



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>



THÈSE

Pour l'obtention du titre de :

DOCTEUR de L'UNIVERSITÉ DE LORRAINE

Sciences des Matériaux
Science et Ingénierie des Matériaux et Métallurgie

Présentée par :

Nicolas LERICHE

Etude de la Transition Colonnaire-Equiaxe dans les lingots et en coulée continue d'acier et influence du mouvement des grains

Thèse soutenue publiquement le 1 décembre 2015 à Nancy devant le jury composé de :

Pr. Benoît Goyeau	Professeur des Universités EM2C, Paris, France	Rapporteur
Pr. Henri Nguyen-Thi	Professeur des Universités IM2NP, Marseille, France	Rapporteur
Dr. Silvère Akamatsu	Directeur de Recherche CNRS INSP, Paris, France	Examineur
Dr. Miha Založnik	Chargé de Recherche CNRS IJL, Nancy, France	Examineur
Mme Joëlle Demurger	Ingénieur R&D ASCO Industries	Invité
Pr. Gérard Lesoult	Professeur des Universités en retraite	Invité
Pr. Hervé Combeau	Professeur des Universités IJL, Nancy, France	Directeur de thèse
Dr. Charles-André Gandin	Directeur de Recherche CNRS CEMEF, Sophia-Antipolis, France	Co-directeur de thèse

*Institut Jean Lamour –UMR 7198- Département SI2M – Equipe 302
Parc de Saurupt - CS 50840- 54011 NANCY Cedex*

*Université de Lorraine – Collegium Sciences et Technologies
Pôle M4 : matière, matériaux, métallurgie, mécanique*

Remerciements

A la fin de ces trois années (ou presque...) de thèse, la place me manque pour remercier en détail toutes les personnes qui m'ont soutenu et épaulé durant mon travail/épreuve. Néanmoins, je veux leur exprimer ici sinon longuement en tout cas sincèrement l'impact qu'ils ont pu avoir sur ma vie durant ces quelques hivers.

Je remercie tout d'abord mon jury de thèse Benoît Goyeau, Henri Nguyen-Thi, Silvère Akamatsu et Miha Založnik pour l'attention qu'ils ont portée à mon travail et les remarques pertinentes sur l'interprétation des résultats. Je remercie particulièrement Gérard Lesoult pour m'avoir fait profiter de sa grande connaissance des procédés et de m'avoir fourni une analyse expérimentale approfondie des certains résultats. J'espère que mon travail pourra contribuer à fournir des éléments de réponse à ses questions. Je tiens également à remercier les autres personnes qui ont pu assister aux réunions du « groupe solidification » et qui ont également suivi ma thèse, notamment Isabelle Poitrault et Sylvain Witzke ainsi que Jessica et Benoît

La qualité de ce travail doit néanmoins surtout au suivi de mes deux encadrants Hervé Combeau et Charles-André Gandin. Je remercie ici à nouveau Miha Založnik qui a été mon troisième encadrant officieux. Merci chaleureusement à eux, même si la route était parfois laborieuse... C'est grâce à leur exigence mais aussi leur soutien que ce travail a pu aboutir.

L'ensemble de l'équipe « IJL » a également grandement contribué à me laisser des bons souvenirs de Nancy. Merci à Géraldine et Martine pour avoir combattu pour moi ma phobie de l'administratif. Pour les repas et les pauses cafés animés, je salue Sophie, Katty, Anne-Marie, Isabelle et à nouveau Géraldine et Martine. Merci à Dédé pour sa bonne humeur et son goût pour le cinéma et à Robert et son excellente charcuterie. Merci aussi à Francis, Bernard pour les dépannages informatiques. Plus particulièrement dans l'équipe Solidification, je n'oublie pas Dominique, Julien et Bernard avec qui les séminaires au vert me manqueront. Merci à Silvère Barrat, Vincent et Marc pour les excellents TD de thermodynamique, j'ai beaucoup aimé cette partie de mon travail.

Surtout, si je garde en général un bon souvenir de Nancy c'est aussi grâce aux collègues/amis que j'ai pu côtoyer durant ces années. J'en oublierai sûrement injustement mais qu'ils soit sûrs que qu'ils m'ont tous laissé un souvenir positif. En premiers Laurent pour l'aide et les pots aux bars, Jessica pour le soutien moral (tous mes vœux pour ta continuation au Canada), Marie pour son pragmatisme et sa détermination sans faille, Mathieu pour sa gouaille et l'accompagnement durant les week-ends, Youssef pour les soirées et les anecdotes mémorables, Simon (courage gros) mon ancien collègue de bureau, Akshay pour le soutien et nos discussions. Merci aussi à Amico pour

son pot de thèse et à Vincent mon collègue de bureau, toujours concentré. Enfin, merci à Gaël, Mathilde, Kim, Nicole, Ashish, Dimitri, Garry, Valério. Un coucou particulier à Florent et Marie-Claire pour l'excellent séjour au ski. J'adresse aussi un coucou à mes amis d'antan : Guillaume (de retour surprise à Nancy), Tannvir, Cécile, Delphine et Olivier.

En dernier de cette liste de remerciements mais en premier dans mon cœur, j'embrasse très tendrement mon père et ma mère ainsi que Laurent, mon frère. Sans leur soutien et leur amour, je ne serai pas à la fin de ce travail aujourd'hui et cela s'étend pour toutes les étapes positives qui ont jalonnées ma vie.

TABLE DES MATIERES

INTRODUCTION GENERALE.....	1
I. BIBLIOGRAPHIE : PHENOMENES A L'ORIGINE DE LA TRANSITION COLONNAIRE EQUIAXE ET MODELISATION DES TRANSITIONS DE STRUCTURES	3
I.1. Morphologies et échelles présentes lors de la solidification.....	3
I.1.1 Morphologie du front de solidification et des grains équiaxes.....	3
I.1.2 Les échelles de solidification.....	4
I.2. Origine des ségrégations chimiques.....	7
I.2.1 La microségrégation	7
I.2.2 Macroségrégations et Mésoségrégations	11
I.3. Les structures de solidification	15
I.3.1 Les structures colonnaires	15
I.3.2 Les structures équiaxes	17
I.4. Croissance des structures.....	21
I.5. Résultats expérimentaux concernant la Transition-Colonnaire-Equiaxe (TCE)..	24
I.5.1 Influence des paramètres liés à l'alliage	24
I.5.2 Influence des conditions thermiques	25
I.5.3 Influence de la convection naturelle.....	26
I.5.4 Influence d'autres paramètres	27
I.6. Critères et mécanismes de la TCE.....	28
I.6.1 Critères de TCE sans mécanisme proposé	28
I.6.2 Mécanismes de TCE et critères associés	28
I.7. Modèles numériques de TCE	38
I.7.1 Modélisation indirecte des structures	40
I.7.2 Modélisation directe des structures	50
I.8. Conclusion de l'étude bibliographique.....	56
II. REPRESENTATION ET MODELISATION DES STRUCTURES COLONNAIRES ET DES STRUCTURES EQUIAXES	60
II.1. Introduction : Représentation des structures équiaxes et colonnaires	60
II.2. Modélisation des structures équiaxes	62
II.3. Modélisation des structures colonnaires	71
II.3.1 Modélisation des « sous-structures » colonnaires	71
II.3.2 Modélisation de la propagation des structures colonnaires.....	77
II.3.3 Modélisation du front colonnaire	83
II.3.4 Validation du modèle colonnaire	110
III. MODELISATION DE LA SOLIDIFICATION MIXTE COLONNAIRE-EQUIAXE ET PREDICTION DE LA TCE ET DE LA TEC	117
III.1. Présentation du modèle	117

III.1.1	Modélisation des structures mixtes.....	117
III.1.2	Modélisation des transitions de structures et de la fragmentation	122
III.1.3	Implémentation numérique du modèle.....	125
III.2.	Validation du modèle par comparaison avec les résultats expérimentaux de la littérature.....	136
III.2.1	Présentation du cas choisi	136
III.2.2	Résultats et comparaison avec l'expérience	138
IV.	APPLICATION A LA COULEE DE LINGOTS D'ACIER. INFLUENCE DES SCENARIOS DE FORMATION DES GRAINS EQUIAXES SUR LA TCE, LA TEC ET LES SEGREGATIONS.....	147
IV.1.	Application au lingot d'acier d'Ascométal de 6,2 tonnes.....	148
IV.1.1	Présentation du cas étudié	148
IV.1.2	Influence de la germination hétérogène des grains équiaxes.....	154
IV.1.3	Influence de l'injection surfacique des grains équiaxes	165
IV.1.4	Mise en place d'un critère pour l'injection surfacique	175
IV.2.	Application au lingot Aubert&Duval de 3,3 tonnes	186
IV.2.1	Présentation du cas étudié	186
IV.2.2	Influence de l'injection surfacique avec critère sur le gradient thermique	188
	CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES.....	194
	Synthèse.....	194
	Perspectives	197
	ANNEXES	199
A.	Présentation du modèle SOLID.....	199
B.	Données thermodynamiques	202
C.	Validation du modèle de croissance des structures équiaxes.....	205
D.	Conditions aux limites thermiques et propriétés des matériaux pour les lingots d'acier étudiés.....	208
	BIBLIOGRAPHIE	214

NOTATIONS

Notations latines

C_0	Composition nominale en soluté	%pds
c_p	Capacité thermique	$J.kg^{-1}.K^{-1}$
C_{eut}	Composition moyenne à l'eutectique	%pds
C_m	Composition moyenne en soluté	%pds
$C_{\alpha,ref}^i$	Composition moyenne de l'espèce i dans la phase α référence pour l'estimation de la masse volumique	%pds
$\langle C_\alpha \rangle^\alpha = C_\alpha$	Composition moyenne du soluté i dans la phase α	%pds
C_α^*	Composition en soluté i à l'interface du côté α	%pds
DAS	Distance caractéristique pour l'écoulement dans le milieu poreux	m
D_α^i	Coefficient de diffusion chimique de l'espèce i dans la phase α	$m^2.s^{-1}$
D_T	Diffusivité thermique	$m^2.s^{-1}$
FO_α^j	Nombre de Fourier solutal dans la phase α suivant la direction j	-
FO_T^j	Nombre de Fourier thermique suivant la direction j	-
f_α	Fraction massique de la phase α	-
G	Gradient thermique	$K.m^{-1}$
g_α	Fraction volumique de la phase α	-
g_{env}^{bloc}	Fraction volumique de grains pour le blocage des grains	-
g_{env}	Fraction volumique d'enveloppe	-
g_{eut}	Fraction volumique de la phase eutectique	-
g_{Hunt}	Fraction limite de grains équiaxes devant le front colonnaire pour le blocage par le mécanisme de Hunt	-
g_{si}	Fraction interne, correspondant au rapport de la fraction volumique de solide sur la fraction volumique d'enveloppe	-
h	Coefficient de Fourier (échange thermique)	$W.m^{-2}.K^{-1}$
h_m	Enthalpie moyenne massique	$J.kg^{-1}$
H_{ZP}	Hauteur de la zone pâteuse	m
Iv	Fonction d'Ivantsov	
K	perméabilité	m^2
k_i	Coefficient de partage de l'espèce i	-
ℓ	Longueur du front colonnaire dans le VER	m
m_i^i	Pente du liquidus de l'espèce i	$K.\%pds^{-1}$
n_{eqx}	Densité volumique de grains équiaxes	m^{-3}
n_{col}	Densité volumique de sous-structures colonnaires	m^{-3}
n_{nuc}	Densité de germes	m^{-3}
n_{nuc}^j	Densité de germes de la classe j	m^{-3}
n_0	Densité initiale de particules disponibles pour la germination	m^{-3}
$\vec{n}_{\alpha/\beta}$	Vecteur unitaire normal à l'interface α/β dirigé vers la phase β	$m.s^{-1}$
Pe_C	Nombre de Péclet solutal	-
Pe_{th}	Nombre de Péclet thermique	-

Notations

Q	Coefficient de restriction de croissance	K
R_g	Rayon du grain	m
Ra	Nombre de Rayleigh	-
R_{bras}	Longueur du bras primaire de dendrite	m
Re	Nombre de Reynolds	-
R_{env}	Rayon de l'enveloppe du grain	m
R_f	Rayon final de grain	m
R_{tip}	Rayon des pointes de dendrites	m
Sc	Nombre de Schmidt	-
Ste	Nombre de Stefan	-
S_v	Surface spécifique de l'interface solide/liquide	m^{-1}
S_v^α	Surface spécifique de la phase α	m^{-1}
S_v^{env}	Surface spécifique de l'enveloppe	m^{-1}
\dot{T}	Vitesse de refroidissement	$K \cdot s^{-1}$
T_0	Température à l'extérieur du système ou température initiale	K
T_{eut}	Température eutectique	K
T_f	Température de fusion du corps pur	K
T_{liq}	Température de liquidus	K
t_{ls}	Temps local de solidification	s
T_{ref}	Température de référence pour l'estimation de la masse volumique	K
T_{sol}	Température de solidus	K
T^α	Température de la phase α	K
T^*	Température à l'interface	K
T_∞	Température loin de l'interface	K
V	Vitesse du front de solidification	$m \cdot s^{-1}$
v_{env}	Vitesse de l'enveloppe	$m \cdot s^{-1}$
v_{front}	Vitesse du front colonnaire	$m \cdot s^{-1}$
v_{tip}	Vitesse des pointes primaires	$m \cdot s^{-1}$
$\langle \vec{v}_\alpha \rangle^\alpha = \vec{v}_\alpha$	Vitesse intrinsèque de la phase α	$m \cdot s^{-1}$

Notations grecques

β	Coefficient de retrait	-
β_C^i	Coefficient d'expansion volumique solutale de l'espèce i	$(\%pds)^{-1}$
β_{th}	Coefficient d'expansion volumique thermique	K^{-1}
Γ	Coefficient de Gibbs-Thomson	m.K
Γ_α	Taux de production de la phase α	$kg \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}$
Γ_{env}	Taux de production d'enveloppes	$m^{-3} \cdot s^{-1}$
γ	Energie interfaciale	$J \cdot m^{-2}$
Δh_f	Chaleur latente de fusion massique	$J \cdot kg^{-1}$
δt	Micro-pas de temps pour la résolution de l'étape de croissance	s

Δt	Macro-pas de temps pour la résolution de l'étape de transport	s
ΔT	Surfusion	K
ΔT_0	Intervalle de solidification	K
ΔT_C	Surfusion solutale	K
ΔT_C^{col}	Surfusion solutale devant le front colonnaire	K
ΔT_i	Surchauffe initiale	K
ΔT_N	Surfusion de germination	K
ΔT_R	Surfusion minimale pour la croissance libre, dite surfusion de courbure	K
ΔT_{th}	Surfusion thermique	K
δ_C	Longueur caractéristique de diffusion solutale	m
δ_α	Longueur caractéristique de diffusion solutale dans la phase α	m
δ_{th}	Longueur caractéristique de diffusion thermique	m
λ_1	Distance interdendritique primaire	m
λ_2	Distance interdendritique secondaire	m
λ_α	Conductivité thermique de la phase α	W.m ⁻¹ .K ⁻¹
ν_α	Viscosité cinématique de la phase α	m ² .s ⁻¹
ρ_{ref}	Masse volumique de référence	kg.m ⁻³
ρ_α^j	Masse volumique de la phase α dans la zone j	kg.m ⁻³
σ^*	Constante de stabilité marginale	-
φ	Flux d'extraction de chaleur	W.m ⁻²
ϕ_{nucl}^j	Taux de germination volumique pour les particules de classe j	m ⁻³ .s ⁻¹
ϕ_{frag}	Taux volumique de production de fragments	m ⁻³ .s ⁻¹
Ω_C	Sursaturation solutale	-
Ω_{th}	Sursaturation thermique	-

Indices et exposants

<i>col</i>	Zone colonnaire / ... des structures colonnaires
<i>cr</i>	Après l'étape de croissance
<i>d</i>	Liquide intragranulaire
<i>e</i>	Liquide extragranulaire
<i>ec</i>	Zone extra-colonnaire
<i>eqx</i>	Zone équiaxe / ... des structures équiaxes
<i>gr</i>	Après l'étape de germination
<i>l</i>	Phase liquide totale
<i>pr</i>	Après l'étape de propagation du front colonnaire
<i>s</i>	Phase solide
<i>tot</i>	Ensemble du VER (zones équiaxe et colonnaire)
<i>tr</i>	Après l'étape de transport

Introduction générale

Depuis les années 2000, 90 % du tonnage de la production de produits bruts ou semi-finis d'acier est réalisé par coulée continue (Cramb A. 2003). Cependant, les applications pour les produits d'acier coulés en lingot (coulée statique) restent nombreuses et incontournables. Citons notamment les viroles des cuves de réacteurs nucléaires (Erve M. 1988) ou encore les corps des éléments sous pression dans les centrales thermiques et le blindage civil et militaire (Arcelor Mittal Industrie 2014). De manière intéressante, la répartition des macrostructures et les défauts de ségrégation chimique typiquement présents dans un lingot d'acier sont restés très semblables depuis le début du XX^{ème} siècle. La Figure I.1-1 montre ainsi les structures de solidification reportées dans des lingots d'acier coulés à plus de 60 ans d'intervalle. De même la Figure I.1-2 montre un exemple d'empreinte Baumann (révélant la ségrégation en soufre) sur deux autres lingots.

Comme nous le verrons dans le chapitre suivant, c'est la ségrégation des espèces chimiques à l'échelle nanométrique de l'interface solide-liquide qui est à l'origine des défauts présents dans ces lingots. Néanmoins plusieurs phénomènes physiques que nous listerons dans cette partie sont responsables de la propagation des ségrégations jusqu'aux échelles supérieures. Une fois créées, celles-ci ne pourront être éliminées et persisteront dans le produit fini. Lorsque la ségrégation est particulièrement importante, des phases secondaires différentes peuvent apparaître, entraînant des changements drastiques des propriétés mécaniques du solide. Il en est de même pour la répartition des structures qui sont visibles sur la Figure I.1-1 qui vont déterminer en grande partie la tenue en fatigue et la dureté du produit final (Pickering E.J 2013).

Malgré les progrès réalisés dans l'élaboration des alliages métalliques et la plus grande maîtrise des procédés, on remarque donc que les défauts rencontrés dans les lingots d'acier persistent encore de nos jours. On peut par exemple remarquer les ségrégations similaires entre les deux lingots de la Figure I.1-2. Ceci souligne l'utilité de posséder des outils numériques permettant de prédire, à l'échelle d'un produit industriel, la mise en place des structures et l'apparition des ségrégations. Le but de ce travail est d'étudier la mise en place des deux grands types de structures présentes lors de la solidification, les structures colonnaires et équiaxes et notamment la zone de transition entre ces structures appelée Transition Colonnaire Equiaxe (TCE). On s'attachera plus particulièrement, à l'aide de la simulation numérique, à comprendre l'influence du mouvement des grains équiaxes sur la TCE.

Dans cette partie, nous commencerons par détailler les différentes échelles spatiales et temporelles présentes lors de la solidification, ce qui nous permettra d'introduire les origines physiques des ségrégations chimiques qui seront présentées dans un second temps. Par la suite, on décrira les différentes structures (colonnaires et équiaxes) apparaissant lors de la solidification ainsi que leurs origines. Après leur apparition, les structures croissent dans le système en solidification, ce qui sera l'objet d'une autre partie.

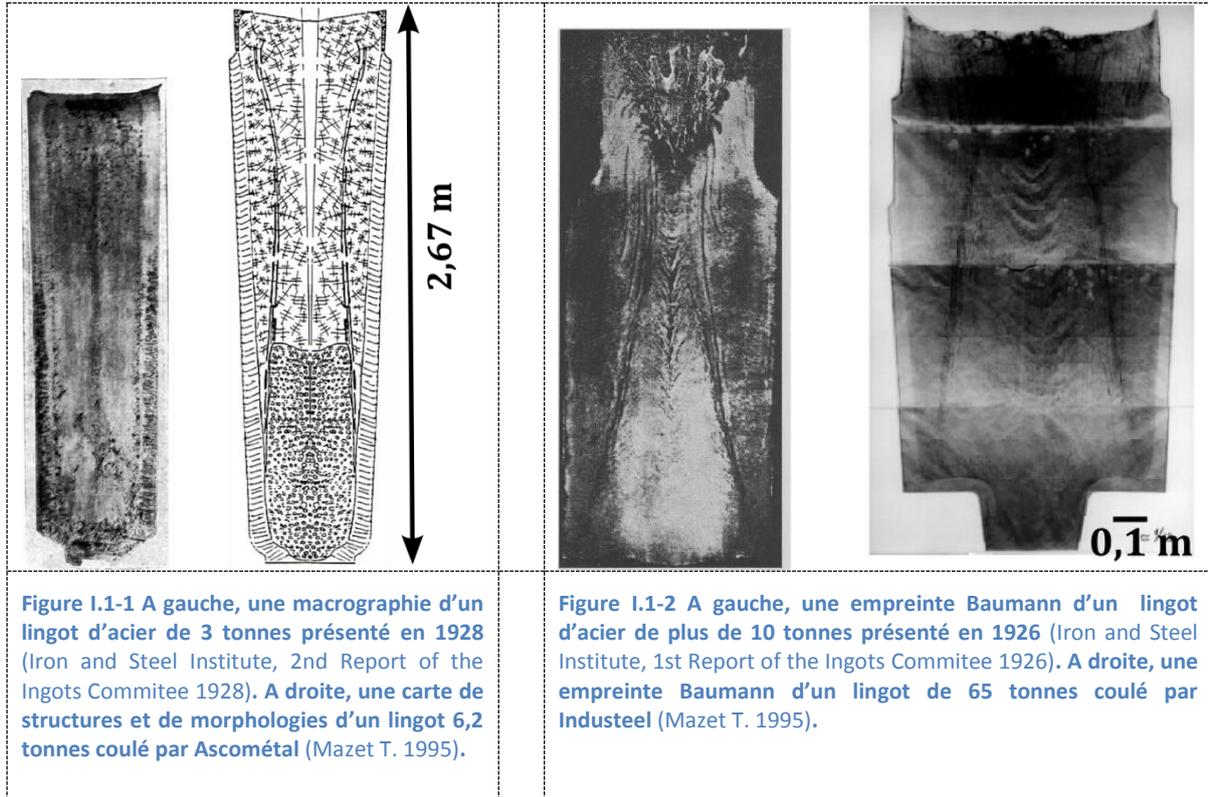


Figure I.1-1 A gauche, une macrographie d'un lingot d'acier de 3 tonnes présenté en 1928 (Iron and Steel Institute, 2nd Report of the Ingots Committee 1928). A droite, une carte de structures et de morphologies d'un lingot 6,2 tonnes coulé par Ascométal (Mazet T. 1995).

Figure I.1-2 A gauche, une empreinte Baumann d'un lingot d'acier de plus de 10 tonnes présenté en 1926 (Iron and Steel Institute, 1st Report of the Ingots Committee 1926). A droite, une empreinte Baumann d'un lingot de 65 tonnes coulé par Industeel (Mazet T. 1995).

Ceci permettra d'introduire les conditions qui peuvent permettre la transition d'une structure à l'autre, et plus particulièrement la Transition Colonnaire-Equiaxe (TCE). Dans un premier temps, on listera les études expérimentales permettant de mettre en évidence l'influence qualitative des différents paramètres des procédés sur la TCE. Puis, nous verrons plus quantitativement, les possibilités de critères et de mécanismes physiques permettant de prédire la position et l'instant de la TCE.

Enfin, pour permettre de définir le cahier des charges du modèle numérique qui sera développé dans la suite de ce travail, on présentera un résumé des principaux modèles de solidification de la littérature qui ont été utilisés pour prédire la TCE.

I. Bibliographie : Phénomènes à l'origine de la Transition Colonnaire Equiaxe et modélisation des transitions de structures

I.1. Morphologies et échelles présentes lors de la solidification

I.1.1 Morphologie du front de solidification et des grains équiaxes

Lors de la solidification d'un alliage (corps non-pur), la zone de solidification n'a le plus souvent pas l'apparence d'un front plan. Dans le cas de la solidification lente des aciers qui nous intéresse l'interface entre le solide et le liquide possède une morphologie complexe illustrée sur la Figure I.1-1.

