l \dot{n} V_s^0 \rho^s \quad \bar{\rho}.w_i^{may} = \rho^l g^l w_i^l + \rho^s g^s w_i^s$$

$$\frac{\partial(\rho^s g^s w_i^s)}{\partial t} + \nabla(\rho^s g^s w_i^s \langle \vec{V}^s \rangle^s) = w_i^s \dot{n} V_s^0 \rho^s$$

$$\bar{\rho}.w_i^{may} = \rho^l f^l w_i^l + \rho^s f^s w_i^s$$





PROPRIETES THERMOPHYSIQUES DU REFRACTAIRE

- Masse volumique : 1300 kg.m⁻³
- Conductivité thermique : 0,7 W.m⁻¹.K⁻¹
- Capacité calorifique : 1050 J.kg⁻¹.K⁻¹

PROPRIETES THERMOPHYSIQUES DU REFRACTAIRE

Température [°C]	50	150	1050	1500
Conductivité thermique W.m ⁻¹ .K ⁻¹	66,97	62,78	23,02	23,02

Température [°C]	200	300	500
Capacité calorifique	551	555	605

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

o0o

VU LES RAPPORTS ETABLIS PAR :

Monsieur Michel RAPPAZ, Professeur, LSN, MXG Ecublens, Lausanne, Suisse

Monsieur Eric ARQUIS, Professeur, Université de Bordeaux 1, Talence

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

Monsieur RABIA Boubeker

à soutenir devant un jury de l'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE LORRAINE,
une thèse intitulée :

**"La formation des structures équiaxes : mouvement des grains, croissance-refusion,
conséquences sur les macroségrégations"**

NANCY BRABOIS
2, AVENUE DE LA
FORET-DE-HAYE
BOITE POSTALE 3
F - 5 4 5 0 1
VANCEUVRE CEDEX

en vue de l'obtention du titre de :

DOCTEUR DE L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE LORRAINE

Spécialité : « mécanique et énergétique »

Fait à Vandoeuvre, le 23 septembre 2004

Le Président de l'I.N.P.L.,

L. SCHUFFENECKER



Pour le Président
Le Vice-Président,

J.-L. COUJARD

FORMATIONS DES STRUCTURES EQUIAXES, MOUVEMENT DES GRAINS, CROISSANCE-REFUSION, CONSEQUENCES SURS LES MACROSEGREGATIONS

RESUME :

En vue d'améliorer les prédictions des hétérogénéités chimiques observées sur les lingots d'acier en fin de solidification, une étude numérique tenant compte du mouvement et de la croissance-refusion des grains équiaxes a été réalisée. Après une étude bibliographique sur la formation des grains équiaxes, une approche diphasique a été utilisée pour décrire la croissance et la refusion des grains globulaires en mouvement dans le liquide. Cette étude numérique a été implémentée dans le code SOLID. Le mouvement des grains est décrit dans un premier temps avec l'hypothèse que ces derniers se déplacent à la même vitesse que la phase liquide. Les résultats obtenus ont montré l'influence du mouvement et de la croissance et refusion des grains, surtout dans les zones surchauffées. Ensuite, nous avons tenu compte du mouvement propre des grains. Dans ce cas, une fraction solide de cohérence au-delà de laquelle les grains sont immobiles a été introduite. Cette étude a montré que la macroségrégation finale est fortement dépendante de cette fraction de cohérence ainsi que de la densité de flux de fragments. Enfin, nous avons montré qu'il est possible d'ajuster les données d'entrée du modèle pour obtenir une bonne cohérence entre les résultats numériques et expérimentaux.

ABSTRACT :

In order to improve the predictions of heterogeneities of composition observed on steel ingots at the end of solidification, a numerical study which takes into account the movement and the growth of equiaxed grains has been realized. After a bibliographic part related to the formation of the equiaxed grains, a diphasic approach has been adopted to describe the growth and the remelting of globular grains moving in the liquid bulk. This numerical study was implemented in the computer code SOLID. The movement of the grains has been described in a first part with the assumption that the grains move at the same speed than that of the liquid phase. The results obtained showed the influence of the movement and growth-remelting of the grains on solidification, especially in the evolution of the superheated zones. Then, we have taken into account the own movement of the grains which differs from that of the liquid phase. In this case, a solid fraction of coherence beyond which grains are imposed to be fixed has been introduced. This study showed that the final macroségrégation is strongly dependent on this fraction of coherency and on the flux density of fragments. Finally, we have demonstrated that it was possible to adjust the input data of the model in order to get a good agreement between the numerical and the experimental results.