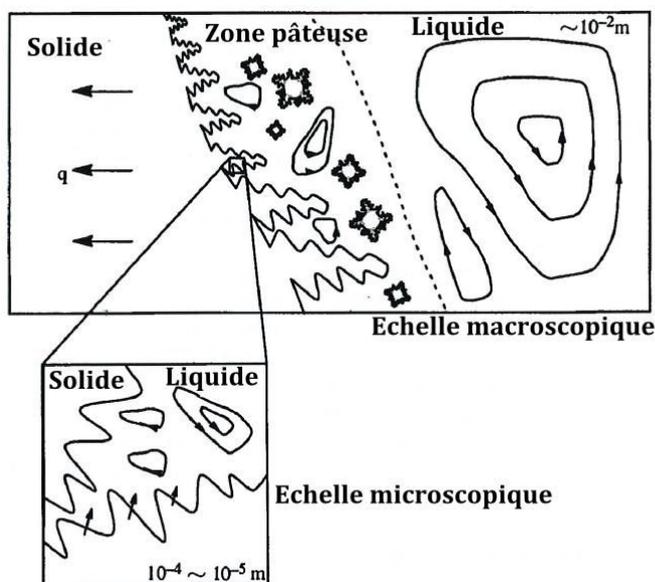


Figure I.1-1 Deux types d'échelles présentes lors de la solidification. L'échelle macroscopique est ici considéré pour les longueurs supérieures à $10^{-2}m$ et l'échelle microscopique pour les longueurs inférieures à $10^{-4}m$ (voir aussi Figure I.1-4). Les boucles fléchées représentent les mouvements de circulation du liquide. D'après (Shyy W. 2005).

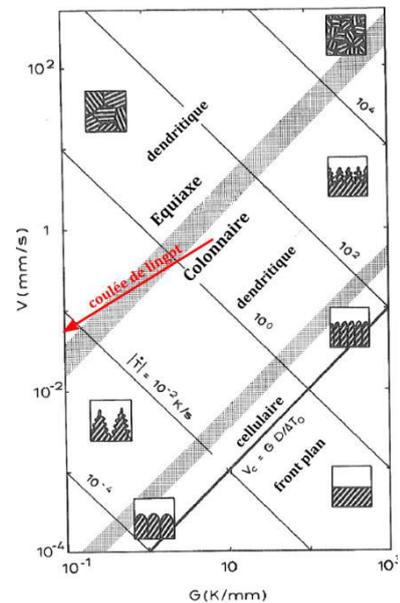


Figure I.1-2 Morphologies et structures lors de la solidification d'un alliage Fe-C avec $\Delta T_0 \sim 50 K$. La trajectoire en flèche marquée par « coulée de lingot » indique les valeurs de G et de V calculées au front lors de la solidification non-dirigée d'un lingot. D'après (F. D. Kurz W. 1992).

A l'échelle microscopique (cf. Figure I.1-4), l'interface solide liquide forme une discontinuité nette entre les deux phases mais déjà on peut distinguer la complexité des morphologies en présence. A l'échelle macroscopique, la zone du front de solidification est composée d'une zone pâteuse (mélange de solide et de liquide). Les structures croissent globalement dans la direction opposée à l'extraction de chaleur et solidaires du reste de la zone en solidification sont nommées **colonnaires** formés de bras appelés primaires. Leur morphologie est soit **cellulaire** soit **dendritique** comme indiqué sur la Figure I.1-3b. Sur les troncs primaires (structures dendritiques espacées d'une distance notée λ_1) se branchent à intervalles réguliers des bras plus petits, dits secondaires, perpendiculaires aux bras primaires.

Dans la même zone en solidification ainsi que dans le liquide devant les structures colonnaires, on trouve des cristaux en suspension et qui ne possèdent pas de direction $\langle 100 \rangle$ privilégiée de croissance, ce sont les structures **équiaxes**. Ces structures ont également très souvent une morphologie dendritique mais peuvent posséder une morphologie dite **globulaire** caractérisée par une forme plus sphérique et la quasi-absence de structures dendritiques (cf. Figure I.1-3.c). La coexistence des deux types de structures considérées ici est schématisée de manière plus idéalisée sur la Figure I.1-3.a. En complément de cette figure, on peut noter que des grains équiaxes peuvent se retrouver logés dans la zone entre les bras colonnaires sans que ceux-ci soit entièrement stoppés. Une zone dite mixte apparaît alors de sorte qu'il peut être difficile de distinguer une transition nette entre les structures colonnaires et équiaxes.

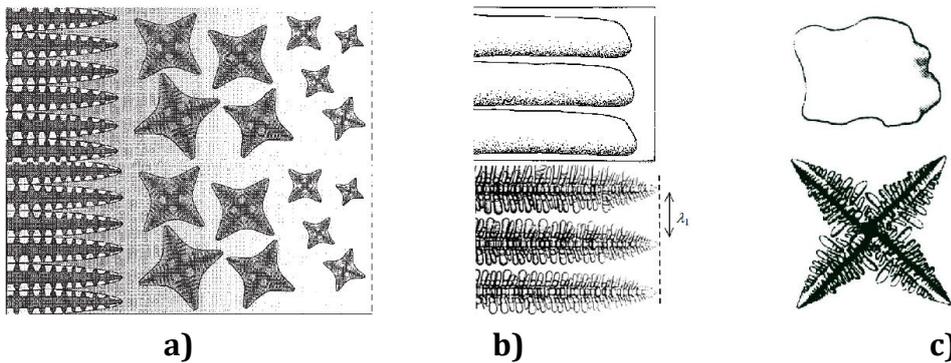


Figure I.1-3 a) Schéma d'une structure à la transition colonnaire-équiaxe (B. C. Martorano M.A 2003). b) En haut, structure colonnaire cellulaire. En bas, structure colonnaire dendritique. c) En haut, schéma d'un grain équiaxe globulaire (ou compact). En bas, un grain équiaxe dendritique.

En anticipation sur les chapitres concernant la Transition Colonnaire-Equiaxe, la Figure I.1-2 schématise les différentes structures et morphologies que l'on peut s'attendre à trouver lors de la solidification d'un alliage avec un intervalle de solidification $\Delta T_0 \approx 50 K$ (F. D. Kurz W. 1992). On peut y voir que la présence des différentes morphologies et des structures est principalement contrôlée par les deux paramètres procédés. Le gradient thermique dans la phase liquide devant le front de solidification $G [K.m^{-1}]$ et la vitesse du front de solidification $V [m.s^{-1}]$. La trajectoire rouge indique la variation de ces deux grandeurs lors de la solidification d'un lingot d'acier Fe-0,3% pds C avec un intervalle de solidification $\Delta T_0 \approx 50 K$.

Cette figure confirme déjà deux affirmations précédentes. Premièrement, la morphologie des structures colonnaires est, dans le cadre des coulées industrielles, dendritique et non pas cellulaire ou en front plan. Deuxièmement, au cours de la solidification, les valeurs (G,V) traversent la zone de transition entre les deux types de structures de telle sorte qu'à un moment donné une Transition Colonnaire Equiaxe (TCE) doit avoir lieu.

I.1.2 Les échelles de solidification

La morphologie complexe de la zone en cours de solidification illustrée précédemment souligne les nombreuses échelles spatiales et temporelles présentes lors de la solidification. En partant de l'échelle la plus grande, on va présenter les ordres de grandeurs qui leur sont associées en prenant comme exemple un lingot d'acier coulé en source de 65 tonnes (cf. Figure I.1-4).

o Echelle du produit (1 m)

L'échelle du produit, de l'ordre du mètre, est représentée à gauche de la Figure I.1-4. Elle permet de distinguer plusieurs des structures et des morphologies vues précédemment. Ainsi, de la surface au cœur du lingot on a :

- Une zone dite « de peau », située près de la surface et mesurant quelques millimètres. Elle est constituée de petits cristaux équiaxes, généralement globulaires, dans le cas des lingots d'acier.
- Une zone constituée de structures colonnaires dendritiques, mesurant ici une dizaine de centimètres.
- Une zone intermédiaire entre la zone purement colonnaire et équiaxe, appelée « mixte » ou « dendritique branchée ». Elle est constituée à la fois de grains équiaxes et colonnaires. On constate que l'épaisseur de cette zone augmente du pied à la tête du lingot.
- Au centre du lingot se trouve une zone remplie de grains équiaxes, plus grands que ceux de la zone de peau. Une transition morphologique est également visible sur le schéma de la macrographie de la Figure I.1-4 avec des grains équiaxes plus globulaires dans les deux tiers bas du lingot et des grains plus dendritiques dans le dernier tiers du lingot.

On a donc dans ce lingot une transition colonnaire-équiaxe (TCE) qui est plus marquée en bas qu'en haut du lingot. Au niveau de la tête du lingot, la structure équiaxe dendritique rejoint la zone mixte. Dans certains lingots, en tête du lingot, la structure peut être orientée de telle sorte que l'on peut parler de transition équiaxe-colonnaire (ECT). Enfin, on constate en haut du lingot une zone d'affaissement appelée retassure.

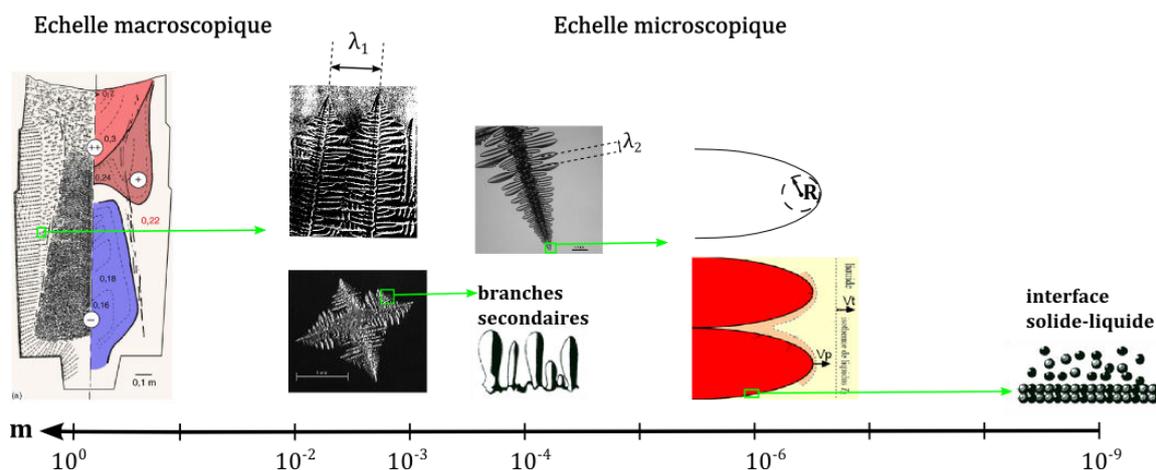


Figure I.1-4 Représentation, de gauche à droite, des échelles de solidification par taille décroissante.

- [Echelle du grain et de l'espace primaire \$\lambda_1\$ \(\$10^{-4} - 10^{-2}\$ m\)](#)

Une représentation à une échelle plus petite permet de faire apparaître plus précisément la structure des grains. Sur la Figure I.1-4 sont représentées les deux types de structures colonnaires et équiaxes. L'espace entre chacun des bras primaires de la structure colonnaire est généralement suffisamment régulier pour que l'on puisse définir la longueur λ_1 , appelée espace dendritique primaire. Cette grandeur dépend des conditions thermiques locales et de l'alliage étudié. Pour les coulées en lingot d'acier, on a généralement $\lambda_1 \approx 1 \text{ mm}$ (Lesoult G., Cristallisation et Microstructures 1986). Dans le cadre de la coulée continue d'acier, on a plutôt $\lambda_1 \approx 10^{-4} \text{ m}$. Pour les structures équiaxes, la grandeur caractéristique est le rayon du grain. Le rayon final R_f des structures équiaxes dépendra ainsi de la densité locale des grains équiaxes. Pour les aciers, caractérisés par l'absence d'inoculants, on a généralement : $1 \text{ mm} \leq R_f \leq 4 \text{ cm}$.

Nous négligeons ici d'autres types de structures secondaires qui sont présentes dans les aciers. On peut citer notamment les structures eutectiques interdendritiques, reconnaissables par des morphologies constituées soit d'alternances de bandes soit de structures fibreuses (H. J. Jackson K.A 1966). La transformation péritectique des aciers n'est pas non plus abordée bien qu'elle puisse laisser des marques reconnaissables sur la structure finale (Kerr H.W 1996).

- [Echelle de l'espace secondaire \$\lambda_2\$ \(10 – 100 \$\mu\text{m}\$ \)](#)

En se rapprochant de la zone branchée en arrière des bras primaires, on retrouve un réseau de bras secondaires. Ils sont également régulièrement espacés d'une distance caractéristique λ_2 , l'espace dendritique secondaire. La grandeur λ_2 dépend généralement du temps local de solidification t_{sl} et varie inversement avec celui-ci (F. D. Kurz W. 1992). Dans les aciers, on obtient : $10^{-5} \text{ m} \leq \lambda_2 \leq 10^{-4} \text{ m}$ (Lesoult G., Cristallisation et Microstructures 1986). C'est entre ces bras secondaires et à l'arrière des pointes du bras primaire, que se créent les micro-ségrégations chimiques dans un alliage : Le liquide enrichi formé entre les bras secondaires peut-être ensuite transporté à l'échelle du produit et former des macro-ségrégations (cf. Chapitre I.2).

- [Echelle du rayon de pointe \(1 \$\mu\text{m}\$ \)](#)

Lorsque l'on s'intéresse à la zone située à l'extrémité des bras de dendrites (la zone de pointe), on constate que cette pointe peut être assimilée à un paraboloïde de révolution. Sa courbure est alors caractérisée par le rayon R et on a : $R \approx 1 \mu\text{m}$. Cette échelle est également comparable à celle de la couche limite de soluté en avant de la pointe, qui peut être estimée par $\delta_l = \frac{D_l}{V_{tip}}$ où V_{tip} est la vitesse de croissance de la pointe dendritique. Ainsi, seule une petite partie du soluté rejeté lors de la solidification se retrouve repoussé en avant des pointes primaires. La majeure partie de l'enrichissement solutal a lieu dans l'espace entre les dendrites secondaires et primaires dans le liquide appelé interdendritique ou intragranulaire.

L'existence de cette couche limite implique l'existence d'une surfusion d'origine chimique qui s'étend dans le liquide devant la pointe. L'étendue de la zone en surfusion dépend alors de l'intensité du gradient thermique devant la pointe. La solidification a donc lieu dans une situation hors-équilibre et cette surfusion, dont on verra l'origine au Chapitre I.4, est le moteur de l'avancée des pointes.

o [Echelle de l'interface solide-liquide \(> 1 nm\)](#)

C'est une des échelles les plus petites, de l'ordre de quelques nanomètres. C'est à l'interface solide/liquide que se passe véritablement la redistribution du soluté.

Les modèles numériques de TCE ne descendent pas jusqu'à cette échelle pour des raisons de coût de calcul. Les modèles à champ de phase (cf. Chapitre I.7) qui traitent directement l'interface solide-liquide en supposant une épaisseur d'interface d'un ou deux ordres de grandeurs supérieure au nanomètre.

I.2. Origine des ségrégations chimiques

I.2.1 La microségrégation

I.2.1.a Le diagramme de phase

L'origine de la ségrégation chimique est la différence de solubilité entre le solide et le liquide. On peut traduire cette ségrégation sur un diagramme de phase établi à pression p fixée, par exemple sur la Figure I.2-1 pour l'alliage binaire Fe-C en pourcentage massique de carbone.

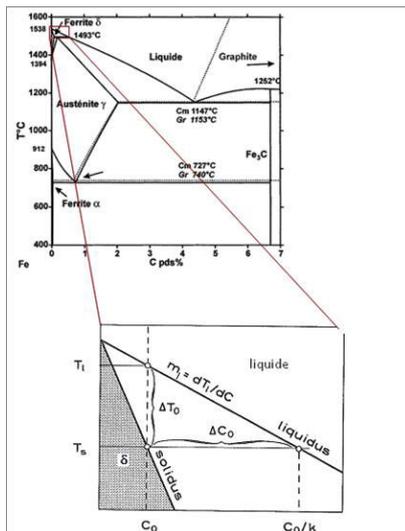


Figure I.2-1 Représentation du binaire Fe-C pour des faibles concentrations de C. ΔT_0 est l'intervalle de solidification de l'alliage, m_l la pente de liquidus et k le coefficient de partage. C_0 est la composition initiale de l'alliage. D'après (F. D. Kurz W. 1992).

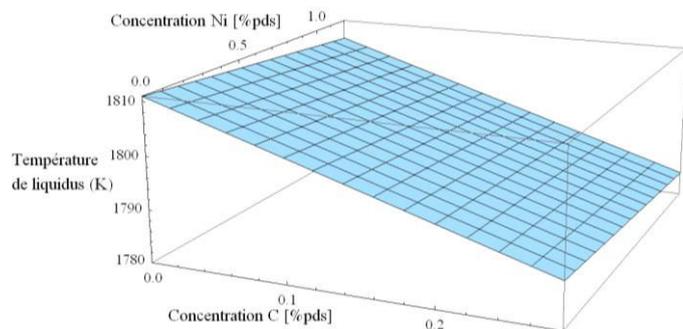


Figure I.2-2 Variation de la nappe de liquidus pour un alliage ternaire Fe-0.233%C-1.144%Ni. Pour C : $m_l = -80K.\%pds^{-1}$. Pour Ni : $m_l = -3,3K.\%pds^{-1}$. $T_f = 1538^\circ C$

On définit alors le coefficient de partage $k = \left(\frac{C_s}{C_l}\right)^*$ à pression et température fixées, où * signifie que l'on se trouve à l'interface qui est supposée être à l'équilibre thermodynamique. On note que si $k < 1$, comme c'est le cas ici, le liquide s'enrichit en soluté. Pour certains alliages, on peut avoir > 1 , dans ce cas le liquide s'appauvrit lors de la solidification.

$m_l [K.\%pds^{-1}]$ est la pente de liquidus et $\Delta T_0 [K]$ est l'intervalle de solidification de l'alliage à l'équilibre thermodynamique (en l'absence de transformations secondaires) qui est donné par : $\Delta T_0 = -m_l \left(\frac{C_0}{k} - C_0\right)$ où C_0 est la composition nominale de l'alliage. Comme on peut le constater sur

la Figure I.2-1, on considère souvent en première approximation que k et m_l sont constants localement autour de C_0 .

On peut alors calculer la température de liquidus nominale de l'alliage : $T_{liq} = T_f + m_l C_l$. Par une approximation linéaire on peut étendre cette relation aux alliages multi-constitués, on obtient alors pour :

$$T_{liq} = T_f + \sum_i m_l^i C_l^i \quad (1.1)$$

On a représenté, sur la Figure I.2-2 une nappe de liquidus pour un acier de nuance 22NCD10 simplifié par un alliage ternaire Fe - 0.233 % C – 1.144% Ni.

Cette approximation est valable tant que l'alliage est suffisamment dilué et que la température est assez proche de la température de fusion du corps pur T_f et du liquidus de l'alliage (Appolaire B. 2008). En conséquence, l'équation 1.1 est valable pour les aciers faiblement allié. Pour des aciers multi-constitués plus concentrés, la solution la plus simple consiste à approximer localement la courbe de liquidus par une pente m_l constante. On définit alors une température de fusion fictive du corps pur T_m' . Une méthode plus précise consiste à obtenir la relation $T(C_l^i)$ en se basant sur des tables de données thermodynamiques telles qu'obtenues par exemple à l'aide du logiciel ThermoCalc (Nielsen O 2001).

Au cours de la solidification, le liquide s'enrichit. Une relation entre la fraction de solide formée, g_s , et la concentration du liquide C_l doit alors être établie.

I.2.1.b Les modèles de microségrégation

Comme on l'a vu précédemment, la majeure partie du soluté rejeté lors de la solidification se trouve dans la région interdendritique en arrière des pointes primaires. De plus puisque $H_{ZP} \gg \lambda_1 \gg \lambda_2$ où H_{ZP} est la hauteur de la zone pâteuse, le problème de microségrégation devient unidimensionnel et peut être traité sur un élément de longueur $\frac{\lambda_2}{2}$ (Dantzig J. 2009).

Ainsi, l'équation de diffusion du soluté dans le solide s'écrit :

$$\frac{\partial C_s}{\partial t} = D_s \frac{\partial^2 C_s}{\partial x^2} \quad (1.2)$$

On peut par ailleurs adimensionaliser l'équation (1.2) par $\tau = \frac{t}{t_{ls}}$ et $\xi = \frac{x}{\lambda_2}$ pour faire apparaître le nombre de Fourier solutal dans le solide $Fo_s^x = 4 \frac{D_s}{\lambda_2^2}$. t_{ls} est le temps local de solidification.

$$\frac{\partial C_s}{\partial \tau} = Fo_s^x \frac{\partial^2 C_s}{\partial \xi^2} \quad (1.3)$$

On peut écrire des équations similaires pour la diffusion de soluté dans le liquide et la diffusion de la chaleur. Cependant, on a vu que dans les aciers $\lambda_2 \in [10^{-5}; 10^{-4}] m$ et de plus on peut approximer t_{ls} par la relation $\lambda_2 = M \cdot t_{ls}^n$ (F. D. Kurz W. 1992). M et n sont des paramètres variant en fonction de l'alliage considéré. Pour des aciers faiblement alliés (Lesoult G., Cristallisation et

Microstructures 1986) et en prenant pour le carbone $D_l = 10^{-8}m^2s^{-1}$ (F. D. Kurz W. 1992), on trouve alors $30 \lesssim Fo_l^x \lesssim 270$ pour le nombre de Fourier solutal dans le liquide. Puisque $Fo_l^x \gg 1$, on a $\frac{\partial^2 C_l}{\partial \xi^2} \approx 0$ et la concentration dans le liquide peut être considérée comme uniforme même si elle varie dans le temps. Cette hypothèse est la base des modèles analytiques de microségrégation que l'on présente par la suite. Seuls les modèles numériques plus complexes prennent en compte la diffusion limitée du soluté dans le liquide.

Puisque dans les métaux $D_T = \frac{\lambda}{\rho c_p} \gg D_l$, l'hypothèse précédente est a fortiori valable d'un point de vue thermique et la température peut être considérée comme uniforme dans notre système de taille $\lambda_2/2$. λ, ρ et c_p sont respectivement la conductivité thermique, la densité et la capacité thermique.

Par contre, pour la diffusion du soluté dans le solide, avec $D_s \approx 10^{-10}m^2s^{-1}$ pour le carbone, on a : $1 \lesssim Fo_s^x \lesssim 3$ et donc l'hypothèse d'une diffusion parfaite dans le solide est le plus souvent invalide. Pour les autres éléments dans l'acier tels que Ni, Si ou Cr on a $D_l \approx 10^{-9}m^2s^{-1}$ et $D_s \approx 10^{-12}m^2s^{-1}$. On retrouve alors $Fo_l^x \gg 1$ mais par contre on a : $Fo_s^x \ll 1$. Ceci indique une diffusion quasi-nulle dans le solide et puisqu'alors : $\frac{\partial C_s}{\partial \tau} \approx 0$, la concentration dans le solide ne varie pas dans le temps mais est uniquement fonction de la distance x .

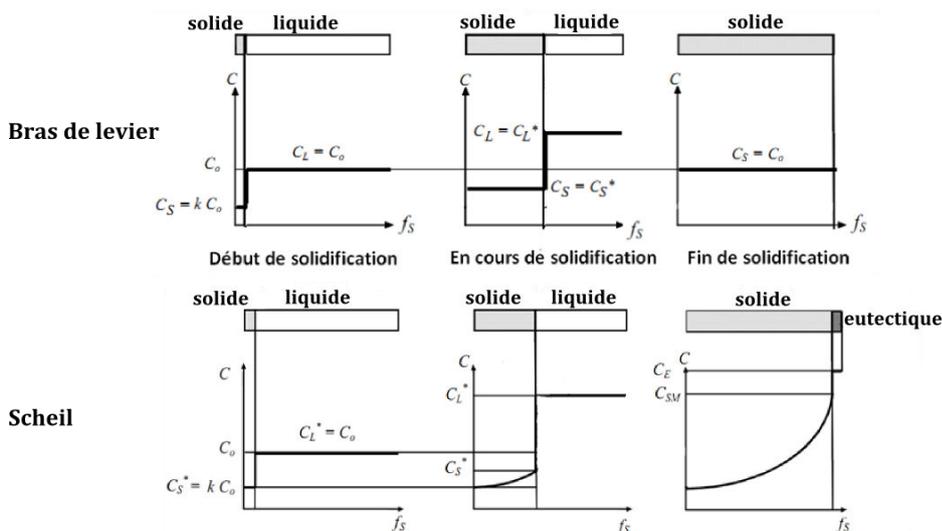


Figure 1.2-3 Profils de concentrations dans le liquide et le solide lors de la solidification suivant le modèle des bras de levier ou le modèle de Scheil.

Dans le premier cas énoncé ci-avant du carbone dans l'acier, la conservation du soluté dans le système permet d'obtenir (Dantzig J. 2009):

$$C_l^* = C_l = \frac{C_0}{1 - (1 - k)g_s} \quad (1.4)$$

Ce modèle est couramment appelé « bras de levier » et l'évolution de C_l et C_s en fonction de g_s est schématisée sur la Figure 1.2-3. Il n'y a alors aucune ségrégation dans le système en fin de solidification. Le premier solide est formé avec une concentration kC_0 mais en conséquence de l'enrichissement du liquide, la concentration finale du solide est uniforme et égale à C_0 .

Dans le second cas où l'on peut négliger la diffusion dans le solide, l'équation de conservation du soluté et l'équation (1.2) permettent d'écrire :

$$C_l^* = C_l = C_0(1 - g_s)^{(k-1)} \quad (1.5)$$

Le résultat est le modèle de Gulliver-Scheil schématisé sur la Figure I.2-3. On peut voir qu'il y a cette fois un profil de microségrégation dans le solide final. Un exemple d'évolution de $T(g_l)$ est tracé en Figure I.2-4 pour le cas du silicium dans le fer avec le modèle du bras de levier ou de Scheil-Gulliver.

Par ailleurs puisque d'après l'équation (1.5), $C_l \rightarrow \infty$ lorsque $g_s \rightarrow 1$, la solidification s'arrête en pratique lorsqu'on atteint la limite de solubilité du liquide et le reste du liquide solidifie le plus souvent à une concentration d'eutectique donnée C_{eut} pour une température constante T_{eut} correspondant au palier eutectique.

Les autres modèles analytiques de microségrégation diffèrent par la manière dont ils prennent en compte la diffusion limitée dans le solide (Kraft T. 1997).

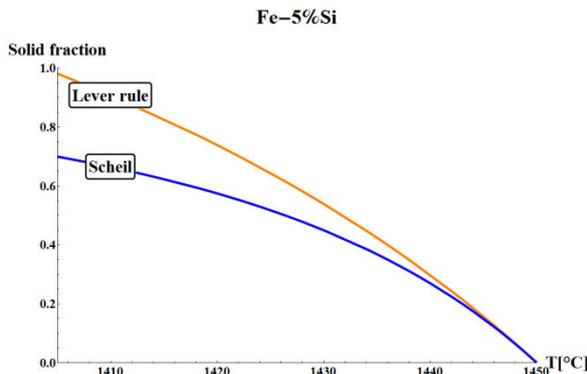


Figure I.2-4 Application des modèles de Scheil et de bras de levier pour un alliage Fe-5%pds Si ($m_l = -17, 2K. \%^{-1}$, $k = 0, 65$, $T_f = 1536^\circ C$)

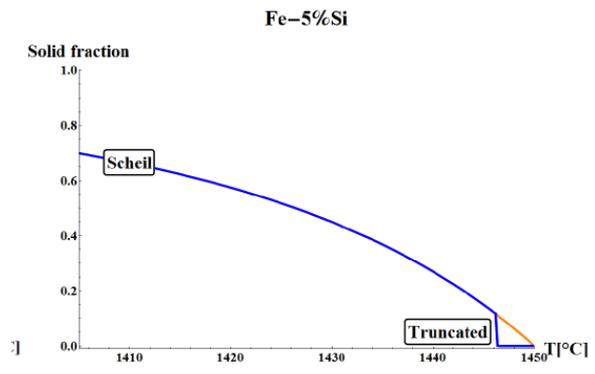


Figure I.2-5 Application pour le même alliage Fe-5% pds Si du modèle de Scheil tronqué (en bleu) pour une surfusion au front colonnaire $\Delta T_c = 4 K$.

Par ailleurs, l'existence d'une couche limite chimique en avant des pointes de dendrites entraîne une surfusion chimique $\Delta T_c = -m_l(C_l^* - C_l^\infty)$ où C_l^∞ est la concentration du liquide loin des pointes. La valeur de ΔT_c dépend de la vitesse des pointes $v_{pointes}$ et de l'alliage considéré. Pour des structures colonnaires qui évoluent dans un gradient thermique positif, ceci implique que la solidification ne commence pas à la température de liquidus $T_{liq}(C_l)$ mais à la température de pointes $T_{pointes} = T_{liq}(C_l) - \Delta T_c$. On ne peut donc plus appliquer les modèles précédents qui font commencer la solidification à $T_{liq}(C_l)$.

Une première approche (Flood S.C 1987) appelée modèle de « Scheil tronqué » consiste à ne commencer la solidification qu'à partir de $T_{pointes}$ puis à solidifier le système à température constante jusqu'à retrouver le modèle de Scheil (ou bras de levier). Par exemple, sur la Figure I.2-5, un exemple d'application du modèle de Scheil et de Scheil tronqué est donné pour un alliage Fe-5%pds Si pour une surfusion de $\Delta T_c = 4^\circ C$. On peut constater que plus de 10 % du solide se forme alors à température constante $T_{pointes}$.

Cette approche, bien qu'ayant été utilisée dans les modèles numériques de solidification, ne conserve pas le soluté (Rappaz M. 1989). Actuellement, certains modèles numériques prennent en compte la diffusion limitée dans le solide et le liquide.

I.2.2 Macroségrégations et Mésoségrégations

Tant que le transport du soluté se fait uniquement par diffusion, la ségrégation peut uniquement survenir à une petite échelle. En effet, la diffusion du soluté se fait sur une longueur caractéristique $x \sim \sqrt{D_l t_{ls}}$. Pour $t_{ls} \sim 1000$ s lors d'une solidification typique d'un lingot d'acier, on a $x \sim 1$ mm. La formation des méso- et macroségrégations fait intervenir les phénomènes de transport du solide et du liquide et on va lister par la suite les principaux défauts de ségrégation présents dans les lingots d'acier ainsi que leur origine. Par ailleurs, on négligera dans le travail qui suit, l'influence des déformations mécaniques sur les structures et les ségrégations. Pourtant, l'influence des déformations mécanique est non-négligeable, particulièrement dans le cas de la coulée continue (Lesoult G. 2005).

La Figure I.2-6 montre la répartition en carbone dans un lingot d'acier de 65 tonnes et d'une teneur nominale de 0,22 %pds C à côté de la carte des structures dans le même lingot. On peut y voir une ségrégation quasi-nulle dans la zone colonnaire. La zone de grains équiaxes de morphologie plus globulaire est associée à une ségrégation négative qui peut s'étendre sur plus de la moitié de la hauteur du lingot.

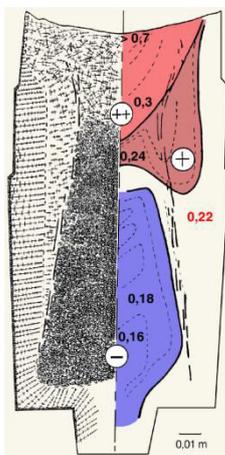


Figure I.2-6 A gauche, carte de structures dans le lingot de 65 t et à droite la carte de concentrations moyennes en carbone mesurées ($C_0 = 0,22$ %pds).

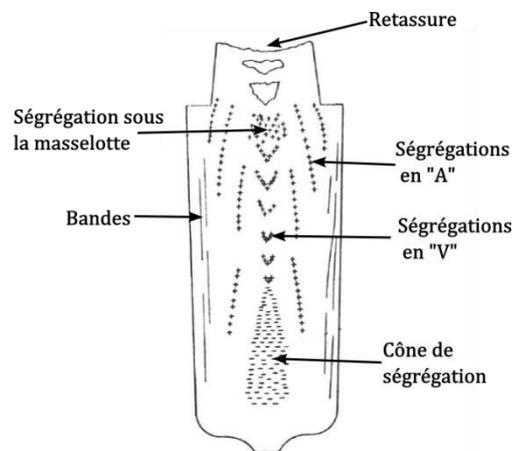


Figure I.2-7 Carte des macro- et mésoségrégations typiques que l'on rencontre dans un lingot industriel. Les symboles + désigne une ségrégation positive et - une ségrégation négative. D'après (Flemings M.C 1979).

Plus haut dans le lingot, la ségrégation s'inverse et devient positive. Cette ségrégation s'accroît lorsqu'on s'approche de la tête du lingot ou dans la zone masselottée du lingot où l'indice de ségrégation $\Delta C\% = \frac{\bar{c} - c_0}{c_0} \times 100$ est maximal. Ici, \bar{c} est la concentration moyenne locale caractérisée par $\bar{\rho}\bar{c} = \bar{\rho}_l\bar{c}_l + \bar{\rho}_s\bar{c}_s$ où $\bar{\rho}$ est la densité moyenne et \bar{c} les concentrations moyennes. Superposées à ces macroségrégations se trouvent des mésoségrégations d'une épaisseur de l'ordre du cm et d'une longueur allant jusqu'au mètre. Les différentes mésoségrégations présentes dans un

lingot sont schématisées sur la Figure I.2-7 (Flemings M.C 1979).

Ces défauts ont été repérés et discutés dès le début du XX^{ème} siècle (Brearley A. W 1918) mais la compréhension de l'origine des ségrégations a beaucoup évoluée.

○ [Le cône de ségrégation négative](#)

Comme on l'a vu, il existe une correspondance entre la morphologie des grains équiaxes dans le lingot et la ségrégation négative dans la partie basse. Il est désormais largement admis que c'est la sédimentation des cristaux solides plus pauvres en soluté qui est responsable de la ségrégation négative dans la zone appelée cône de ségrégation ou cône de sédimentation (K. A. Combeau H. 2009). Par ailleurs, le liquide enrichi par le rejet de soluté provenant du solide est également déplacé vers le haut suite à l'arrivée du solide, ce qui peut aggraver l'intensité de la ségrégation négative. Néanmoins, lorsque les grains équiaxes qui ont cru et sédimentent possèdent une morphologie de type globulaire, c'est le premier phénomène qui prédomine (Lesoult G. 2005).

On peut cependant remarquer que même en l'absence de formation d'un cône de ségrégation, on observe quand même une ségrégation négative tout en bas du lingot (C. H. Vannier I. 1993). Ceci est dû à l'écoulement de liquide dans la zone pâteuse en croissance. Le même phénomène contribue à la formation de la ségrégation positive en haut du lingot.

○ [La ségrégation positive en haut du lingot](#)

La zone de ségrégation positive dans la partie haute du lingot est due premièrement au déplacement du liquide enrichi depuis le cône de sédimentation comme nous l'avons vu précédemment. Par ailleurs, un phénomène important est le mouvement du liquide dans la zone intragranulaire du solide fixe. Qu'il s'agisse d'une zone équiaxe fixe ou d'une zone colonnaire, le mouvement de liquide est significatif tant que la fraction de solide est suffisamment faible.

Un des moteurs principaux de ce mouvement est la convection thermo-solutale. On la représente généralement par une loi où la densité du liquide dépend de la température et des concentrations en solutés et où l'influence des différents solutés est linéarisée. On a ainsi :

$$\rho_l = \rho_{ref} \left[1 - \beta_{th}(T - T_{ref}) - \sum_i \beta_C^i (C_i^i - C_{i,ref}^i) \right] \quad (1.6)$$

$\beta_{th}[K^{-1}]$ est le coefficient d'expansion thermique qui est la plupart du temps positif. β_C^i sont les coefficients d'expansion solutaux de chaque espèce i pour l'alliage considéré. Généralement, ce coefficient est positif pour le carbone ($i = C$), même si certains auteurs ont aussi utilisé des valeurs négatives (Flemings M.C 1979). ρ_{ref} est la densité du métal à la température T_{ref} et pour les concentrations $C_{i,ref}^i$.

Par ailleurs, si on néglige les transports de masse et de soluté causés par le mouvement du solide ainsi que les phénomènes de diffusion, on peut écrire dans une zone de solide fixe et pour un alliage binaire (K. A. Combeau H. 2009) :

$$\frac{\partial C_m}{\partial t} = -\frac{1}{m_l} g_l \vec{v}_l \cdot \vec{\nabla} T \quad (1.7)$$

On a supposé, pour écrire l'équation (1.7) que $\rho_s = \rho_l$ et que le liquide peut être considéré à l'équilibre thermodynamique, soit $C_l = \frac{T-T_f}{m_l}$. On voit ainsi que l'évolution de la ségrégation va dépendre de la direction relative entre le mouvement du liquide et le gradient thermique dans la zone pâteuse. On assiste par ailleurs souvent dans la partie haute des lingots à des inversions du gradient de température (Flemings M.C 1979) et à des mouvements du liquide (Z. M. Combeau H. 2009) qui sont favorables à la formation de ségrégations positives.

La vitesse intrinsèque du liquide \vec{v}_l dans le liquide intragranulaire est calculée le plus souvent dans les modèles numériques par la relation de Darcy (Pickering E.J 2013), le bilan de quantité de mouvement dans la zone pâteuse peut alors se réduire à :

$$\vec{v}_l = -\frac{K}{g_l \mu_l} (\vec{\nabla} p - \rho_l \vec{g}) \quad (1.8)$$

μ_l est la viscosité du liquide. K est la perméabilité dans le réseau dendritique, le plus souvent décrite par le modèle de Karman-Kozeny :

$$K \approx \frac{d_c^2}{180} \frac{g_l^3}{(1 - g_l)^2} \quad (1.9)$$

Ce modèle suppose l'écoulement laminaire autour d'un lit de sphères solides. d_c est une distance caractéristique pour la porosité qui pour les structures équiaxes peut être assimilée à λ_2 pour des morphologies dendritiques et au diamètre du grains d_g pour des morphologies globulaires. Il y a plusieurs limitations à l'utilisation de ces relations pour le calcul de K . La plus évidente concerne le fait que la perméabilité K est anisotropique dans le cas général, particulièrement pour les structures colonnaires (Bousquet-Melou P. 2002). Par ailleurs, il est connu que la relation de Karman-Kozeny sous-estime la perméabilité aux grandes fractions liquides, là où la perméabilité augmente rapidement (Bhat M.S. 1995).

Néanmoins, comme l'implémentation de modèles plus complexes implique la connaissance d'un nombre croissant de paramètres, l'utilisation de la loi de Karman-Kozeny reste raisonnable (Poirier D.P. 1987).

Un autre phénomène est le retrait, provenant du fait qu'on a le plus souvent $\rho_s > \rho_l$. Le retrait entraîne la formation de la zone de retassure tout en haut du lingot qui apparaît en fin de solidification. Par ailleurs, dans la zone pâteuse, pour compenser la réduction locale du volume, un appel de liquide a lieu.

Flemings et coll. (N. G. Flemings M.C 1967) ont montré que si le transport du liquide se fait uniquement par retrait, on peut définir la vitesse critique du liquide dans la zone intragranulaire :

$$\vec{v}_l = -\beta \vec{v}_T \quad (1.10)$$

$\beta = \frac{\rho_s - \rho_l}{\rho_s}$ est le coefficient de retrait et v_T correspond à la vitesse d'avancée des isothermes avec $v_T = \frac{\dot{T}}{\nabla T}$.

Si $v_l > v_T$ et que \vec{v}_l va dans le sens opposé à \vec{v}_T , on a tendance à former une ségrégation positive dans la zone solidifiée.

Si $v_l < v_T$ ou que \vec{v}_l et \vec{v}_T vont dans le même sens, on a tendance à former une ségrégation négative.

o [Les mésoségrégations en A](#)

Les mésoségrégations positives pointant vers le haut du lingot sont appelées ségrégations en A ou encore veines sombres. Ces veines sombres sont parfois suffisamment ségrégés pour atteindre des compositions proches de l'eutectique (Beckermann C. 2002). Les nouvelles phases ainsi formées sont associées à des caractéristiques mécaniques comme par exemple une plus grande dureté et fragilité et peuvent alors être incompatibles avec certaines applications, notamment dans le domaine du nucléaire (Maidorn C. 1985).

Il est généralement admis que la formation des canaux ségrégés se fait d'abord par une instabilité de la densité du liquide dans la zone pâteuse et juste devant le front de solidification (S. J. Hellawell A. 1993). Cette instabilité de densité est la conséquence de la stratification du soluté dans la zone pâteuse et devant le front. Elle a lieu pour des solutés plus légers que le métal de base (tel le carbone pour l'acier pour lequel $\beta_C^C < 0$) et si la convection solutale est dominante par rapport à la convection thermique, comme c'est souvent le cas dans les lingots d'aciers (K. A. Combeau H. 2009). Les cheminées de liquide enrichies en soluté agissent comme précurseur à la formation de canaux de liquide enrichis au milieu de la zone pâteuse (Shevchenko N. 2012).

D'un point de vue numérique, la difficulté provient du fait que l'épaisseur de ces canaux ségrégés dépasse rarement 1 cm et qu'il faut plusieurs volumes de discrétisation dans la largeur des canaux pour obtenir de bonnes prédictions (Z. M. Kumar A. 2012). La discrétisation peut ainsi être trop fine pour être compatible avec un calcul sur des systèmes de taille industrielle.

Par ailleurs, la formation des veines sombres est souvent assimilée à l'apparition de canaux ségrégés et se trouve donc être à l'origine de la fragmentation et donc de la formation de grains équiaxes (Pollock T.M 1996), (L. S. Hellawell A. 1997).

o [Les autres types de ségrégation](#)

Il existe un autre type de mésoségrégation « en V », visible au centre des lingots (cf. Figure I.2-7). Leur origine supposée est par contre très différente. Le mécanisme admis dans la littérature est la fissuration du tissu dendritique équiaxe vers le haut du lingot par le poids métallostatique du solide au-dessus. La formation des fissurations est accentuée par le phénomène de retrait (Flemings M.C 1979). Ces fissures sont par la suite remplies par le liquide restant dans la tête du lingot qui est fortement enrichie en soluté. Par ailleurs, on peut noter que le faible nombre d'études au sujet de ces mésoségrégations semble indiquer le peu d'intérêt porté par les industriels à prédire ces défauts (Pickering E.J 2013).

On observe enfin plus rarement des bandes de ségrégations positives ou négatives dans la zone colonnaire du lingot. Ces ségrégations sont supposées provenir de changements abrupts de la

vitesse de croissance du front colonnaire, par exemple s'il y a formation d'une lame d'air entre l'acier et le moule qui peut modifier l'efficacité du transfert de chaleur. Là encore, très peu d'études à ce sujet existent dans la littérature (Pickering E.J 2013).

I.3. Les structures de solidification

I.3.1 Les structures colonnaires

I.3.1.a Description des structures colonnaires

La Figure I.3-1.a représente les deux types de morphologies que l'on peut distinguer pour les structures colonnaires (à l'exception du front plan et des structures secondaires, par exemple eutectiques) :

- [La morphologie cellulaire](#)

Les cellules, de forme pleine, régulièrement espacées, ne possèdent pas de branchements secondaires. Cette structure n'est pas la plus fréquente dans les alliages mais apparaît lors de la solidification de métaux pratiquement purs ou lorsque la solidification est très rapide avec une vitesse de front grande devant le centimètre par seconde.

- [La morphologie dendritique](#)

Très découpées, régulièrement espacées, telles que montrées sur la Figure I.3-1.b en bas. Elles possèdent des branches dendritiques secondaires de part et d'autre du tronc primaire. C'est la morphologie la plus courante dans les métaux et c'est celle que l'on considère dans le cadre de ce travail. Comme on l'a vu précédemment les grains colonnaires sont caractérisés par des orientations des troncs primaires voisines (mais pas toujours identique) et le fait qu'ils croissent dans la direction opposée au flux de chaleur (Spittle J.A 2006).

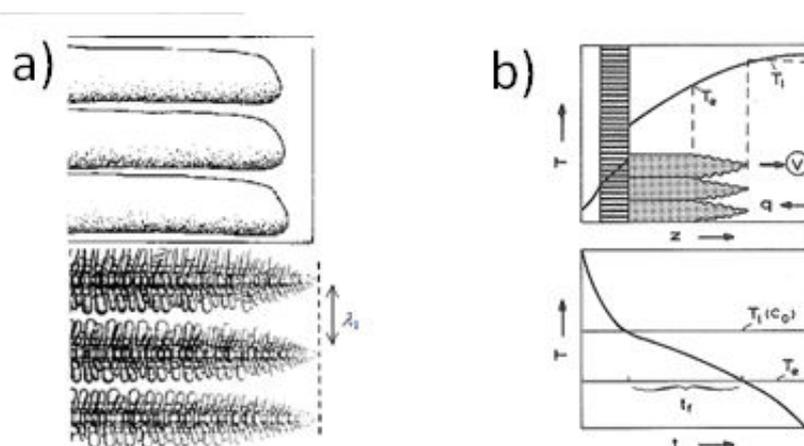


Figure I.3-1 a) En haut : Exemple de structure colonnaire cellulaire. En bas : Bras colonnaires de morphologie dendritique. b) Profil thermique et courbe de refroidissement caractéristiques d'une structure colonnaire. d'après (F. D. Kurz W. 1992).

Sur la Figure I.3-1.b, on peut voir le profil de température et la courbe de refroidissement monotone caractéristiques des structures colonnaires (F. D. Kurz W. 1992). Les structures colonnaires

étant généralement en contact avec le moule, la chaleur est extraite depuis le liquide à travers le solide : le cristal a donc une température inférieure au solide et le gradient thermique devant les pointes primaires est positif à l'exception notable de certains cas en fin de solidification colonnaire (Gandin Ch.-A. 2000).

La croissance colonnaire est appelée « contrainte » car, en régime stationnaire, la vitesse des pointes est limitée par celle des isothermes et cette vitesse imposée détermine alors la surfusion qui existe à la pointe des dendrites.

I.3.1.b Origine des structures colonnaires

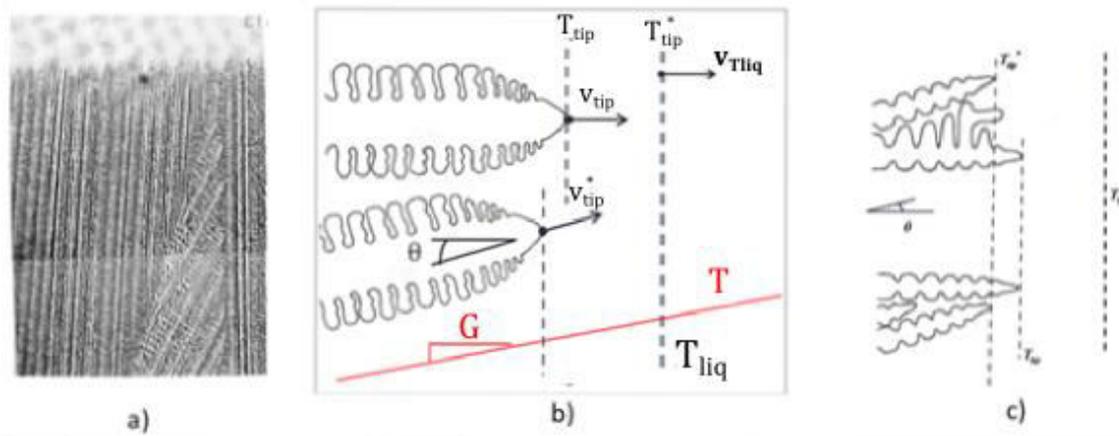


Figure I.3-2 a) Mécanisme de sélection des grains colonnaires dans une coupe macrographique d'un alliage Succinonitrile-Acétone (R. M. Gandin Ch.-A. 1994). b) Schéma de deux bras colonnaires alignés et désorientés dans un gradient thermique horizontal. c) Cas de bras colonnaires divergents (en haut) et convergents (en bas) (G. C. Rappaz M. 1993).

Les structures colonnaires trouvent leur origine dans la zone de peau équiaxe qui apparaît immédiatement après le contact du matériau coulé avec le moule. On constate également que lorsque le système à solidifier est assez grand, les bras primaires colonnaires dont la direction cristallographique est la mieux alignée avec celle du gradient thermique ont bloqué les autres bras primaires. Cette observation, qui est montrée expérimentalement en Figure I.3-2.a pour un alliage Succinonitrile-Acétone est le résultat de deux mécanismes : le branchement de nouvelles branches menant à la formation de tronc primaires et le blocage des troncs primaires.

Comme schématisé sur la Figure I.3-2.b, les bras primaires qui sont alignés avec le gradient thermique croissent perpendiculairement à l'isotherme de liquidus T_{liq} et si le régime stationnaire est atteint alors $v_{tip} = v_{T_{liq}}$, où $v_{T_{liq}}$ est la vitesse d'avancée de l'isotherme de liquidus. En revanche lorsque le bras primaire est mal orienté par rapport au gradient, d'un angle θ , alors pour égaliser $v_{T_{liq}}$, le bras doit avoir une vitesse $v_{tip}^{\theta} = \frac{v_{T_{liq}}}{\cos(\theta)}$ qui est donc supérieure à $v_{T_{liq}}$. Or la vitesse de la pointe est directement liée à la surfusion existante à cette pointe. En conséquence les bras mal orientés évoluent légèrement en retrait par rapport à ceux alignés avec le gradient thermique.

A partir de là deux situations peuvent advenir qui vont conduire au blocage du bras mal orienté (G. C. Rappaz M. 1993). Elles sont représentées en Figure I.3-2.c. Si les directions sont convergentes alors le bras mal orienté est directement bloqué par les autres bras. Quand les directions sont divergentes, l'espace libre laissé entre les bras permet le développement d'un bras

secondaire puis tertiaire issus du bras primaire aligné avec le gradient thermique (cf. Figure I.3-2.c). Après un temps de latence, la vitesse de croissance de ce bras tertiaire devient à peu près équivalente à celle d'un bras primaire (Dantzig J. 2009). L'espace disponible entre les bras divergents est alors comblé et ceci peut conduire au blocage des bras mal orientés.

I.3.2 Les structures équiaxes

I.3.2.a Description des structures équiaxes

La Figure I.3-3.a représente les deux types de morphologies que l'on peut distinguer pour les structures équiaxes (à l'exception des structures de type eutectique) :

- Une structure de forme compacte et globalement sphérique, le grain est dit **globulaire**
- Une structure équiaxe **dendritique**, de forme plus découpée.

Si on trace une enveloppe qui englobe le grain, par exemple une enveloppe sphérique (pour un grain dendritique il s'agit de la sphère reliant les pointes primaires), on peut distinguer les différentes morphologies par la valeur de la fraction interne de solide $g_{si} = \frac{V_s}{V_{env}}$ où V_s est le volume de solide dans l'enveloppe et V_{env} le volume de l'enveloppe. Un grain globulaire aura une fraction interne proche de 1 tandis qu'un grain dendritique peut avoir des valeurs de g_{si} très faibles, inférieures à 0,1.

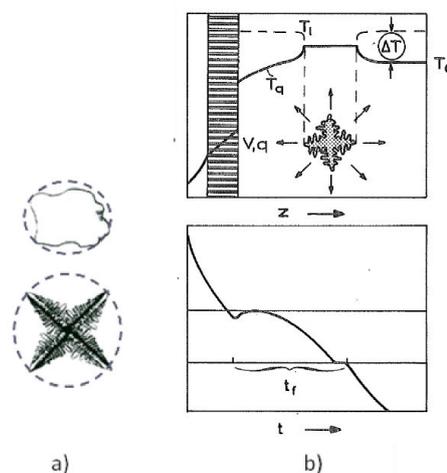


Figure I.3-3 a) En haut : Schéma d'un grain globulitique. En bas : Schéma d'un grain dendritique et de l'enveloppe sphérique correspondante. b) Profil thermique et courbe de refroidissement caractéristique d'une structure équiaxe. D'après (F. D. Kurz W. 1992).

La morphologie des grains équiaxes est également importante pour la mise en place des ségrégations, notamment la ségrégation négative dans le cône de sédimentation. En effet, l'intensité de cette ségrégation va fortement dépendre de la quantité de solide transportée par les grains, (caractérisée par g_{si}) et de leur mouvement (qui dépend de la taille d_g des grains) (C. H. Zaloznik M. 2009).

La Figure I.3-3.b (F. D. Kurz W. 1992) décrit un profil thermique et une courbe de refroidissement caractéristiques des structures équiaxes. On remarque en premier lieu que, contrairement au cas des structures colonnaires, la chaleur s'évacue à travers le liquide environnant et le cristal est le milieu le plus chaud. Comme le solide se forme en-dessous de la température de liquidus, un grain équiaxe évolue dans un liquide en surfusion. Au contraire du colonnaire, la croissance équiaxe est alors appelé « libre » ou « non-contrainte » : la vitesse n'est plus imposée mais dépend de la surfusion qui est donnée par celle du liquide alentour. Le grain croît dans toutes les directions.

On remarque également que la courbe de refroidissement n'est pas forcément monotone. En effet, si la chaleur latente dégagée par la solidification du grain contrebalance le flux de chaleur qui est extrait du liquide, la température du milieu peut se mettre à augmenter. C'est le phénomène de recalescence.

I.3.2.b Origine des structures équiaxes

La présence et la quantification de chaque phénomène à l'origine des structures équiaxes est un problème qui dépend du type de coulée étudié (solidification dirigée, alliage inoculé, condition de microgravité, coulée en lingot) (Spittle J.A 2006). La compréhension de ces phénomènes a beaucoup évoluée et évolue encore grâce aux expériences récentes en microgravité et aux nouvelles études *in situ* sur des alliages métalliques.

Néanmoins, les phénomènes à l'origine des grains équiaxes peuvent être regroupés en trois grands types de mécanismes.

- [Germination hétérogène](#)

Il s'agit du premier mécanisme, reporté notamment en 1954 par Winegard et Chalmers (Winegard W.C 1954), on pensait alors qu'il était la source principale de grains équiaxes. Il repose sur le fait que la zone de surfusion chimique qui se forme devant le front colonnaire en croissance est propice à la germination de grains équiaxes en amont de ce front pour peu que cette surfusion soit suffisamment importante. Dans le cas d'un alliage inoculé, on peut directement relier la surfusion nécessaire à la croissance des grains équiaxes à la taille des particules inoculantes (Quested T.E 2005).

Cependant, il est désormais admis que la germination hétérogène n'est pas le principal phénomène à l'origine des grains équiaxes dans les alliages non-inoculés comme les lingots d'acier (Spittle J.A 2006), (Flood S.C, ASM Handbook - Casting 1988), (Morando R. 1970) car ce phénomène n'opère qu'à des surfusions très élevées qui ne sont pas observées lors des coulées de lingot.

- [Préexistence de cristaux solides](#)

Ce phénomène suppose la préexistence de cristaux solides dans le liquide avant que toute solidification significative n'intervienne dans le système.

Le premier mécanisme proposé par Chalmers (Chalmers B. 1963) est appelé le mécanisme « Big Bang ». Ce phénomène agit lorsque des parois plus froides que le métal coulé se trouve en contact avec celui-ci lors du remplissage.

Il suppose que tout près du moule, au tout début de la solidification (et dès l'étape de remplissage pour les lingots industriels), la surfusion thermique est tellement importante qu'une couche de cristaux équiaxes solides se forme par germination hétérogène, indépendamment du fait que l'alliage soit inoculé ou non. Une fois ces cristaux formés, ceux qui ne sont pas suffisamment attachés au moule seront emportés par la convection d'origine naturelle ou liée au remplissage du lingot. Par la suite, si la surfusion dans le liquide le permet, ces cristaux pourront être responsables de la croissance d'une structure équiaxe.

Cependant, si la surchauffe est non-négligeable dans le lingot, cette source de grains devient négligeable car les cristaux transportés auront refondu. Même dans le cas contraire il est généralement admis que ces grains se retrouvent entièrement dans le cône de sédimentation en bas du lingot (Flood S.C, ASM Handbook - Casting 1988). Il ne s'agit donc pas du seul mécanisme en présence lors de la solidification des lingots.

Un mécanisme similaire a été proposé par Ohno et coll. (Ohno A. 1971) sur la base d'observations sur des alliages Sn-Pb et Sn-Bi. Les grains équiaxes sont dans ce cas également supposés provenir du détachement de la peau solidifiée près du moule, au tout début de la solidification.

Par ailleurs si le haut du lingot en solidification n'est pas isolé, des structures équiaxes peuvent se former à l'interface du métal et de l'air, similairement à l'interface entre le moule et le métal. Ce mécanisme peut être non-négligeable à la condition que le haut du lingot ne soit pas isolé ou masselotté (Morando R. 1970), (Gandin Ch.-A. 2000).

○ [Fragmentation](#)

Ce phénomène est désormais considéré comme la source principale de grains équiaxes dans les alliages non-inoculés coulés en lingots et lors d'expériences de solidification dirigée (Spittle J.A 2006), (D. H. Mirihanage W.U 2013), (Pollock T.M 1996), (Paradies C.J 1997).

Ce phénomène a été proposé en premier par Jackson et coll. (H. J. Jackson K.A 1966) d'après des observations sur alliages transparents.

Une fois que les bras secondaires ont dépassé la couche de diffusion de soluté qui entoure le bras primaire, ils se développent de manière plus libre et s'élargissent, ce qui entraîne un resserrement à l'endroit où ils sont attachés au bras primaire (cf. Figure I.3-4). Ce resserrement devient par la suite une zone de faiblesse d'un point de vue mécanique mais est aussi un site préférentiel de refusion à cause de la surfusion associée à la courbure locale comme indiqué sur la Figure I.3-4. La refusion est provoquée par des fluctuations dans la vitesse locale de croissance des bras primaires qui va modifier la composition locale du solide formé. Ces fluctuations sont supposées provenir de mouvements locaux de convection du liquide intragranulaire enrichi en soluté. En effet, lorsque du liquide plus riche et léger se trouve en-dessous de liquide moins enrichi, une instabilité d'origine solutale est observée, appelée également « inversion de densité » (S. J. Hellawell A. 1993).

Par ailleurs pour que les fragments ainsi formés puissent être une source conséquente de grains équiaxes et provoquer la Transition Colonnaire Equiaxe (TCE) il faut qu'ils puissent survivre dans le liquide de la zone pâteuse et qu'ils soient transportés par les mouvements de convection

dans le liquide ou par la poussée d'Archimède au niveau du liquide en surfusion devant les pointes primaires des structures colonnaires (Hansen G. 1996).

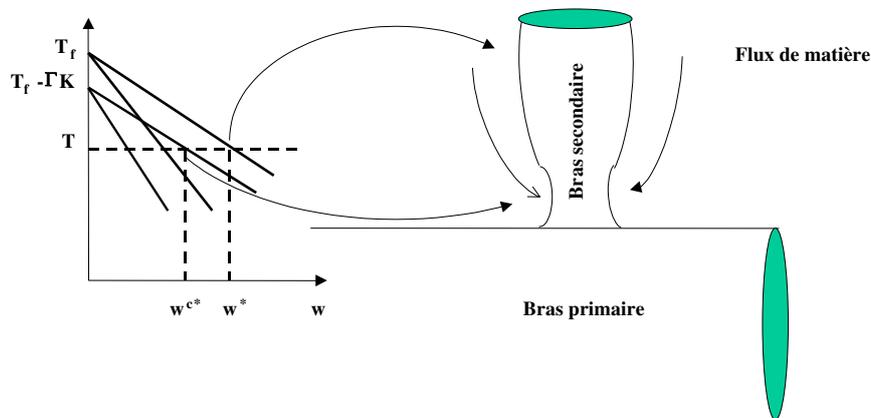


Figure I.3-4 Morphologie de la base d'un bras secondaire et effet de la courbure associée sur la température de liquidus (Rabia B. 2004).

L'importance du phénomène de fragmentation a par la suite été confirmée par des observations dans des alliages transparents (Paradies C.J 1997) avant d'être également mis en évidence dans les alliages métalliques (Yasuda H. 2004), (Jung H. 2009). Le rôle prépondérant de la convection thermosolutale dans la refusion des bras secondaires et la formation ultérieure de grains équiaxes a été depuis confirmé récemment par des études *in situ* dans des alliages métalliques à base d'Aluminium (Ruvalcaba D. 2007), (A. L. Mirihanage W.U 2012). Par ailleurs, la maturation des bras secondaires qui se situent vers la fin de la zone pâteuse a également été récemment proposée comme mécanisme possible de formation de fragments (Neumann-Heyme H. 2014).

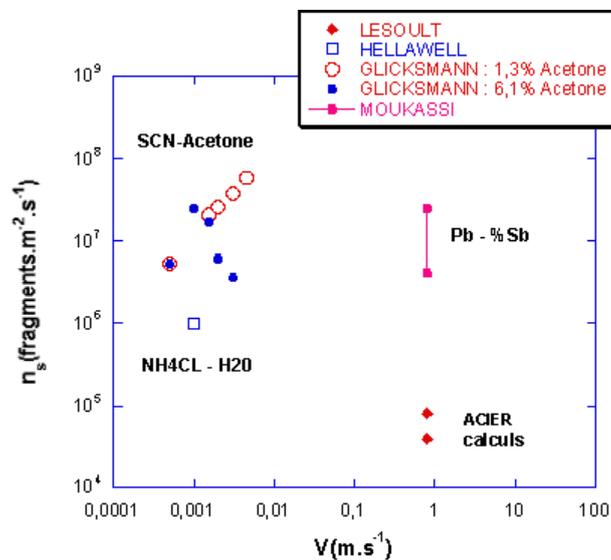


Figure I.3-5 Graphe récapitulatif des principales estimations rapportées dans la littérature sur la densité de flux de fragments cristallins en fonction du type d'alliage et de la vitesse du fluide V (Rabia B. 2004).

Enfin, si l'importance du phénomène de fragmentation a pu être mise en évidence, le nombre exact de fragments ainsi créés en fonction de l'alliage et des conditions opératoires est encore en grande partie inconnu. On reporte en Figure I.3-5, une synthèse tirée de la thèse de Rabia

(Rabia B. 2004) des principaux résultats de la littérature estimant le nombre de fragments créés. On voit que pour des vitesses du liquide entre $1 \text{ mm} \cdot \text{s}^{-1}$ et $1 \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$ (ce qui est comparable aux valeurs calculées pour la convection naturelle dans les lingots d'acier) des flux de fragments variant entre 10^6 et $10^8 \text{ grains} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ont été mesurés dans des alliages organiques. Dans l'acier des flux inférieurs à $10^5 \text{ grains} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ont pu être estimés. De plus, la convection forcée dans ce cas imposait des vitesses du fluide de l'ordre du $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$, ce qui favorise la fragmentation.

I.4. Croissance des structures

Comme on l'a vu précédemment les structures de solidification observées dans les métaux possèdent rarement une morphologie globulaire ou cellulaire. Dantzig et Rappaz (Dantzig J. 2009) montrent que la croissance d'une sphère solide devient morphologiquement instable à partir d'un certain rayon R^* proportionnel au rayon critique du germe $R_C = \frac{2\Gamma}{\Delta T_n}$. Pour une symétrie cubique, on a $R^* \approx 16R_C$. Une fois ce rayon atteint, le grain solide commence à se déstabiliser mais il faut également qu'il est le temps de développer une morphologie dendritique avant d'interagir avec les grains voisins et d'atteindre sa taille finale. Pour un alliage binaire et en supposant une vitesse de refroidissement \dot{T} constante les auteurs proposent un rayon final minimum des grains :

$$R_g^c = \left(96 \frac{D_l \Gamma}{k \Delta T_0} \frac{\Delta h_f}{c_p \dot{T}} \right)^{1/3} \quad (1.11)$$

Pour un alliage Fe-1,01 %pds C (cf. Annexe B) et pour $\dot{T} = 10 \text{ K} \cdot \text{s}^{-1}$, on obtient $R_g^c \approx 9,5 \cdot 10^{-5} \text{ m}$, ce qui correspond à une densité volumique de grains maximale (en supposant des grains sphériques) $n_c \approx 2,8 \cdot 10^{11} \text{ grains} \cdot \text{m}^{-3}$

La vitesse de croissance du grain est ensuite contrôlée par l'existence d'une surfusion dans le liquide extérieur. La surfusion la plus importante dans un alliage métallique est d'origine chimique et provient de la diffusion du soluté à l'interface. On définit généralement la sursaturation chimique $\Omega_C = \frac{(C_l^* - C_l^\infty)}{C_l^*(1-k)}$ où C_l^∞ est la concentration du liquide loin de l'interface. Ainsi, la surfusion chimique peut s'écrire :

$$\Delta T_C = -m_l (C_l^* - C_l^\infty) = m_l C_l^\infty \left(1 - \frac{1}{1 - (1-k)\Omega_C} \right) \quad (1.12)$$

Cette expression suppose que l'interface est à l'équilibre thermodynamique.

Il existe également une surfusion d'origine thermique de par la diffusion de la chaleur latente dans le liquide. On peut introduire similairement une sursaturation d'origine thermique Ω_{th} qui est reliée à la surfusion thermique ΔT_{th} par, $\Omega_{th} = \frac{c_p \Delta T_{th}}{L_f}$. Cette surfusion est généralement négligée dans les alliages où la surfusion d'origine chimique prédomine.

Par ailleurs, la courbure de l'interface modifie également la température de liquidus de l'alliage (cf. Figure I.3-4) et on peut introduire une surfusion de courbure $\Delta T_R = \Gamma \mathcal{K} = \frac{2\Gamma}{R}$ où Γ est le coefficient de Gibbs-Thompson, \mathcal{K} est la courbure, égale à $\frac{2}{R}$ pour une sphère, R étant le rayon de courbure de la surface. Pour un alliage métallique $\Gamma \sim 10^{-7} K \cdot m$ et pour une pointe de dendrite $R = R_{tip} \sim 10^{-6} m$, donc $\Delta T_R \sim 0,2 K$ ce qui est faible en comparaison de ΔT_C lors de la solidification industrielle des métaux.

Lorsque l'interface est déstabilisée, il serait trop complexe de décrire analytiquement sa forme précise (Boettinger W.J 2002). Néanmoins la vitesse de croissance d'un grain équiaxe ou colonnaire est déterminé par la vitesse de croissance des pointes des bras primaires.

A la suite des travaux de Papapetrou (Papapetrou A. 1935) , Ivantsov (Ivantsov G.P 1947) a proposé un modèle analytique permettant de décrire la croissance d'une pointe de dendrite dont la forme est supposée parabolique. Initialement proposée pour une dendrite purement thermique (sans surfusion chimique), le modèle peut être étendu aux alliages binaires. En supposant la dendrite isolée, croissante dans un liquide infini et dans un régime purement diffusif, on a alors :

$$\Omega_c = Iv(Pe_c) \quad (1.13)$$

Où $Pe_c = \frac{R_{tip} V_{tip}}{2D_l}$ est le nombre de Péclet solutal et Iv est la fonction d'Ivantsov :

$$Iv(Pe) = Pe e^{Pe} E_1(x) \quad (1.14)$$

La fonction E_1 est définie par $E_1(x) = \int_x^\infty \frac{e^{-x}}{x} dx$. L'équation (1.14) permet de déterminer une valeur de Pe_c et donc du produit $R_{tip} V_{tip}$. Afin de déterminer un seul couple de valeur, il est nécessaire d'employer une deuxième relation. La plus largement employée est dérivée de l'étude de stabilité marginale réalisée initialement par Langer et Krumbhaar (Langer J.S 1980). Les auteurs proposent de prendre comme rayon de la pointe de dendrite, l'amplitude minimale d'une perturbation de l'interface qui sera amplifiée et non plus amortie. On a alors (Dantzig) :

$$R_{tip} = \frac{\Gamma}{(\sigma^*)^2} \frac{1}{\frac{2Pe_{th}\Delta h_f}{c_p} - \frac{2Pe_c m_l C_l^\infty (1-k)}{1-(1-k)Iv(Pe_c)}} \quad (1.15)$$

Où Pe_{th} est le nombre de Péclet thermique. σ^* est appelé la constante de stabilité marginale. C'est une propriété de l'alliage et elle dépend normalement de l'anisotropie du matériau, même si cet aspect est souvent négligé en pratique et on utilise souvent $\sigma^* = \frac{1}{4\pi^2}$. Cette valeur correspond à l'approximation dite de «stabilité marginale». La valeur exacte de σ^* en fonction de l'alliage étudié est toujours le sujet de recherches (Rebow M. 2007).

Le modèle développé par Lipton et coll. (G. M. Lipton J. 1984), couramment appelé modèle LGK, intègre la relation d'Ivantsov et la stabilité marginale pour proposer un modèle de croissance des pointes de dendrite valable pour les faibles vitesses de croissance.

Pour les vitesses élevées de solidification ($V_{tip} \gg 1 \text{ cm.s}^{-1}$), Kurz et coll. (G. B. Kurz W. 1986)(modèle dit KGT) ont développé une extension du précédent modèle en prenant en compte le fait que l'hypothèse de l'équilibre thermodynamique à l'interface n'est plus valable lors de la croissance rapide. Lorsque $Pe_c \rightarrow 0$, le modèle LGK se rapproche des résultats du modèle KGT à la différence près que le modèle KGT n'inclue pas la surfusion d'origine thermique.

Les modèles précédents supposent un régime de croissance purement diffusif, et négligent donc l'influence de la convection sur la croissance des pointes de dendrites. A cause de la complexité supplémentaire qu'introduit la présence d'un écoulement et notamment sa direction par rapport à la direction de croissance, peu de modèles de croissance ont considéré jusqu'ici l'influence de la convection.

Ananth et Gill (Ananth R. 1991) ont cependant proposé une solution analytique en considérant une dendrite isolée dont la direction de croissance est exactement opposée à l'écoulement. Alors dans ce cas, les auteurs proposent au lieu de l'équation (1.13) :

$$\Omega_c = 2Pe_c \int_1^{\infty} \exp \left[-\ln x + (1-x^2)Pe_c - \frac{2.Pu}{E_1(Re_{tip})} (1-x^2 + (1+x^2)\ln x) \right] dx \quad (1.16)$$

Avec $Pu = \frac{Re_{tip} |\vec{v}_l - \vec{v}_s|}{2D_l}$ et $E_1(Re_{tip}) = \int_{Re_{tip}}^{\infty} \left(\frac{e^{-x}}{x} \right) dx$. v_l et v_s sont les vitesses du liquide et du solide respectivement et donc $|\vec{v}_l - \vec{v}_s|$ est la vitesse relative du liquide par rapport au solide.

A la différence du modèle d'Ananth et Gill, le modèle de Gandin de coll. (G. G. Gandin Ch.-A. 2003) propose de prendre en compte l'influence de l'orientation relative de l'écoulement et de la direction de croissance. Ce modèle repose sur l'idée de couche limite convective développée par Cantor et Vogel (Cantor B. 1977) dans le cadre de la croissance d'une pointe de dendrite isolée.

Les auteurs proposent alors :

$$\Omega_c = Pe_c e^{Pe_c} \left[E_1(Pe_c) - E_1 \left(Pe_c \left\{ 1 + \frac{4}{A(2Re_{tip})^B Sc^C \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)} \right\} \right) \right] \quad (1.17)$$

Où $Sc = \frac{\nu}{D_l}$ est le nombre de Schmidt et $\theta = (\widehat{\vec{v}_{tip}; \vec{v}_l - \vec{v}_s})$ est l'angle entre la direction de croissance et celle de la vitesse relative du liquide.

I.5. Résultats expérimentaux concernant la Transition-Colonnaire-Equiaxe (TCE)

La relation entre la position de la TCE et les paramètres généraux de coulées est complexe. Dans le chapitre suivant, on a listé quelques études expérimentales qui indiquent les influences générales de divers paramètres de coulée et d'alliage. Le Tableau 1 résume les différents paramètres considérés ici et qui sont présentés plus en détail par la suite.

Tableau 1 : Effets de divers paramètres sur l'étendue relative de la zone colonnaire, tiré de (Flood S.C, ASM Handbook - Casting 1988) p. 284.

Paramètre de coulée	Effets sur la TCE
Composition en soluté C_0 et coefficient $Q = -m_l C_0(1 - k)$	Quand C_0 et Q augmente, l'étendue de la zone colonnaire diminue.
Surchauffe initiale ΔT_i	Quand ΔT_i augmente, l'étendue de la zone colonnaire augmente dans les petits systèmes. L'effet est moins clair pour les systèmes de grande taille.
Ajout d'inoculants	L'ajout d'inoculants est susceptible de diminuer la taille de la zone colonnaire.
Convection (naturelle ou forcée)	Une convection plus importante diminue la taille de la zone colonnaire.
Taille du système	Quand la taille du système augmente, l'étendue relative de la zone colonnaire diminue. La hauteur du système semble être un paramètre plus sensible que la largeur

I.5.1 Influence des paramètres liés à l'alliage

Il existe dans la littérature un certain nombre d'études expérimentales en solidification dirigée sur des alliages métalliques binaires qui indiquent une réduction de la taille de la zone colonnaire lorsque la composition initiale de soluté C_0 augmente. On peut notamment citer celles réalisées par Weinberg et coll. (Mahapatra R.B 1987), (Ziv I. 1989) ainsi que Siqueira et coll. (Siqueira C.A 2002), (Siqueira C.A 2003), (Silva J.N 2009) sur des alliages Sn-Pb et Al-Cu et par Ares et Schvezov (Ares A.E 2000) sur des alliages Sn-Pb.

Néanmoins aucune tentative n'est réalisée pour corrélérer quantitativement C_0 à la position de la TCE. Ces travaux essaient plutôt de trouver une corrélation entre les conditions thermiques locales au niveau du front colonnaire et le moment de la TCE.

Lors de la solidification non-dirigée sur des lingots de petites tailles, la même tendance a pu être vérifiée (Biloni H. 1968). Par ailleurs, les expériences de Gandin (Gandin Ch.-A 2000) sur des alliages Al-Si confirment également une diminution de la taille de la zone colonnaire avec la teneur en Silicium.

Certains auteurs (Doherty R.D 1977), (S. S. Spittle J.A 1995) ont également tenté de corrélérer la taille des grains au paramètre $P = -m_l C_0 \left(\frac{1-k}{k} \right)$ ou au paramètre de restriction de croissance $Q = kP$. Si on suppose les pentes de liquidus et de solidus constante $P = \Delta T_0$, l'intervalle de solidification de l'alliage à l'équilibre complet. Les auteurs trouvent une corrélation raisonnable entre la diminution de P et des tailles de grains plus petites. Tarshis et coll. (Tarshis L.A 1971)

trouvent notamment une diminution de l'étendue de la zone de colonnaire lorsque P augmente. Par contre il faut souligner que les corrélations trouvées dépendent fortement de l'alliage considéré et que les alliages sont de plus inoculés, donc le mécanisme de germination hétérogène est favorisé comme source de grains équiaxes.

Les mécanismes proposés pour expliquer ces résultats diffèrent suivant qu'on considère un alliage inoculé ou non. Dans le cas d'un alliage inoculé, une concentration C_0 plus élevée entraîne une surfusion chimique devant le front plus importante lors du rejet de soluté et donc une germination plus efficace des grains équiaxes, ce qui avait déjà été prévu par Tiller et coll. (Tiller W.A 1953). Par ailleurs, le facteur $Q = -m_l C_0(1 - k)$ influence directement la vitesse de croissance des structures. En première approximation, pour des grains sphériques, la vitesse de croissance des structures varie comme $\frac{1}{Q}$ pour une distribution de densités de germes et une surfusion donnée et la taille finale de grains varie comme $\frac{1}{\sqrt{Q}}$. (B. A. Greer A.L 2000).

Dans le cas où l'alliage n'est pas inoculé comme les coulées d'acier et exception faite de l'influence de C_0 et Q sur la croissance des structures, il est probable que l'enrichissement de soluté va favoriser la convection thermosolutale (notamment dans la zone pâteuse) et donc la fragmentation (Spinelli J.E 2004).

I.5.2 Influence des conditions thermiques

Les travaux réalisés sur des lingots de tailles réduites ont montré que l'augmentation de la surchauffe initiale ΔT_i augmente également l'étendue de la zone colonnaire (Chalmers B. 1963), (Spittle J.A 2006). Cette tendance s'explique facilement dans le cas où l'on accepte le scénario de germination hétérogène comme origine des grains équiaxes. Par ailleurs, la présence de surchauffe s'accompagne d'une température du bain liquide supérieure au liquidus et des gradients thermiques plus importants devant le front. En conséquence, l'étendue de la zone en surfusion est moins importante et la croissance des structures équiaxes est défavorisée.

De même, si on considère la nucléation de type « Big Bang » (Chalmers B. 1963), on comprendra que la présence de surchauffe va favoriser la refusion des cristaux arrachés initialement près du moule et donc va défavoriser la formation d'une zone équiaxe.

Néanmoins Morando et coll. (Morando R. 1970), en se basant sur une série d'expériences sur des lingots en Al-2%*pds* Cu de tailles croissantes, ont souligné que cette observation ne pouvait pas être extrapolée aux systèmes de tailles plus importantes. En effet, à partir de leurs observations, la surchauffe semble ne pas avoir d'effet notable sur la TCE pour les lingots cylindriques dont le diamètre atteint 16 cm pour 23 cm de hauteur. Ceci s'explique par le fait que dans les coulées non-inoculées, c'est la fragmentation des dendrites qui est probablement la source principale de grains tandis que le mécanisme de « Big Bang » ne peut que contribuer à la formation d'une partie du cône de sédimentation en bas du lingot (H. M. Fredriksson H. 1972). Par ailleurs on peut remarquer que puisque la surchauffe entraîne des gradients thermiques plus importants, elle va également amplifier les phénomènes de convection naturelle. En effet, le nombre de Rayleigh thermique du bain liquide s'écrit $Ra = \frac{g\beta\Delta T}{D_T\nu} L^3$ où ν est la viscosité cinématique, D_T la diffusivité thermique et L la taille caractéristique du bain liquide, par exemple sa largeur. Puisque $\Delta T = (T_{bain} - T_{front})$, on voit que

l'intensité de la convection va augmenter avec la surchauffe, ce qui favorise la fragmentation. Il est probable que la relation entre surchauffe et TCE dépend aussi du rapport surface/volume du moule considéré, ce qui va déterminer la vitesse à laquelle la surchauffe est évacuée (Spittle J.A 2006).

Quelques études expérimentales en solidification unidirectionnelle (Mahapatra R.B 1987), (Ziv I. 1989) ont pu montrer que l'étendue de la zone colonnaire augmente avec l'intensité de l'extraction de chaleur au moule, caractérisée par la valeur du coefficient de Fourier $h[W.m^{-2}.K^{-1}]$. Ceci s'explique également dans les lingots de petite taille par une augmentation du gradient thermique dans le solide et devant le front de croissance lorsque h augmente.

Par ailleurs Doherty et coll. (Doherty R.D 1977) ont remarqué que le préchauffage du moule a un effet similaire à l'augmentation de la surchauffe avec une zone colonnaire plus étendue. Comme pour la surchauffe cette tendance ne peut être étendue à des coulées de plus grande taille. Ainsi, comme le remarquent les auteurs, pour leurs lingots la capacité calorifique totale du moule $C_p^{moule}[J.K^{-1}] = m_{moule}c_p$ est égale à plusieurs fois celle de l'alliage d'aluminium utilisé où c_p est la capacité thermique massique et m_{moule} est la masse du moule.

Cette synthèse des résultats de la littérature permet de dégager un constat important : en l'absence d'inoculation, les deux mécanismes principaux de formations des grains, sont la germination hétérogène pendant le remplissage (phénomène de « Big-Bang ») et la fragmentation du tissu dendritique.

I.5.3 Influence de la convection naturelle

Dans les années 60 (Cole G. S 1965) et 70 (Morando R. 1970) plusieurs études ont déjà pu remarquer l'effet qualitatif de la présence de convection sur la TCE. En bloquant mécaniquement la convection ou en la contrôlant à l'aide d'un champ magnétique statique, ces expériences ont pu mettre en évidence que la convection favorise la formation d'une zone équiaxe.

Tout d'abord la convection favorise la fragmentation et le transport des fragments depuis la zone pâteuse jusque devant le front. De plus, la convection favorise l'élimination de la surchauffe et abaisse le gradient thermique dans le liquide devant le front et donc favorise la survie des grains équiaxes dans le bain liquide.

Par la suite, on peut noter plusieurs études portant sur l'effet de la convection forcée par induction magnétique (Griffiths W.D 1996), (Willers B. 2005) ou vibration mécanique (Limmaneevichitr C. 2009), (Guo H.M 2009). Ces études tendent également à prouver que l'augmentation de la convection favorise les structures équiaxes.

Néanmoins dans le cas de la convection forcée et à la différence de la convection naturelle, ce n'est parfois pas des fluctuations thermiques ou la refusion solutale qui sont à l'origine de la fragmentation (Eckert S. 2005) mais la déformation mécanique due aux forces magnétiques (Li X. 2012).

Pour essayer de comprendre les effets du mouvement du liquide et du solide sur la formation des grains équiaxes et sur la TCE, Spinelli et coll. (Spinelli J.E 2004) ainsi que Silva et coll. (Silva J.N 2009) ont réalisé la solidification directionnelle d'alliages Sn-Pb dans des configurations stables et instables d'un point de vue de la convection thermosolutale. Leur conclusion est que la convection

naturelle favorise la formation de structures équiaxes par fragmentation dans la zone pâteuse colonnaire et par fragmentation des grains équiaxes eux-mêmes par la suite. Cependant, même dans le cas d'une configuration stable on observe tout de même de la convection naturelle dans la zone pâteuse (Reinhart G. 2012) .

De manière à isoler complètement les effets de la gravité, Papazian et Kattamis (Papazian J.M 1980) et Johnston et coll. (Johnston M.H 1977) ont étudié la solidification d'un alliage organique $\text{NH}_4\text{Cl-H}_2\text{O}$ en microgravité à bord d'une fusée-sonde. Ils ont ainsi confirmé que la fragmentation des bras secondaires des dendrites était beaucoup plus efficace sur la TCE en présence de fragments. En microgravité, l'absence de convection conduit à une extraction de chaleur beaucoup moins efficace dans le liquide et donc à des gradients thermiques plus importants près du front de solidification. Par ailleurs, une proportion négligeable des fragments formés est transportée devant le front et aucune TCE ni aucun freckles ne sont observés, à la différence des échantillons solidifiés au sol.

Des études par Camel et coll. ont également été menées sur des alliages métalliques affinés Al-Cu (C. D. Dupouy M.D 2000) et Al-Ni (Camel D. 2001), (C. D. Dupouy M.D 2002) . Les études menées en microgravité sur un four Bridgman ont consisté à augmenter la vitesse de solidification V pour passer d'une structure colonnaire à équiaxe (car alors G diminue puisque $\dot{T} = G.V$ est constant). En microgravité, aucune véritable structure colonnaire n'est observée car les particules affinantes conservent une très bonne efficacité, même pour les plus faibles surfusions devant le front. Des grains « équiaxes orientés » dans la direction de tirage sont obtenus mais aucun mécanisme de sélection n'est constaté. Pour les expériences au sol, les auteurs obtiennent une TCE brusque pour un vitesse de tirage V plus élevée que celle en microgravité. Ceci est attribué à la décantation dans le liquide intragranulaire colonnaire des particules affinantes les plus grosses (qui sont également les premières à germer). Par ailleurs les grains équiaxes qui viennent de se former sédimentent également entre les bras colonnaires et donc la sédimentation des grains équiaxes peut paradoxalement favoriser la structure colonnaire. Ce phénomène a pu être observé in-situ sur un alliage affiné Al-Ni (Nguyen-Thi H. 2007).

I.5.4 Influence d'autres paramètres

L'influence de la quantité et de l'efficacité des particules inoculantes a été le sujet de plusieurs études expérimentales (Tarshis L.A 1971), (Vandyoussefi M. 2002), (D. A. Sturz L. 2005), (Mirihanage W.U. 2012), (Liu Z. 2014). On ne détaillera pas ces études car l'on s'intéresse ici à des coulées d'acier non-inoculé. On remarque simplement qu'en accord avec les modèles analytiques de TCE, ces expériences confirment que l'augmentation du nombre de germes dans le liquide favorise les structures équiaxes, pour peu que la surfusion devant le front colonnaire soit suffisante pour activer les germes.

Par ailleurs, des expériences sur des lingots de dimensions croissantes allant jusqu'à quelques dizaines de centimètres (Morando R. 1970) (Laren I. 1972) indiquent que l'étendue relative de la zone colonnaire diminue avec la taille des lingots. Ceci est également à mettre en relation avec le nombre de Rayleigh Ra du bain liquide qui augmente avec le cube des dimensions de la coulée et favorise la fragmentation et l'évacuation de la surchauffe. Il semble que cette tendance soit plus sensible à la hauteur de coulée qu'à sa largeur même si aucun mécanisme n'est avancé pour

l'expliquer (Flood S.C, ASM Handbook - Casting 1988).

I.6. Critères et mécanismes de la TCE

I.6.1 Critères de TCE sans mécanisme proposé

Il existe un certain nombre d'études expérimentales dans la littérature dont le but a été de corréler la TCE avec un ou plusieurs paramètres de coulée. Ces expériences sont généralement associées à des calculs numériques 1D avec un modèle de solidification colonnaire et les travaux de la littérature identifient le plus souvent le gradient $G[K.m^{-1}]$ ou la vitesse du front $V[m.s^{-1}]$ comme paramètre critique lors de la TCE. Certaines études ne corroborent cependant pas un mécanisme de blocage du front en particulier, évoquant uniquement de manière générale la compétition entre croissance colonnaire et équiaxe comme cause de la TCE. Parfois, une comparaison très qualitative avec le modèle de Hunt (mécanisme de blocage mécanique, voir Chapitre I.6.2.a) est présentée mais ne suffit pas à justifier que c'est le bien le mécanisme responsable de la TCE.

A la suite des travaux de Tiller et coll. (Tiller W.A 1953) sur la surfusion constitutionnelle au front, plusieurs études expérimentales ont d'abord commencé en cherchant une valeur critique de $G^a V^b$ en-deçà de laquelle on observe la TCE, a et b étant des paramètres (Spittle J.A 2006). Cependant, les paramètres a et b ainsi que la valeur critique trouvée sont variables en fonction des alliages considérés. Ziv et Weinberg (Ziv I. 1989) trouvent un critère sur le gradient thermique G minimal au moment de la TCE et Kim et Grugel (Kim S. 1992) une valeur critique de la vitesse V sur des alliages Pb-Cu en solidification dirigée.

Par la suite, on peut citer les travaux d'Ares et Schvezov (Ares A.E 2000) sur des alliages Sn-Pb en solidification dirigée trouvent des critères à la fois sur la valeur critique de G et V . Les auteurs constatent parfois des gradients thermiques nuls voire négatifs au moment de la TCE (jusqu'à $G = -80 K.m^{-1}$). La TCE est alors accompagnée d'une recalescence vers la zone de transition. Enfin, les études menées par Siqueira et coll. sur des alliages Al-Cu (Siqueira C.A 2002) et Sn-Pb (Siqueira C.A 2003) ainsi que Canté et coll. (Canté M.V 2007) sur des alliages Al-Ni et Al-Sn proposent un critère sur le taux de refroidissement au front $\dot{T} = G.V$ minimal au moment de la TCE.

Cependant, ces études sont basées sur la recherche pragmatique d'un critère sur une valeur critique d'un paramètre de coulée et non sur une idée physique. En conséquence, les résultats obtenus dépendent à la fois des conditions de solidification ainsi que de l'alliage considéré.

I.6.2 Mécanismes de TCE et critères associés

I.6.2.a Compétition de croissance et mécanisme de blocage « mécanique »

Le mécanisme de blocage mécanique repose sur l'idée de savoir si au cours de la solidification, les grains équiaxes présents devant le front colonnaire seront suffisants en nombre et en taille pour provoquer la TCE par contact direct avec les structures colonnaires. Si ce n'est pas le cas, ils seront intégrés à la structure colonnaire et la structure résultante est mixte colonnaire-équiaxe.

Tiller et coll. (Tiller W.A 1953) sont les premiers à calculer la taille et l'intensité de la zone en surfusion devant un front plan en régime stationnaire. Pour un alliage binaire, un gradient G linéaire devant le front et un régime purement diffusif, la condition d'existence d'une surfusion chimique est :

$$\frac{G}{V} < \frac{m_l C_0}{D_l} \frac{1-k}{k} \quad (1.18)$$

Winegard et Chalmers (Winegard W.C 1954) reprennent cette condition pour proposer un critère sur la taille de la zone en surfusion (et donc sur la valeur de $\frac{G}{V}$) afin de prédire la TCE.

Le modèle de Tiller a été étendu par Witzke et coll. (Witzke S. 1981) en présence de convection thermique. En déterminant une couche limite de diffusion dont la taille dépend de la convection, Witzke et coll. proposent de même que la TCE doit avoir lieu lorsque la taille et l'intensité de la zone de surfusion constitutionnelle favorise suffisamment la germination et la croissance des grains équiaxes.

Remarquons que la même idée a été récemment reprise par Browne et coll. (Browne D.J 2005) dans le cadre de leur modèle de front-tracking (voir Chapitre I.7.1). Les auteurs introduisent un « potentiel de germination » des grains équiaxes qui est simplement l'intégration de l'intensité de la surfusion constitutionnelle le long de l'étendue spatiale de cette dernière. Un exemple est représenté en 2D sur la Figure I.6-1 où le potentiel de nucléation est le volume de la « crête » représentée en amont du front colonnaire. Les auteurs suggèrent que la TCE a le plus de probabilité de se produire lorsque ce potentiel est à son maximum au cours de la solidification.

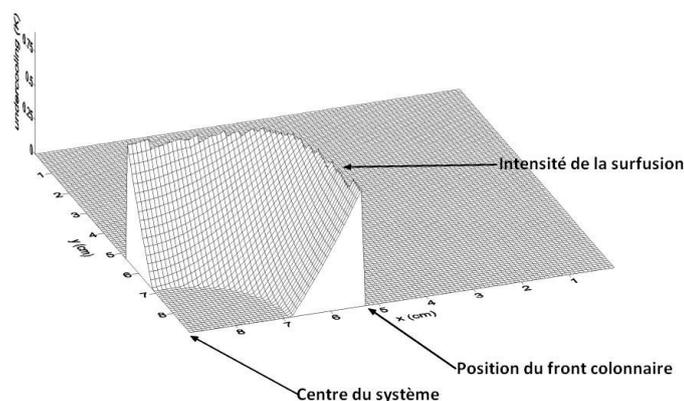


Figure I.6-1 Représentation pour une simulation en 2D en solidification colonnaire pure de l'étendue et l'intensité de la zone en surfusion présente devant le front colonnaire. D'après (Browne D.J 2005).

Cette idée a été étendue en présence de convection naturelle (Banaszek J. 2007) pour une solidification purement colonnaire et montre que le potentiel de nucléation est plus important en présence de convection. Par ailleurs les prédictions du modèle pour la TCE présentent des similitudes avec le critère basé sur les travaux de Gandin (McFadden S. 2009) (voir Chapitre I.6.2.c).

Les modèles et critères présentés précédemment peuvent être critiqués sur plusieurs points. Premièrement, aucune modélisation de la croissance des grains équiaxes n'est proposée. Par ailleurs,

seul le mécanisme de germination hétérogène est considéré comme source potentielle des grains équiaxes. Enfin, ces mécanismes ne considèrent pas le mouvement des grains équiaxes.

Hunt (Hunt J.D 1984) a proposé un modèle analytique et numérique en 1D qui prend en compte la croissance des grains équiaxes devant le front.

La Figure I.6-2 schématise les principales hypothèses du modèle analytique de Hunt. Le gradient thermique devant le front G est supposé constant et unidirectionnel. Le régime est stationnaire, donc le front se déplace à la même vitesse que les isothermes à une vitesse constante V_{tip} .

La source des grains équiaxes est la germination hétérogène, considérée comme instantanée et totale. On considère donc une seule classe de germes de densité $n_{eqx} [grains.m^{-3}]$ qui forme des grains dès qu'on atteint la surfusion ΔT_N . Une classe de germes correspond ainsi à une taille donnée des particules affinites qui forment des grains pour une surfusion critique donnée. Le modèle de Hunt a également été étendu pour des distributions normales (gaussiennes) (B. V. Martorano M.A 2009) et log-normales (Quested T.E 2005) des tailles de germes.

Les grains équiaxes sont également supposés fixes et sont considérés sphériques. Dans ce modèle, on néglige également la taille de la couche de diffusion du soluté ainsi que la libération de chaleur latente des grains équiaxes au cours de leur solidification.

Pour relier la vitesse du front et la croissance des grains équiaxes à la surfusion locale, le modèle cinétique de Burden et Hunt (Burden M.H 1974) est utilisé pour les deux types de structures,

on a donc $V = A. \Delta T_c^n$ où ici $A = \frac{D_l}{8.m_l C_0 (k-1)\Gamma}$ et $n = 2$.

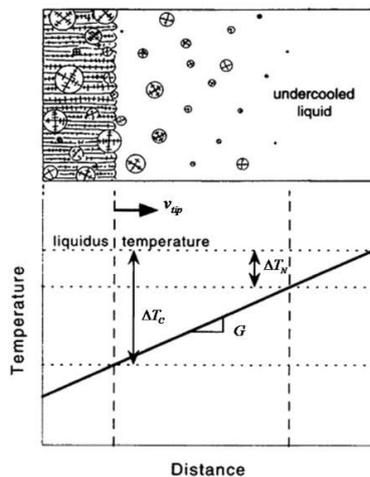


Figure I.6-2 Schéma de la situation envisagée dans le cadre du modèle de Hunt (Hunt J.D 1984). Le gradient G est constant en amont du front et une surfusion constitutionnelle ΔT_c est présente devant le front, qui avance à la vitesse notée ici v_{tip} . ΔT_N est la surfusion de germination des grains équiaxes.

En considérant les hypothèses évoquées ci-dessus, on peut résumer le critère de Hunt comme une comparaison entre deux temps caractéristiques t_{col} et t_{eqx} . Pour les structures colonnaires, t_{col} correspond au temps que met le front colonnaire pour traverser la distance sur la Figure I.6-2 entre sa position actuelle et l'isotherme de liquidus. Pour les grains équiaxes, t_{eqx} est le temps que mettent les grains équiaxes pour occuper une fraction limite g_{Hunt} du volume devant le front.

Si $t_{eqx} < t_{col}$, la fraction de grains équiaxes g_{eqx} devant le front dépasse g_{Hunt} et alors le front est considéré comme bloqué et la TCE a lieu. En se basant sur un argument géométrique où il est supposé que les grains qui présentent un « rapport d'allongement » (rapport de la dimension la plus grande du grain sur la dimension la plus petite) supérieur à 2 sont des structures colonnaires, Hunt propose de prendre $g_{Hunt} = 0,49$.

Si $t_{col} < t_{eqx}$, le front n'est pas considéré comme bloqué mais les grains équiaxes sont alors intégrés au front colonnaire et la structure est mixte. Hunt définit également une fraction de grains équiaxes en-deçà de laquelle la structure peut être considérée comme purement colonnaire, si $g_{eqx} < 0.01$ devant le front.

La condition $t_{eqx} < t_{col}$ mène au final à la condition suivante pour la TCE :

$$G < \frac{1}{(n+1) \left(\frac{3g_{Hunt}}{4\pi} \right)^{1/3}} n_{eqx}^{1/3} \Delta T_c^{col} \left[1 - \left(\frac{\Delta T_N}{\Delta T_c^{col}} \right)^{n+1} \right] \quad (1.19)$$

Par ailleurs, dans l'équation (1.19) on sait que $\Delta T_c^{col} = \left(\frac{V}{A} \right)^{1/n}$. On voit donc que les deux variables G et V permettent de déterminer une carte de structures qui sépare une zone mixte et une zone purement équiaxe. Les potentialités du modèle sont de pouvoir décrire de manière qualitative l'influence des paramètres tels que n_{eqx} , ΔT_N ou encore C_0 (intervenant dans le coefficient A de la cinétique de croissance) sur la TCE.

A titre d'exemple, on a représenté en Figure I.6-3.a et Figure I.6-3.b les résultats du modèle de Hunt sur un acier de nuance 100C6 (simplifié par le binaire Fe-1,01 % pds C). On a appliqué ici le modèle de cinétique de pointe LGK (G. M. Lipton J. 1984) pour modéliser les vitesses de croissance. Les valeurs des vitesses représentées correspondent aux vitesses moyennes que l'on peut constater lors des simulations sur un lingot d'acier et on a gardé la valeur $g_{Hunt} = 0,49$. Sur la Figure I.6-3.a on voit que, logiquement, quand n_{eqx} augmente, on favorise la zone équiaxe. Sur la Figure I.6-3.b on constate que les structures colonnaires sont favorisées lorsque la surfusion de germination ΔT_N augmente. De plus, si $\Delta T_c^{col} < \Delta T_N$ alors les structures seront purement colonnaires.

Le modèle de Hunt est souvent utilisé avec des modèles de cinétique de pointes différents (Gaümann M. 1997), (B. C. Martorano M.A 2003). Pour comparaison, sur la Figure I.6-3.c, on compare les résultats du modèle de Hunt pour différents modèles de cinétique de pointe : le modèle LGK (G. M. Lipton J. 1984), un modèle de pointe de dendrite hémisphérique (F. D. Kurz W. 1992) où $V = \frac{D_l}{\pi^2 m_l C_0 (k-1) \Gamma} \Delta T^2$ et le modèle de Gandin et coll. (G. G. Gandin Ch.-A. 2003) qui prend en compte l'influence de la convection. Pour le modèle de Gandin et coll., on a choisi $\theta = \frac{\pi}{2}$ comme l'angle entre la direction de croissance des pointes de dendrites et la direction de l'écoulement. On a aussi pris $U_{rel} = \|\vec{v}_l - \vec{v}_s\| = 5 \text{ mm.s}^{-1}$ pour la vitesse relative du liquide, ce qui correspond aux valeurs maximales que l'on peut constater lors de la solidification des lingots d'acier.

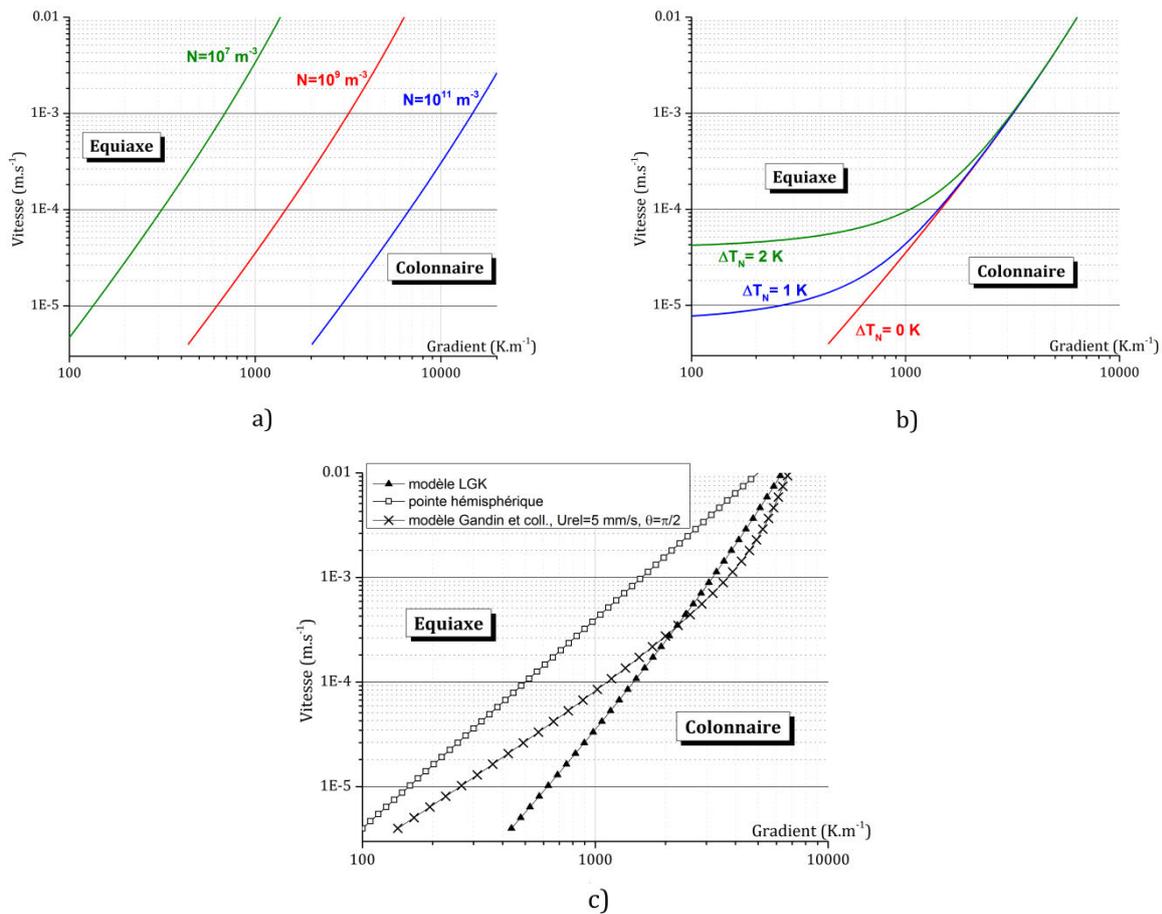


Figure 1.6-3 Cartes de structures selon le modèle de Hunt. a) Séparation entre la zone équiaxe et la zone mixte colonnaire pour différentes densités de grains avec $\Delta T_N \approx 0 K$. b) Séparation entre les mêmes zones pour différentes surfusions de nucléation avec $n_{eqx} = 10^9 grains.m^{-3}$. c) Séparation entre les mêmes zones pour différents modèles de cinétique de pointe (LGK (G. M. Lipton J. 1984), pointe hémisphérique (F. D. Kurz W. 1992), Gandin et coll. (G. G. Gandin Ch.-A. 2003)) avec $\Delta T_N \approx 0 K$ et $n_{eqx} = 10^9 grains.m^{-3}$.

On constate que les résultats peuvent être quantitativement très différents (particulièrement le choix d'une pointe hémisphérique ou parabolique) ce qui illustre l'impact du modèle de cinétique sur le calcul de la croissance des structures (Bedel M. 2014).

Il est intéressant de remarquer que malgré le fait que la valeur du paramètre $g_{Hunt} = 0,49$ proposée dans le modèle original repose sur des arguments géométriques et ne possède pas de réelle justification physique, il y a assez peu de discussion dans la littérature sur la valeur de g_{Hunt} . Biscuola et Martorano (Biscuola V.B 2008), en se basant sur les résultats d'un modèle d'automate cellulaire, proposent de prendre $g_{Hunt} = 0,2$.

Beckermann et coll. (B. C. Martorano M.A 2003), en se basant sur les résultats de leur modèle à prise de moyenne, argumentent que le critère de Hunt ne devrait pas être utilisé dans le cas général (voir le chapitre suivant sur le blocage solutal). Une argument similaire amène Mirihanage et Browne (B. D. Mirihanage W.U 2011) à considérer $g_{Hunt} = 1$ dans leur modèle.

Par ailleurs, comme le font remarquer Rappaz et coll. (C. C. Rappaz M. 1994), le modèle de Hunt ne considère pas l'existence du gradient thermique à l'échelle des grains équiaxes. Si le gradient thermique est suffisamment important, les grains seront fortement allongés dans la direction opposée au flux de chaleur. On peut ainsi baser les prédictions de la TCE sur le facteur d'allongement

de ces grains, ce qui est aussi la méthode utilisée dans les modèles CAFE (automate cellulaire) pour déterminer la position de la TCE (R. M. Gandin Ch.-A. 1994).

Fredriksson et Hillert (H. M. Fredriksson H. 1972) ont également proposé que la TCE dans les lingots pouvait être expliquée par le blocage direct des structures colonnaires par des grains équiaxes de taille suffisante. Dans les lingots de taille industrielle (d'une hauteur de l'ordre du mètre), la TCE a d'abord au niveau du cône de sédimentation en bas du lingot et par la suite les grains équiaxes ont une taille suffisante pour adhérer au front et le blocage du front colonnaire se fait progressivement du bas vers le haut du lingot.

Par la suite, Fredriksson et Olsson (O. A. Fredriksson H. 1986) ont mesuré l'évolution de la température dans le bain liquide d'un lingot d'acier. Ils proposent alors de relier le moment de la TCE au minimum de température T_{bain} , juste avant la recalescence observée expérimentalement (voir Figure I.6-4.b). Pour Fredriksson, la TCE a déjà eu lieu quand la recalescence est observée car cette dernière indique que la taille des grains est suffisante, la chaleur latente dégagée étant alors supérieure au flux de chaleur évacué. De plus, le phénomène de recalescence augmente la différence de température entre le bain liquide et le front ce qui active la convection thermique et donc la fragmentation. Les mesures réalisées sur le lingot indiquent par ailleurs qu'à ce stade la majeure partie du puits liquide est déjà en surfusion, quelle que soit la surchauffe de départ.

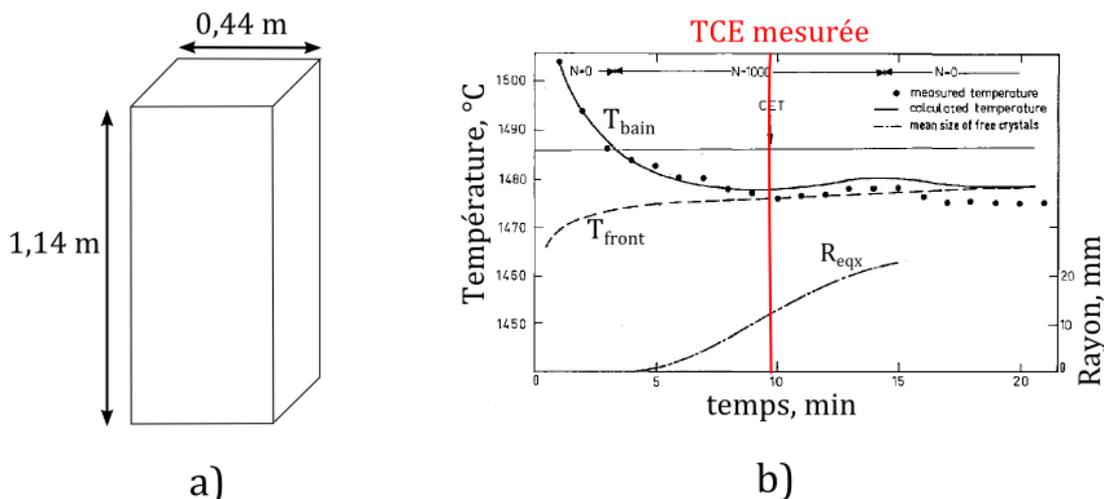


Figure I.6-4 a) Dimensions du lingot simplifié étudié constitué d'acier binaire Fe-0,47 %pds C. b) Résultats numériques et expérimentaux pour l'évolution de la température du bain liquide. La température du front calculée ainsi que le rayon des grains équiaxes sont aussi indiquées, d'après (O. A. Fredriksson H. 1986).

Fredriksson et Olsson ont également développé un modèle numérique en OD, appliqué à un lingot d'acier de nuance Fe-0,47 %pds C et de géométrie simplifiée schématisée sur la Figure I.6-4.a. Le modèle suppose que la vitesse du front colonnaire peut être exprimée en fonction du temps par une relation du type $V_{front} \sim \frac{1}{\sqrt{t}}$. Cette vitesse peut être également exprimée en fonction de la surfusion au front par $V_{front} = A \cdot (\Delta T_c^{col})^2$. Le modèle prend en compte la convection thermique en définissant une couche limite $\delta \sim (T_{bain} - T_{front})^{1/4} y^{-1/4}$ où y est la distance à partir du haut du lingot mais il ne prend pas en compte le mouvement des grains équiaxes. Les grains équiaxes sont supposés sphériques et ont une fraction de solide interne constante $g_{si} = 0,3$. Une seule classe de germe n_{eqx} est considérée, activée pour une surfusion de germination $\Delta T_N = 0 K$. Les températures simulées par le modèle, indiquées sur la Figure I.6-4.b permettent de retrouver les

mesures expérimentales, particulièrement avant la TCE. On remarque que le paramètre essentiel du modèle reste n_{eqx} et qu'ici $n_{eqx} = 10^3 \text{ grains.m}^{-3}$. Cette densité correspond à des tailles finales de grains très grandes, avec $R_f = \left(\frac{3}{4\pi n_{eqx}}\right)^{1/3} \approx 6 \text{ cm}$. Ceci étant dit, le modèle n'est pas dédié au calcul de l'évolution des grains équiaxes après la TCE. Au moment de la TCE, le rayon calculé est de 12 mm (cf. Figure I.6-4.b).

Il est intéressant de voir si ce critère, basé sur un calcul macroscopique sur l'ensemble du bain liquide, prédit la TCE de manière comparable au modèle de Hunt (Hunt J.D 1984).

Pour ce faire, on a repris dans la suite les propriétés et les dimensions du lingot d'acier de nuance

Fe-0.47 %pds C utilisé par Fredriksson (O. A. Fredriksson H. 1986) dans son étude.

Sur un graphe (G, V) on a tracé sur la Figure I.6-5 la limite prédite par le modèle de Hunt entre les structures équiaxes et colonnaires (mixtes). On a repris les valeurs des paramètres utilisées par Fredriksson, en particulier n_{eqx} et ΔT_N . Pour le modèle de Fredriksson, on peut représenter les lieux des valeurs de G et V au cours du temps. La courbe paramétrée $(G(t), V(t))$ dépend de la hauteur h à laquelle on se place car on a $G = \frac{T_{bain} - T_{front}}{\delta}$. Lorsque $h \rightarrow H$ (la hauteur totale du lingot) alors G diverge car $\delta \rightarrow 0$. Il est donc probable que le modèle de Fredriksson ne soit plus valable vers le haut du lingot.

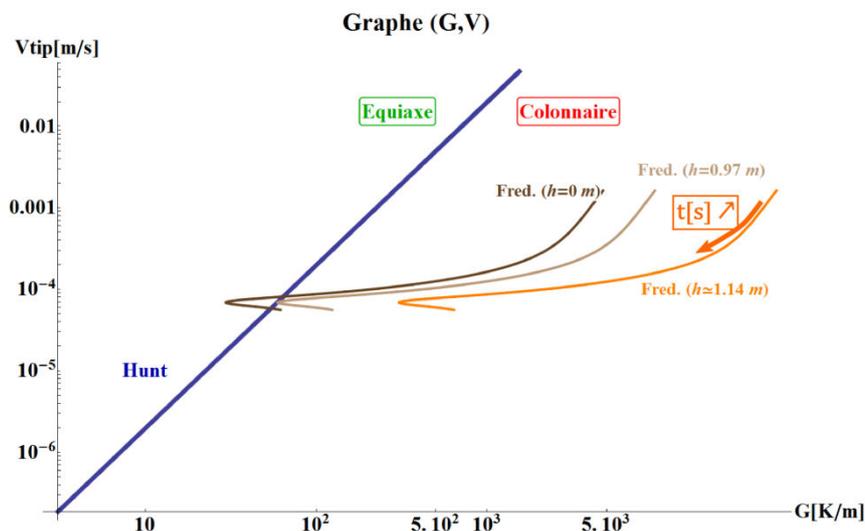


Figure I.6-5 En bleu, courbe de Hunt (Hunt J.D 1984) entre la zone équiaxe et la zone colonnaire mixte pour $\Delta T_N \approx 0 \text{ K}$ et $n_{eqx} = 10^6 \text{ grains.m}^{-3}$. Pour les même valeurs de paramètres, on a tracé au cours du temps l'évolution de (G, V) avec le modèle de Fredriksson (O. A. Fredriksson H. 1986) pour différentes hauteurs. L'évolution temporelle se fait à partir du haut des courbes. Le point de rebroussement correspond au moment de la TCE d'après le modèle.

Sur la Figure I.6-5, on voit que les courbes $(G(t), V(t))$ possèdent toutes un point de rebroussement. C'est à ce moment, où G est minimal localement, que la TCE a lieu d'après le critère de Fredriksson.

Les deux modèles seront en accord si ce point de rebroussement coïncide avec le passage de la zone colonnaire à la zone équiaxe, telles que délimitées par la droite de Hunt (en bleu).

On constate d'abord que les prédictions ne peuvent pas être comparés si on se trouve à moins de 17 cm du haut du lingot (pour $h < 0,97 m$) car alors on se situe uniquement dans la partie colonnaire du modèle de Hunt. Pour $h = 0,97 m$ les deux critères prédisent la TCE au même moment et pour $h < 0,97 m$, le critère de Fredriksson prévoit la TCE plus tard que le critère de Hunt. L'écart le plus important entre les prédictions des deux modèles est situé au bas du lingot ($h = 0m$). Le modèle de Fredriksson place la TCE à 500 s, contre 400 s si l'on utilise le critère de Hunt. Ceci correspond à des épaisseurs de zone colonnaire dans le lingot de 7,2 cm et 6,5 cm respectivement et donc les deux critères donnent des résultats proches pour la position de la TCE.

On a vu que les deux critères précédents, basés sur des approches très différentes, donnent pourtant des prédictions similaires pour la TCE sur un lingot d'acier. Puisque les valeurs de G et V et la recalescence vont dépendre de la vitesse de refroidissement \dot{T} , on peut comprendre par l'analyse précédente pourquoi tant de modèles et d'expériences parviennent à corréler la TCE à une valeur critique de G , V ou \dot{T} .

I.6.2.b Mécanismes de blocage thermique et solutal

Par contraste avec le mécanisme précédent qui suppose le contact direct entre les grains équiaxes et colonnaires, le blocage thermique et le blocage solutal sont appelés « soft impingement » car ils supposent le blocage des structures colonnaires avant leur contact direct avec les grains équiaxes. En cela il s'agit de mécanismes indirects de blocage du front colonnaire.

Burden et Hunt (Burden M.H 1975) suggèrent que la TCE est provoquée par la libération de chaleur latente par les grains équiaxes. L'effet de la libération de chaleur latente est de réduire la surfusion devant le front en augmentant la température locale. McFadden et Browne (McFadden S. 2006), en utilisant leur modèle de « front-tracking », trouvent que la température peut aussi être la plupart du temps considérée comme quasi-uniforme autour des grains car l'épaisseur de couche limite thermique est supérieure à la distance moyenne entre deux grains.

Les grains équiaxes rejettent également du soluté lors de la solidification. Quand la densité de grains est suffisante, Martorano et coll. (B. C. Martorano M.A 2003) ont pu montrer dans le cadre de leur modèle que l'interaction solutale est le mécanisme responsable de la TCE. En effet, la concentration du liquide extragranulaire (en dehors des enveloppes), notée C_l^e , augmente lors de la solidification des grains et donc la surfusion $\Delta T_c = m_l(C_l^* - C_l^e)$ diminue. Si le liquide extragranulaire atteint l'équilibre alors la vitesse de croissance des grains mais aussi celle du front colonnaire devient localement négligeable et le front est effectivement bloqué.

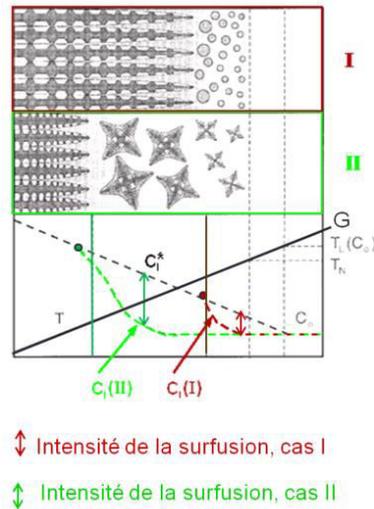


Figure I.6-6 Réduction de la surfusion chimique devant le front en fonction de la densité de grains équiaxes. D'après (B. C. Martorano M.A 2003).

La Figure I.6-6 présente un schéma de l'interaction solutale entre les structures colonnaires et les grains équiaxes pour deux densités différentes des grains équiaxes. Le gradient thermique local G (supposé linéaire) s'accompagne d'un gradient de la concentration du liquide à l'équilibre C_l^* (en pointillés noir sur la figure). Les profils réels de concentration dans le liquide sont représentés par les courbes en couleurs $C_l(I)$ et $C_l(II)$. Dans le cas I (en rouge), la densité de grains équiaxes est élevée, les grains sont donc en grand nombre devant le front. Dans ce cas, les grains sont petits et globulaires et le rejet de soluté dans le liquide devant le front est massif car la surface d'échange entre les grains et le liquide est très élevée. Le résultat est que la surfusion devant le front colonnaire est plus faible et moins étendue (d'où l'avancée du front dans le cas I par rapport au cas II) et le front peut alors être arrêté par effet solutal, avant que les grains occupent suffisamment l'espace pour bloquer mécaniquement les structures colonnaires.

Par exemple, pour une simulation de solidification dirigée d'un alliage Al-3% pds Cu avec $G \cdot v_{tip} = 0,005 K \cdot s^{-1}$, $\Delta T_N = 0 K$ et $n_{eqx} = 2,4 \cdot 10^8 \text{ grains} \cdot m^{-3}$, la TCE a lieu par blocage solutal du front lorsque $f_{eqx} = 0,2$ devant le front (B. C. Martorano M.A 2003).

Dans le cas II, la densité de grains équiaxes est plus faible, les grains sont plus larges et dendritiques. La surfusion devant le front est plus importante et étendue. Le rejet de soluté n'est alors généralement pas suffisant pour bloquer complètement le front et le blocage mécanique survient avant le blocage solutal. Cependant, la croissance des grains est alors très brutale et donc la fraction d'équiaxe à partir de laquelle on considère le front comme bloqué n'est pas particulièrement pertinente d'après Martorano et coll. (B. C. Martorano M.A 2003).

Les résultats du modèle numérique de Ciobanas et Fautrelle (Ciobanas A.I 2007) indiquent également que le blocage solutal est le mécanisme prédominant pour des valeurs de la vitesse du front v_{front} faibles. Pour des valeurs élevées de la vitesse du front c'est le blocage mécanique qui est prépondérant.

L'effet solutal des grains équiaxes sur la croissance des structures colonnaires a pu être mis en évidence par des expériences in situ sur des alliages métalliques. Nguyen-Thi et coll. (Nguyen-Thi H.

2007) ont notamment observé que les bras colonnaires étaient bloqués par les grains équiaxes avant le contact direct entre les deux structures.

I.6.2.c Mécanisme de déstabilisation du front

Mahapatra et Weinberg (Mahapatra R.B 1987) ont d'abord suggéré que lorsque le gradient thermique devant les pointes colonnaires devient suffisamment faible, la forme des pointes de dendrite pourrait devenir instable. La morphologie de la pointe pourrait alors conduire au ralentissement du front et favoriser la croissance des grains équiaxes. La source de ces grains équiaxes est cependant supposée être la germination hétérogène.

Le mécanisme de déstabilisation des bras colonnaires a par la suite été proposé par Gandin (Gandin Ch.-A. 2000) en se basant sur des expériences de solidification dirigée sur des lingots Al-Si et un modèle 1D qui ne considère que les structures colonnaires.

La déstabilisation du front a lieu au moment où la solidification est encore purement colonnaire et que la surchauffe a été complètement évacuée dans le liquide. A mesure que la chaleur est évacuée à travers le solide et en l'absence de grains équiaxes, le gradient G_l dans le liquide devant le front va alors devenir très faible. Si G_l est suffisamment faible, la chaleur latente dégagée par le front en croissance peut être évacuée en partie via le liquide et par conséquent, un gradient local négatif G_l se forme dans le liquide. On se trouve alors dans une situation schématisée sur la Figure I.6-7.b qui est caractéristique de la croissance non contrainte des structures équiaxes dans un bain liquide en surfusion. C'est ce passage d'une croissance contrainte à non-contrainte qui indique la déstabilisation des structures colonnaires.

Le front est alors susceptible de subir une diminution de sa vitesse d'avancée. Comme mis en évidence par Jackson et coll. (H. J. Jackson K.A 1966), il y aura alors fragmentation des bras secondaires colonnaires. Le liquide devant le front étant entièrement en surfusion, cela favorise également la croissance de ces fragments. La production de fragments est aussi favorisée par la réorganisation des structures colonnaires car l'espace dendritique primaire λ_1 dépend de la vitesse d'avancée du front. Cet effet a été mis en évidence par Pollock et Murphy (Pollock T.M 1996) lors de l'étude de la fragmentation et de la formation de « freckles » dans des alliages à base Nickel.

Dans les interprétations de Gandin, la vitesse du front v_{front} passe également par un maximum juste après que le gradient s'annule comme reproduit sur la Figure I.6-7.a. Ces deux événements sont très proches et la TCE coïncide alors avec le changement de signe de G ou le maximum de v_{front} .

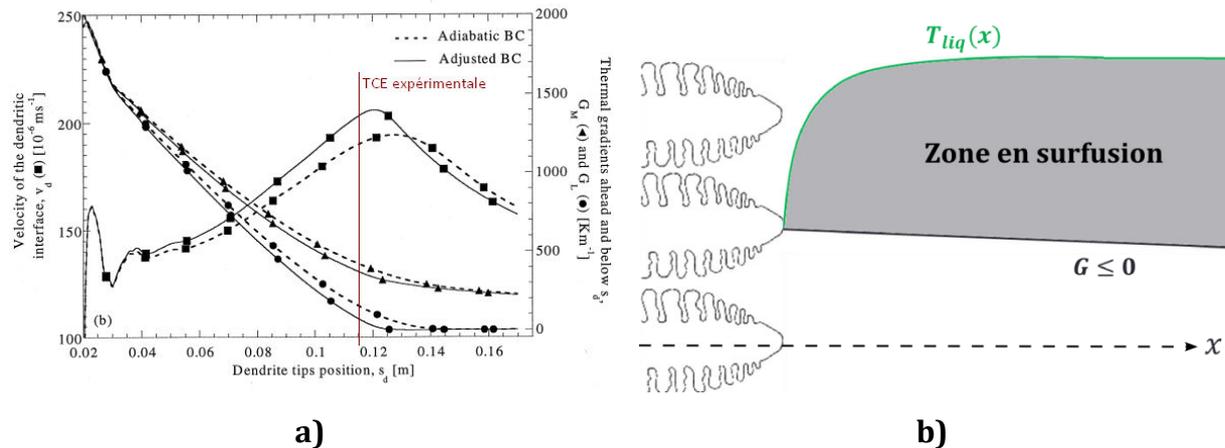


Figure 1.6-7 a) Vitesse du front et gradients thermiques dans le liquide (G_L) et dans la zone pâteuse (G_M) dans le lingot Al-7%*pds* Si. La TCE expérimentale est également reportée. D'après (Gandin Ch.-A. 2000). b) Visualisation de la zone en surfusion devant le front dans le cas d'un gradient thermique nul ou négatif dans le liquide.

Ce mécanisme est indépendant de n_{eqx} car il est basé sur la fragmentation des structures colonnaires et donc il ne devrait être considéré que dans les alliages non-inoculés.

Tout comme la refusion des dendrites, l'effet de ce mécanisme de déstabilisation sur la TCE n'a pas encore été quantifié faute d'observations in situ suffisantes.

1.7. Modèles numériques de TCE

Dans la suite, on va passer en revue les modèles numériques de solidification qui ont été appliqués spécifiquement à la prédiction de la TCE.

Les approches sont très variées dans la littérature et on cherchera à s'inspirer des modèles qui nous ont paru les mieux adaptés afin que notre modèle réponde au cahier des charges suivant :

- Pouvoir simuler la croissance des deux types de structures : colonnaires et équiaxes.
- Pouvoir être implémenté sans trop de difficultés dans le modèle de solidification équiaxe Cone2D déjà développé à Nancy au sein de l'IJL.
- Être le moins coûteux possible en temps de calcul (de sorte à pouvoir être utilisé sur des systèmes de taille industrielle).
- Être applicable à la solidification en lingot mais aussi être adaptable à la coulée continue.
- Inclure les mécanismes de TCE par blocage mécanique et blocage solutal.
- Étudier l'influence du mouvement des grains équiaxes dans la prédiction de la TCE.
- Laisser la possibilité de prédire la TEC (transition équiaxe-colonnaire), observée expérimentalement lors de la solidification des lingots.

Dans la suite, on va présenter le principe des modèles de TCE que nous avons pu lister dans la littérature puis présenter les principaux résultats obtenus par les auteurs de ces modèles. Le but est alors de pouvoir les classer selon des critères répondant globalement aux points évoqués ci-dessus. On pourra alors trouver les approches qui nous permettront de développer un premier modèle de croissance colonnaire/équiaxe qui sera présenté dans la suite de ce travail.

Dans le Tableau 2, on a listé les modèles d'intérêt. On a choisi de les classer selon deux premiers critères généraux.

Les modèles directs permettent de calculer l'évolution de chaque grain de manière individuelle. Par exemple les modèles d'Automate Cellulaire (R. M. Gandin Ch.-A. 1997) supposent une géométrie octaédrique élémentaire à l'échelle d'une cellule. La forme du grain est alors décrite par l'assemblage de ces structures élémentaires ayant eu chacune leur histoire thermique et convective. La particularité de ces modèles est donc de pouvoir prédire directement la forme finale des grains. Il n'est alors pas nécessaire d'implémenter des critères de blocage du front comme le critère de Hunt (Hunt J.D 1984) et la position de la TCE est directement visible sur la structure finale simulée. Les modèles indirects, qui sont aussi des modèles à prise de moyenne, utilisent le concept d'enveloppe. L'enveloppe constitue une ligne fictive séparant le liquide intragranulaire (considéré comme le liquide situé entre les dendrites) et le liquide extragranulaire situé à l'extérieur des grains. La forme des grains ainsi idéalisée permet de calculer leur morphologie. Une autre caractéristique de ces modèles est que les champs physiques sont moyennés à l'échelle du volume de prise de moyenne dit Volume Élémentaire Représentatif (VER). Par exemple, la taille des grains et leur morphologie sont considérées uniformes localement (à l'échelle du VER) et on suppose qu'elles sont représentatives des grains à cet endroit.

Le deuxième critère concerne l'échelle de résolution des microstructures dans les modèles. Les modèles seront considérés comme micro s'ils modélisent l'évolution de l'interface solide/liquide à l'intérieur des grains. Les modèles à champ de phase par exemple commencent à être appliqués à la TCE en 2D et 3D. Si le modèle est dit micro, l'équation de diffusion est résolue à l'échelle de l'interface, il n'est alors pas nécessaire d'employer des modèles de cinétique de pointe pour décrire la croissance des grains dendritiques. Les modèles macro, quant à eux, ne cherchent pas à prédire la position de l'interface solide-liquide mais vont plutôt chercher à décrire de façon moyennée la solidification ayant lieu à l'intérieur des structures. C'est pourquoi ces modèles utilisent la notion d'enveloppe qui délimite les structures.

Tableau 2 : Liste et classement des différents modèles numériques appliqués à la TCE dans la littérature.

	Modélisation directe	Modélisation indirecte
Structures micro	Badillo et Beckermann (Badillo A. 2006) Viardin et coll. (Viardin A. 2011)	Pas d'application à la TCE
Structures macro	Gandin et coll. (Carazonni T. 2012), Biscuola et Martorano (Biscuola V.B 2008) Vandyoussefi et Greer (Vandyoussefi M. 2002) McFadden et Browne (McFadden S. 2009)	Flood et Hunt (Flood S.C 1987) Thévoz et Rappaz (Thévoz Ph. 1989) Beckermann et coll. (B. C. Martorano M.A 2003) M'Hamdi (M'Hamdi M. 1999) Vannier (Vannier I. 1995) Jacot et coll. (Jacot A. 2000) Roux (Roux P. 2005) Ludwig et coll. (W. M. Li J. 2014) Martorano et Biscuola (B. V. Martorano M.A 2006) Ciobanas et Fautrelle (Ciobanas A.I 2007) Dagner et coll. (Dagner J. 2008) Mirihanage et coll. (Mirihanage W.U. 2012)

I.7.1 Modélisation indirecte des structures

Malgré les différences entre les modèles indirects, ils ont tous pour objectif de modéliser l'évolution des structures colonnaires et équiaxes.

Il convient pour les structures colonnaires de connaître la position du front colonnaire à chaque instant à l'aide d'un modèle de propagation appelé souvent « front-tracking ». En effet, l'apparition du front colonnaire dans un volume donné ne peut se baser exclusivement sur la valeur locale des différentes variables (T, \dot{T}, C_i, \dots). Cela vient du fait que la présence ou non à un endroit donné des structures colonnaires est liée non seulement aux variables locales mais également à un historique de croissance du front.

Pour les structures équiaxes, la connaissance des variables locales suffit pour prévoir leur apparition à un endroit donné du système.

I.7.1.a Modèles à l'échelle macroscopique

- [Modèle de Flood et Hunt](#)

Flood et Hunt (Flood S.C 1987) ont proposé peu après les travaux de Hunt un des premiers modèles numériques de TCE. Le modèle, appliqué à des géométries 1D uniquement, utilise un suivi explicite de la position du front, représenté ici par un seul point donnant la position du front colonnaire au cours du temps. Le front colonnaire est ici défini comme la ligne joignant les pointes primaires des dendrites colonnaires. Le modèle de Burden et Hunt (Burden M.H 1974) est employé pour calculer la vitesse d'avancée du front en fonction de la surfusion locale. La solidification interne de la structure colonnaire (ici assimilable à la zone pâteuse colonnaire) est calculée en utilisant le modèle de Scheil tronqué (cf. Figure I.2-5).

Concernant les structures équiaxes, la germination se fait de manière hétérogène à l'aide d'une densité n_{eqx} de grains uniformément répartis dans le système. Par la suite, la croissance des grains équiaxes est calculée en utilisant également une loi $v_{tip} \propto \Delta T^2$ et en supposant une forme d'enveloppe sphérique. La solidification interne des grains équiaxes est calculée par le modèle de Scheil. Par conséquent le modèle ne prend pas en compte l'interaction solutale entre les structures. Ce dernier point n'est justifiable que si les grains sont suffisamment dendritiques et que l'on peut considérer que la plupart du soluté reste à l'intérieur des enveloppes. L'interaction thermique est prise en compte via le rejet de chaleur latente. L'effet de la convection du liquide est également pris en compte de manière simplifiée en utilisant une couche limite de diffusion thermique au-delà de laquelle la température sera considérée uniforme dans le bain liquide. La TCE est prédite en utilisant le critère de Hunt (Hunt J.D 1984).

- [Modèle de Thévoz et Rappaz](#)

Thévoz et Rappaz (Thévoz Ph. 1989) ont proposé une description des structures basée sur le concept d'enveloppe. Il s'agit d'une limite fictive distinguant un liquide dit intragranulaire à l'équilibre thermodynamique du liquide extragranulaire. Par la suite, Wang et Beckermann (B. C. Wang C.Y 1994) ont développé à partir de ce concept d'enveloppe les bases d'un modèle multiphasique utilisant la méthode de la prise de moyenne volumique. Dans le cadre des modèles à prise de moyenne volumique, on définit un Volume Élémentaire Représentatif (VER) de taille intermédiaire entre les échelles macroscopiques et microscopiques, typiquement entre 10^{-3} et 10^{-2} m. Sur chaque VER, les équations du modèle (chaleur, transport du soluté, conservation de la masse et de la quantité de mouvement) sont moyennées. On modélise ainsi le comportement non pas de chaque grain individuellement mais d'un grain « moyen », représentatif de la structure à l'échelle du VER. Les microstructures sont également décrites via des facteurs morphologiques du grain moyen, telles que les surfaces spécifiques et les longueurs de diffusion du soluté dans le liquide et le solide.

- [Modèle de Beckermann et coll.](#)

Un autre principe développé par Beckermann et coll. dans le cadre des modèles à prise de moyenne est de définir une enveloppe autour des grains équiaxes et colonnaires qui joint les pointes primaires et secondaires. Un exemple d'enveloppe est schématisé sur la Figure I.7-1.a. Le plus souvent la forme de celle-ci est simplifiée comme c'est le cas dans ce modèle avec une enveloppe sphérique pour les grains équiaxes et une enveloppe cylindrique pour les grains colonnaires. Par la suite, les auteurs (B. C. Wang C.Y 1994) ont constaté que l'utilisation d'enveloppes sphériques à la fois pour les structures équiaxes et colonnaires résultait en des différences minimales. Cette hypothèse a également été confirmée par Ciobanas et Fautrelle (Ciobanas A.I 2007)

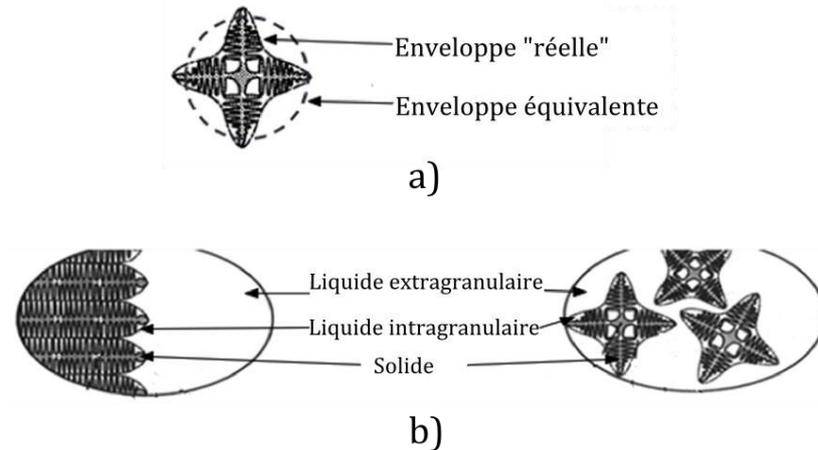


Figure 1.7-1 a) Modèle d'enveloppe pour un grains équiaxe et enveloppe simplifiée sphérique. b) définition des phases dans le modèle de Beckermann et coll. (B. C. Wang C.Y 1994).

L'enveloppe permet alors de séparer trois domaines différents nommés (abusivement) phases dans chaque VER. On distingue alors au sein de la phase liquide : le liquide intragranulaire qui est supposé à l'équilibre thermodynamique et le liquide extragranulaire qui évolue hors équilibre thermodynamique en dehors des enveloppes. La croissance des enveloppes ainsi que l'avancée du front sont modélisées par le modèle LGK (G. M. Lipton J. 1984).

Le modèle ne distingue par contre pas les structures colonnaires et équiaxes lorsque celles-ci sont dans le même VER. Il s'agit d'un modèle à 3 « phases » et lorsque le front colonnaire rencontre un VER où des structures équiaxes préexistent, soit il est immédiatement bloqué, soit le volume est considéré comme entièrement colonnaire. Pour pallier au fait que les structures « mixtes » ne sont pas traitées, le volume du front est localement subdivisé en une quarantaine de volumes plus réduits.

La position du front est calculée de manière implicite en supposant que la direction de croissance est celle du gradient thermique $\vec{\nabla}T$. Cependant le « front tracking » n'est utilisé que sur un seul point du front et la forme du front en 2D est déduite en supposant que le front suit l'isotherme de la température des pointes T_{tip} . Cette hypothèse n'est cependant pas vérifiée dans le cas général (D. H. Mirihanage W.U 2013).

En plus du blocage « mécanique » via le critère de Hunt (Hunt J.D 1984), les auteurs ont par la suite introduit le critère de blocage solutal (B. C. Martorano M.A 2003). Pour ce faire il suffit d'utiliser la concentration C_l^e du liquide extragranulaire au lieu de C_0 pour la concentration $\langle C_l \rangle$ dans l'expression de la sursaturation $\Omega = \frac{C_l^* - \langle C_l \rangle}{C_l^* (1-k)}$. Cette concentration intervient en effet dans le calcul la vitesse de croissance du front (et également des structures équiaxes).

Le modèle a été utilisé en 1D et en 2D sans présence de convection pour prédire qualitativement la position de la TCE dans des lingots expérimentaux Al-Cu (Mahapatra R.B 1987), (Ziv I. 1989) de petites tailles (10x10 cm) avec des erreurs de l'ordre de 20% sur les positions de la TCE par rapport aux valeurs mesurées. Une comparaison plus détaillée a été réalisée avec les expériences de Gandin (Gandin Ch.-A 2000). Sur la Figure 1.7-2.a, on constate que la TCE correspond à peu près au moment où la vitesse du front est maximale (la température du front est minimale), en accord avec les observations de Gandin. Beckermann et coll. notent cependant que les résultats sont

très dépendants de la surfusion de germination ΔT_N des grains équiaxes. Celle-ci doit être choisie très proche et un peu inférieure à la surfusion maximale atteinte par le front, ce qui permet de retrouver la position expérimentale de la TCE. Le résultat est alors largement indépendant de la densité de germes n_{eqx} utilisée.

Un autre résultat intéressant, visible en Figure I.7-2.b permet aux auteurs de démontrer que l'on peut s'affranchir du critère de type Hunt dans leur modèle. En effet, si la densité de grains n_{eqx} est élevée $n_{eqx} \sim 2 \cdot 10^8 \text{ grains} \cdot \text{m}^{-3}$ (soit un rayon de grain $R_{grain} \sim 1 \text{ mm}$) alors le blocage solutal prédomine. Si la densité de grains est plus faible, l'effet solutal est négligeable mais la croissance des enveloppes se fait de manière brusque, si bien que n'importe quelle valeur de g_{Hunt} entre 0,2 et 0,95 donne la même position de la TCE.

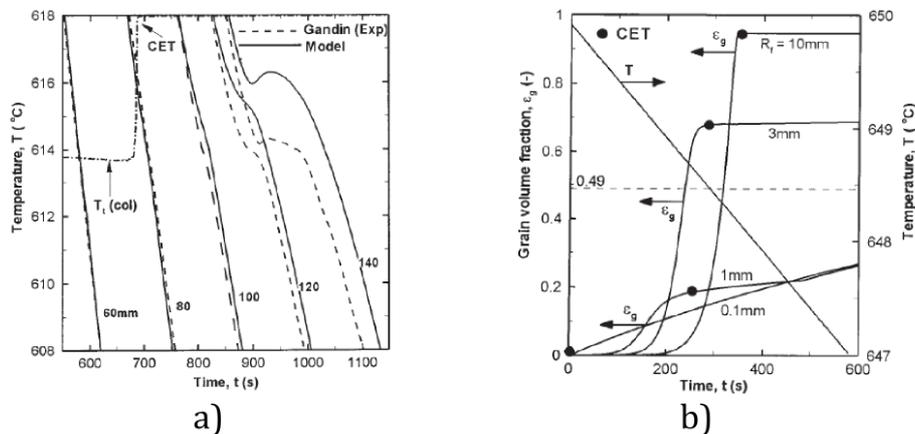


Figure I.7-2 Comparaisons entre les évolutions de la température pour les expériences de Gandin (Gandin Ch.-A. 2000) sur le lingot Al-7%*pds* Si et le modèle de Martorano et coll. (B. C. Martorano M.A 2003) b) Evolution de la fraction de grain pour un système 0D en fonction du rayon final de grain ($\Delta T_N \approx 0K$) avec le modèle (B. C. Martorano M.A 2003).

○ [Modèle de Dagner et coll.](#)

Dagner et coll. (Dagner J. 2008) ont repris un modèle similaire à celui de Beckermann et coll. mais en suivant le front colonnaire réellement en 2D. Le front est également supposé se déplacer dans la direction du gradient thermique et le modèle de « front-tracking » utilisé est similaire à celui de Ludwig et coll. (L. A. Wu M. 2007). Comme leur modèle ne traite pas la croissance simultanée des structures dans les volumes « mixtes », les auteurs choisissent de négliger l'enrichissement solutal pour le front et d'utiliser donc C_0 pour calculer la vitesse du front tout au long de sa croissance.

○ [Modèle de Ludwig et coll.](#)

Ludwig et coll. (F. A. Wu M. 2010) ont par la suite développé un modèle similaire en considérant 5 « phases » différentes, listées en Figure I.7-3. Cette complexité supplémentaire implique de devoir résoudre les équations de conservation pour chaque phase supplémentaire mais permet aux auteurs de traiter la croissance des structures mixtes. Chaque structure colonnaire et équiaxe possède son propre liquide intragranulaire mais les auteurs ne considèrent qu'un seul liquide extragranulaire. Le modèle tel qu'il est formulé est par contre trop coûteux pour pouvoir être appliqué à des systèmes de taille industrielle (W. M. Li J. 2014).

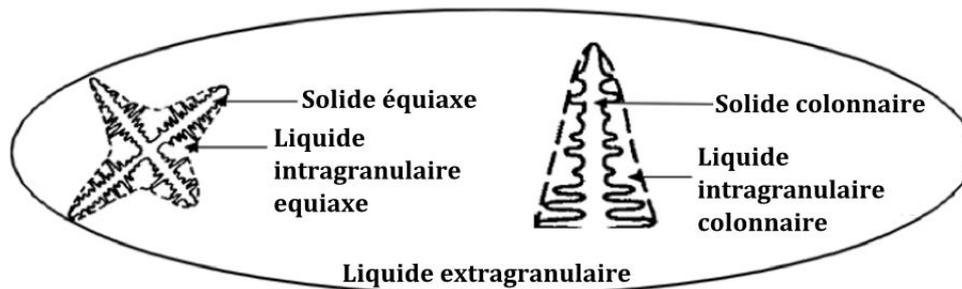


Figure I.7-3 Définition des « phases » définies pour décrire la croissance des grains dans le modèle de Ludwig et coll. (F. A. Wu M. 2010)

Un premier résultat intéressant de ce modèle à 5 « phases » est de pouvoir décrire plus précisément l'effet du mouvement des grains sur la TCE.

Pour un cas de solidification unidirectionnelle d'un alliage Al-Cu inoculé (L. A. Wu M. 2010) et en considérant la sédimentation des grains, les auteurs trouvent que la sédimentation peut paradoxalement favoriser les structures colonnaires, en accord avec les expériences de Camel et coll. (C. D. Dupouy M.D 2002).

Sur le même cas, les auteurs ont réalisé une étude paramétrique afin de déterminer l'impact sur la TCE des formes d'enveloppes simplifiées utilisées pour les structures colonnaires et équiaxes. La position relative de la TCE dans le système ne varie que de 10% en changeant la forme supposée des enveloppes colonnaires. Par contre la forme d'enveloppe des grains équiaxes fait varier de plus de 30% la position de la TCE. Ceci confirme l'hypothèse déjà émise par plusieurs auteurs (B. C. Martorano M.A 2003), (Ciobanas A.I 2007) que la forme d'enveloppe utilisée pour les structures colonnaires dans les modèles à prise de moyenne a peu d'impact sur les résultats obtenus.

Une autre particularité intéressante du modèle est son traitement du suivi du front colonnaire, schématisé d'un point de vue numérique en Figure I.7-4. Dans chaque volume de discrétisation est défini un indice i_c dont les valeurs évoluent en suivant les critères ci-dessous :

- $i_c = 0$ si le volume de calcul contient uniquement du liquide extragranulaire et éventuellement des grains équiaxes.
- $i_c = 1$ si le volume contient le front colonnaire, du liquide extragranulaire et, éventuellement, des grains équiaxes.
- $i_c = 2$ si le volume contient des structures colonnaires, mais pas les pointes (c'est-à-dire que le front a déjà dépassé le volume en question).

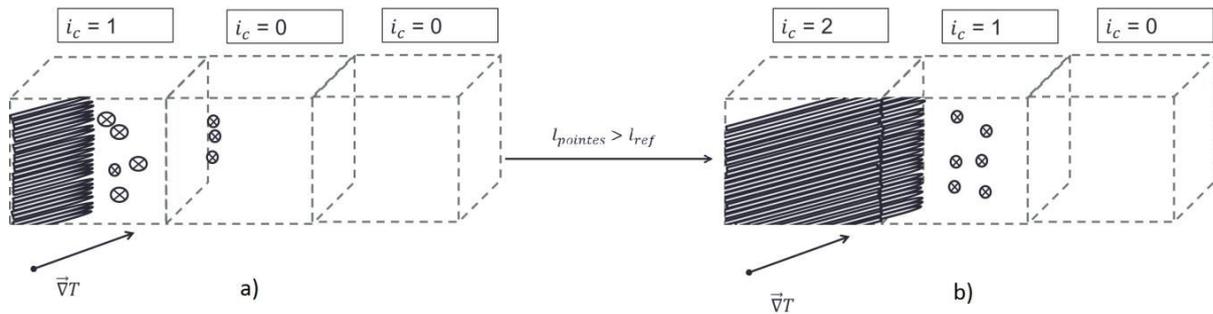


Figure I.7-4 Modèle de propagation du front colonnaire pour le modèle de Ludwig et coll. a) Position du front dans les volumes de discrétisation et valeurs de l'indice i_c associé. b) Situation après que le front se soit propagé au volume du milieu. La propagation a eu lieu car $l_{pointes} > l_{ref}$ dans le volume de droite.

Dans les volumes où $i_c = 1$, la longueur $l_{pointes}$ du front est calculée itérativement à partir de la vitesse des pointes colonnaires v_{front} (calculée par le modèle KGT (G. B. Kurz W. 1986) dans les calculs de Ludwig et coll.). Ainsi, on a :

$$\ell(t) = \int_{t_{colo}}^t v_{front} dt \quad (1.20)$$

t_{colo} correspond au moment où le front colonnaire est entré dans le volume. Les bras colonnaires sont par ailleurs supposés se propager dans la direction du gradient thermique, comme indiqué sur la Figure I.7-4. Afin que le modèle soit indépendant du maillage utilisé (dans le cas d'un maillage non-structuré), les auteurs définissent une longueur l_{ref} dans chaque volume qui est définie comme le diamètre du disque (sphère en 3D) qui a la même aire (volume) que le volume de discrétisation. Si dans un volume, $l_{pointes} > l_{ref}$, la structure colonnaire est propagée aux volumes les plus proches.

Une version du modèle par les mêmes auteurs (Ludwig A. 2005) ne considère que trois « phases » : solide colonnaire, solide équiaxe et liquide extragranulaire. Ce modèle, moins coûteux en temps de calcul, a pu être appliqué à des lingots d'acier de 2,45 tonnes (W. M. Li J. 2014) et 25 tonnes (L. J. Wu M. 2013). Mais ce modèle ne considère que des grains équiaxes globulaires et des structures colonnaires cellulaires. Or, la prise en compte de la morphologie des grains équiaxes est nécessaire pour pouvoir retrouver les résultats expérimentaux sur les lingots d'acier (Z. M. Combeau H. 2009) . Récemment, les auteurs (W. M. Li J. 2014) ont tenté d'introduire un modèle simplifié de prise en compte de la morphologie équiaxe en considérant un liquide intragranulaire équiaxe mais en supposant une fraction interne $g_{si} = \frac{g_s}{g_{env}}$ constante puis une morphologie globulaire ($g_{si} = 1$) plus tard lors de la solidification. Malgré une légère amélioration des résultats, la pertinence des hypothèses utilisées n'est pas justifiée par les auteurs.

o [Modèles avec suivi de la position du front colonnaire](#)

Certains modèles indirects utilisent une autre méthode pour le suivi du front tout en conservant pour les structures équiaxes des équations moyennées similaires au modèle de Beckermann et coll. (V. R. Beckermann C. 1993) ou au modèle de Hunt (Hunt J.D 1984). Le principe général de suivi du front colonnaire est alors schématisé en Figure I.7-5. Le front est modélisé par une ligne qui joint les pointes primaires des bras colonnaires et donc les différents bras colonnaires

ne sont pas distingués derrière la position du front. Dans chaque volume, le segment qui correspond à la position du front permet de déterminer une fraction de zone colonnaire. Après le calcul de la vitesse du front v_{front} , le segment lui-même (ou les marqueurs qui définissent l'intersection du segment avec le maillage selon les modèles) est déplacé. La direction de croissance reste alors à définir pour trouver l'orientation de chaque segment. Dans la zone pâteuse colonnaire, la fraction de solide est calculée par le modèle de Scheil tronqué (Flood S.C 1987). Cette hypothèse peut être justifiée par le fait que le rejet de soluté dans le liquide extragranulaire dû à la croissance des structures colonnaire est négligeable puisque l'essentiel du rejet se fait latéralement dans le liquide intragranulaire.

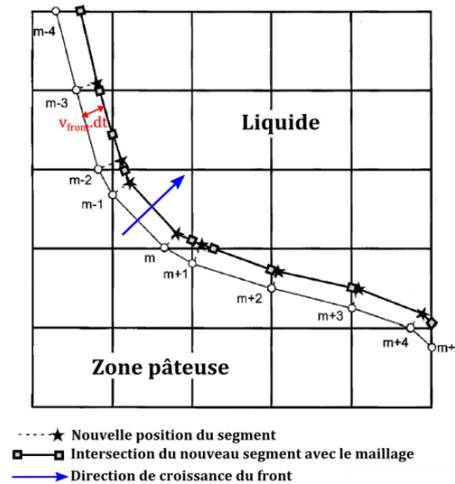


Figure I.7-5 Schéma de la position macroscopique du front colonnaire, caractérisée par la ligne joignant les pointes primaires. Sa nouvelle position après un temps dt est également reportée. D'après (H. J. Browne D.J 2004).

Jacot et coll. (Jacot A. 2000) sont les premiers à employer ce genre de méthode appliqué à la modélisation de la solidification de cylindres de calendres en fonte. L'avantage est alors de considérer une solidification purement eutectique et donc de s'affranchir des morphologies possibles du front et des grains équiaxes. Les grains équiaxes sont décrits par les équations moyennées de Hunt (Hunt J.D 1984) et deux populations de grains équiaxes sont considérées (pour la fonte grise et blanche). L'orientation du front est supposée être localement parallèle au gradient thermique. Des comparaisons avec une expérience d'échelle 1/3 par rapport au produit industriel donnent des résultats satisfaisants concernant les fractions de phases eutectiques prédites. Dans leurs calculs, la convection n'est pas considérée. La modélisation des volumes « mixtes » où les deux types de structures coexistent est possible, seule l'évolution des grains équiaxes qui sont considérés comme derrière la position du front dans le volume ne peut plus être calculée. La position de la TCE est déterminée par le critère de Hunt et les auteurs décident de conserver la valeur $g_{Hunt} = 0,49$.

Martorano et Biscuola (B. V. Martorano M.A 2006) ont par la suite développé un modèle similaire. L'algorithme employé pour suivre le front colonnaire est quelque peu différent mais l'idée reste la même : Le front est modélisé par la ligne qui joint les pointes primaires et est supposé croître dans la direction du gradient thermique. L'évolution des grains équiaxes est modélisée similairement à Beckermann et coll. (B. C. Wang C.Y 1994). Le blocage solutal du front colonnaire est alors pris en compte ainsi que le blocage « mécanique » pour une fraction de grains équiaxes $g_{Hunt} = 0,49$. Le

modèle ne considère pas non plus le phénomène de convection. Une comparaison avec un modèle d'Automate Cellulaire (R. M. Gandin Ch.-A. 1997) sur la solidification de systèmes de taille réduite donne des résultats comparables entre chaque type de modèle.

Le modèle le plus abouti de ce genre a été développé par Mirihanage et coll. (Mirihanage W.U. 2012), comme une évolution du modèle de Browne et Hunt (H. J. Browne D.J 2004). L'évolution des grains équiaxes est alors décrite similairement à Hunt (Hunt J.D 1984). Comme les effets solutaux sont négligés, la TCE est prédite par le critère de Hunt avec $g_{\text{Hunt}} = 1$, sans justification particulière sur la valeur choisie. Le modèle a été notamment utilisé pour simuler des expériences de solidification dirigée en microgravité d'alliage Al-Si inoculés (Mirihanage W.U. 2012). En estimant les conditions limites thermiques et la distribution d'inoculant des expériences, le modèle permet de retrouver la position expérimentale de la TCE. Les auteurs ont également présenté des résultats qualitatifs en présence de convection naturelle d'origine thermique (B. D. Mirihanage W.U 2011). La zone colonnaire et la zone équiaxe cohérente (grains équiaxes fixes) sont traitées comme des zones poreuses isotropes et un terme de Darcy est utilisé pour modéliser l'interaction solide-liquide où la perméabilité est calculée selon le modèle de Carman-Kozeny. Dans la zone où les grains équiaxes sont libres, ces derniers sont supposés se déplacer à la vitesse du liquide, excepté pour un terme de sédimentation dans la direction de gravité (B. D. Mirihanage W.U 2010). Un modèle de viscosité apparente est utilisé afin de modéliser les interactions entre les grains solides et le liquide en mouvement. De plus, les auteurs supposent que la cohérence des grains équiaxes se fait localement lorsque $g_{\text{eqx}} = 1$, sans justification particulière.

○ [Modèle de Roux](#)

Les travaux de Roux (Roux P. 2005) décrivent encore une autre méthode afin de suivre la position du front colonnaire, le modèle étant par ailleurs basé sur les équations du modèle de Beckermann et coll. (V. R. Beckermann C. 1993) ainsi que Goyeau et coll. (Bousquet-Melou P. 2002). L'idée générale est schématisée en Figure I.7-6. Les bras colonnaires (en réalité modélisés par des enveloppes cylindriques) sont supposés être constitués de deux zones distinctes. Une première zone est dite de « pointe » où la surface d'enveloppes colonnaires croît rapidement jusqu'à atteindre une valeur maximale $S_{\text{env}}^{\text{max}}$ (pour des cylindres régulièrement arrangés $S_{\text{env}}^{\text{max}} = \frac{\pi}{\lambda_1}$). Une deuxième zone est le cœur de la zone pâteuse colonnaire où la surface spécifique n'évolue plus car les enveloppes sont en contact.

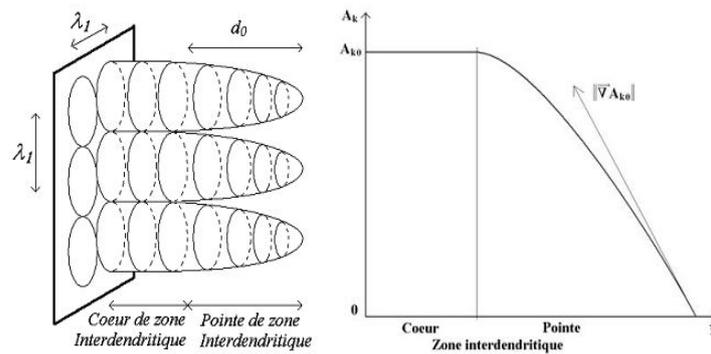


Figure I.7-6 A gauche, les deux zones distinguées dans les structures colonnaires : Le « cœur » en arrière et la zone de pointes, de longueur d_0 . A droite, l'évolution de la surface spécifique d'enveloppe correspondante. D'après (Roux P. 2005).

La présence du front est alors détectée en résolvant l'équation de conservation de la surface spécifique (liée à la croissance des enveloppes) et en définissant une valeur critique du gradient local de surface d'enveloppe colonnaire. Le front colonnaire est considéré comme étant présent localement si le gradient local $\|\vec{\nabla}(S_{env})\|$ dépasse la valeur critique $\frac{S_{env}^{max}}{d_0}$ qui est un paramètre du modèle. Ce mode de propagation du front colonnaire pose deux problèmes principaux. Tout d'abord, d_0 qui correspond à la taille de la zone de pointe, est un paramètre du modèle. Il n'existe encore aucune méthode physique satisfaisante pour calculer d_0 et de plus ce paramètre dépend en réalité des conditions de refroidissement. De plus, un raffinement du maillage dans la zone de pointes est nécessaire pour assurer une bonne convergence des résultats et Roux montre que plus d_0 est petite, plus le raffinement doit être important. Des comparaisons qualitatives avec l'expérience sont présentées sur la TCE lors de la solidification en laboratoire d'alliages Sn-Bi (Quillet G. 2003) où le modèle prend en compte le mouvement du liquide et du solide. On y constate qu'effectivement les résultats dépendent de la valeur de d_0 choisie.

o [Modèle de Ciobanas et Fautrelle](#)

Enfin, Ciobanas et Fautrelle (Ciobanas A.I 2007) ont également proposé un autre modèle macroscopique basé sur une méthode statistique de prise de moyenne. Le modèle d'enveloppe est similaire à Beckermann et coll. (B. C. Martorano M.A 2003) et notamment les structures colonnaires sont considérées comme étant composées d'un ensemble de « sous-structures » sphériques dont la croissance individuelle est modélisée pareillement aux grains équiaxes. Le principe est schématisé sur la Figure I.7-7.

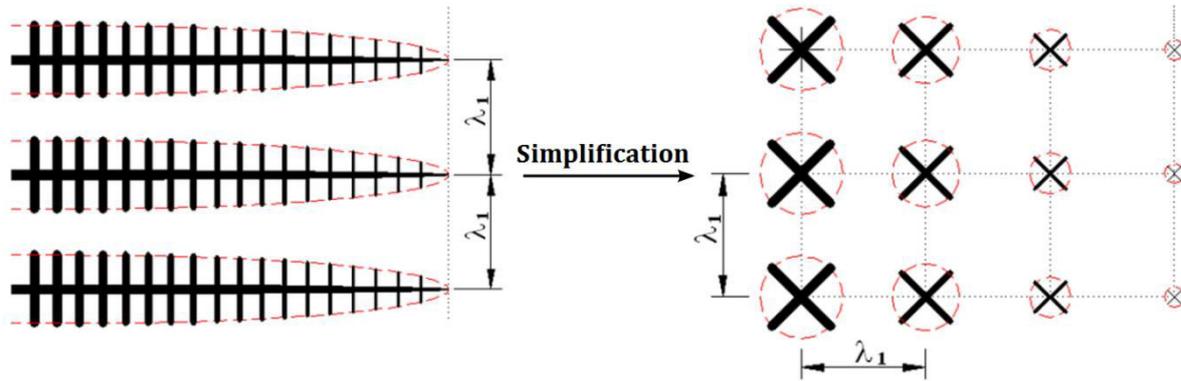


Figure I.7-7 Simplification de la représentation des enveloppes des structures colonnaires. Tout comme le modèle de Martorano et coll. (B. C. Martorano M.A 2003), Ciobanas et Fautrelle représentent les bras colonnaires comme un ensemble de « sous-structures » (ici de formes sphériques) dont la croissance est modélisée de manière similaire à celle d'un grain équiaxe. La taille finale de la sous-structure est donnée par l'espacement dendritique primaire λ_1 .

Si on suppose l'absence de gradients thermiques à l'échelle du grain, les auteurs remarquent que leur modèle aboutit à une modélisation très proche de la méthode à prise de moyenne volumique, les différences n'étant sensibles que si l'on considère une non-homogénéité des champs physiques à l'échelle du grain. Tout comme Ludwig et coll. (L. A. Wu M. 2010), les auteurs considèrent 5 « phases », les structures colonnaires et équiaxes étant constituées de solide et liquide intragranulaire mais partageant le même liquide extragranulaire. Seuls des résultats en régime diffusif et en 1D sont présentés. En reprenant les calculs de Beckermann et coll. (B. C. Wang C.Y 1994) sur des alliages Al-Cu, les auteurs aboutissent tout comme le modèle de Beckermann à des erreurs de l'ordre de 20% sur la position de la TCE par rapport à l'expérience.

○ [Modèles de Vannier et M'Hamdi](#)

Au sein de l'Institut Jean Lamour à Nancy, les travaux de Vannier (Vannier I. 1995) sur la TCE ont été appliqués à des lingots d'acier industriels. Le modèle utilise une description des grains équiaxes basée sur le modèle d'enveloppe de Rappaz et Thévoz (T. P. Rappaz M. 1987), très proche du modèle de Beckermann et coll. (B. C. Wang C.Y 1993). Dans chaque volume voisin du front colonnaire, l'arrivée du front est estimée en calculant la vitesse de traversée du front dans ce volume. Si les conditions thermiques sont favorables alors la structure colonnaire est effectivement propagée. Le modèle ne traite pas les structures mixtes et la position de la TCE est estimée par le critère de Hunt avec $g_{\text{Hunt}} = 0,49$. Le modèle calcule par contre le mouvement du liquide (mais pas du solide) et s'applique également aux alliages multiconstitués.

Les résultats présentés sur un lingot de 6,2 tonnes et de nuance 100C6 (C. H. Vannier I. 1993) montrent un accord qualitatif de la macroségrégation finale prédite par rapport à l'expérience. Les principales différences sont estimées être dues à l'absence de la prise en compte du mouvement de la phase solide équiaxe.

Enfin, une des rares applications des modèles numériques à la prédiction de la TCE en coulée continue a été réalisée par M'Hamdi (M'Hamdi M. 1999). Ce travail reprend le modèle de solidification équiaxe des travaux précédents mais n'a pas été appliqué en présence de convection. En coulée continue, la position du front colonnaire est dans un premier temps estimée. Là où la température est inférieure à la température du front et où les structures équiaxes ne sont pas

présentes, la structure est considérée comme colonnaire. Dans le liquide en surfusion restant, la solidification des structures équiaxes est calculée. Le blocage du front est ensuite estimé par le critère de Hunt avec $g_{\text{Hunt}} = 1$. Le modèle doit également concilier un modèle macroscopique de transfert de chaleur eulérien avec un modèle de croissance microscopique qui suit une approche lagrangienne. M'Hamdi construit alors un modèle complexe construit autour de deux types de maillages : macroscopique et microscopique. Le maillage macroscopique est fixe mais le maillage microscopique, plus fin, se déplace à la vitesse du produit. A l'aide de ce modèle, des résultats qualitatifs sont présentés sur la position de la TCE lors de la coulée de billettes d'acier.

I.7.2 Modélisation directe des structures

I.7.2.a Modèles à l'échelle macro/mésoscopique

Les modèles présentés ici ne considèrent pas la résolution exacte de l'interface solide/liquide, tout en calculant directement la forme et la taille des enveloppes des grains. Un exemple est donné par la méthode des automates cellulaires couplées à la méthode des éléments finis (CAFE). Le principe des modèles CAFE consiste à considérer d'une part un maillage microscopique sur lequel seront calculées la germination et la croissance des grains. C'est sur ce maillage également que les sites de germination seront distribués aléatoirement. A chaque site est associée une surfusion de germination et une orientation cristallographique préférentielle du grain. Superposé à cette discrétisation microscopique, un maillage macroscopique en éléments finis (FE) permet de résoudre les équations de transport. Un schéma de la communication entre les deux maillages est présenté en Figure I.7-8.a . La Figure I.7-8.b représente l'enveloppe tridimensionnelle. La frontière des grains est suivie sur le maillage microscopique en supposant que l'enveloppe de croissance élémentaire des grains dans chaque cellule est octaédrique et que le grain croît le long des directions cristallographiques (directions $\langle 100 \rangle$ pour une symétrie cubique). Les grains tels que celui de la Figure I.7-8.b sont alors constitués de l'assemblage des grains élémentaires octaédriques.

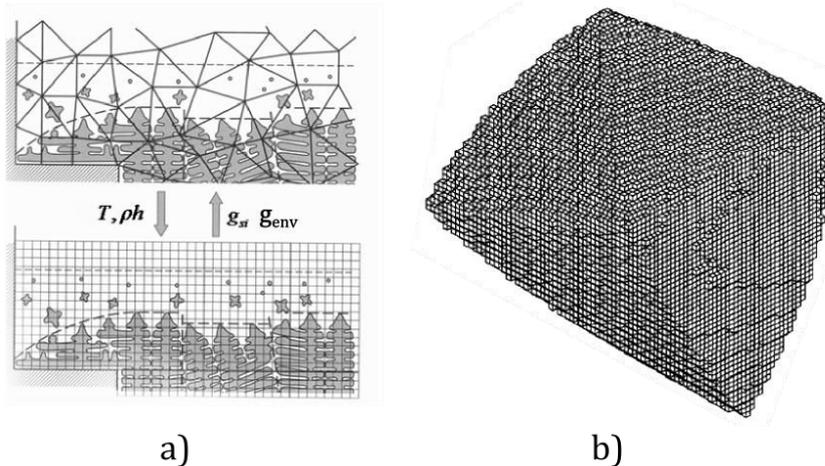


Figure I.7-8 a) Schéma montrant le couplage entre le maillage macroscopique pour les transferts thermiques et le maillage CA microscopique pour la germination et la croissance des grains. La fraction interne g_{si} est définie à partir de la fraction d'enveloppe g_{env} par $g_s = g_{si} g_{env}$ D'après (Dantzig J. 2009) . b) Schéma de l'enveloppe calculée d'un grain composé de l'assemblage des enveloppes octaédriques élémentaires. D'après (R. M. Gandin Ch.-A. 1997).

Le premier modèle CAFE a été développé par Rappaz et Gandin (G. C. Rappaz M. 1993) puis étendu en trois dimensions par les mêmes auteurs (R. M. Gandin Ch.-A. 1997). Dans leur modèle, la vitesse de croissance des enveloppes est calculée par un modèle cinétique de type KGT (G. B. Kurz W. 1986) et la solidification à l'intérieur des enveloppes délimitant les grains suit soit une loi de type Scheil soit un chemin de solidification $g_s(T)$ calculé antérieurement et imposé dans le modèle (Carazonni T. 2012).

Un modèle récent (Carazonni T. 2012) tridimensionnel a été appliqué à la prédiction de la TCE dans un lingot Al-7% pds Si, et comparé aux expériences de Gandin (Gandin Ch.-A. 2000). Le modèle, comme indiqué sur la Figure I.7-9 , permet de visualiser directement la position de la TCE dans le lingot. En ajustant les paramètres liés à la loi de germination des grains, la position expérimentale de la TCE ainsi que l'évolution de la température le long du système ont pu être retrouvées. Ces courbes ont été reportées sur la Figure I.7-9 et reproduisent bien les mesures.

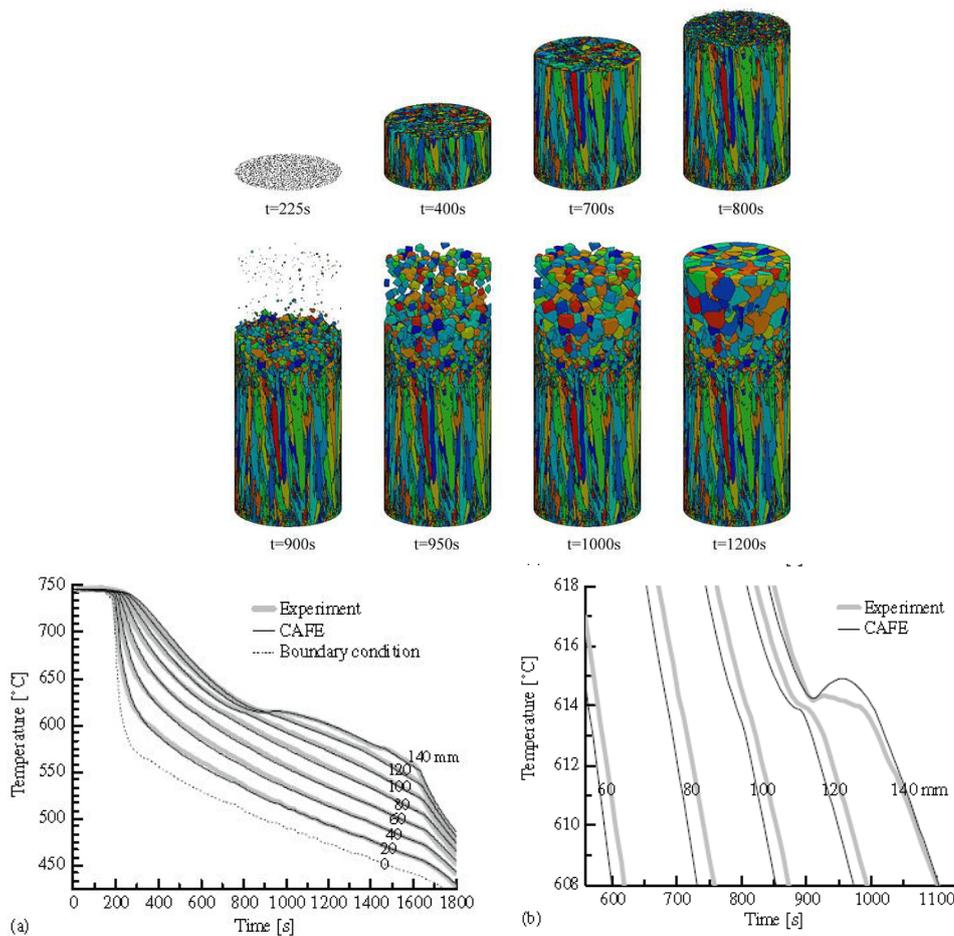


Figure I.7-9 Evolution de la structure du lingot Al- 7%*pds* Si avec le modèle CAFE en 3D (Carozzoni T. 2012). La position de la TCE finale peut être déduite de la structure finale simulée. L'évolution de la température le long du lingot est également comparé à l'expérience.

On remarque également que les modèles directs permettent de capturer des phénomènes tels que la sélection de la direction de croissance des grains colonnaires dans la zone de peau. En couplant le modèle CAFE avec le modèle de conservation du soluté proposé par Wang et Beckermann (B. C. Wang C.Y 1993), Mosbah et coll. (Mosbah S. 2010) ont pu prédire la formation de macroségrégations à la description directe de la croissance des grains. Récemment, Carozzani et coll. (Carozzani T. 2013) ont pu appliquer ce modèle en 3D et l'ont comparé à un essai expérimental sur un alliage Sn-3%*pds* Pb. Les courbes de températures expérimentales sont bien reproduites par le modèle. La forme des grains et les macroségrégations sont également quantitativement reproduites.

Un modèle CAFE en 2D incluant le mouvement du liquide et du solide a également été présenté par Guillemot et coll. (G. C. Guillemot G. 2006). Le modèle considère la coalescence des grains par simple contact et le mouvement du liquide par convection thermosolutale. Ce modèle a été appliqué (G. C. Guillemot G. 2007) pour retrouver les structures présentes lors de la solidification d'alliages In-Ga (Yin H. 1999). Cependant, les résultats n'approchent que qualitativement les mesures expérimentales, particulièrement en raison du manque de données thermophysiques fiables sur l'alliage considéré. De manière intéressante, ce modèle est le seul à considérer une loi de croissance des enveloppes qui prend en compte l'influence de la convection et de l'orientation sur la vitesse des pointes (G. G. Gandin Ch.-A. 2003).

Les modèles d'automates cellulaires ont été appliqués parallèlement par plusieurs autres auteurs. Vandyoussefi et Greer (Vandyoussefi M. 2002) ont pu ainsi retrouver qualitativement la morphologie des grains lors de la solidification dirigée d'alliages Al-Mg inoculés.

Martorano et Biscuola (Biscuola V.B 2008) ont également développé un modèle CAFE à la prédiction de la TCE lors de la solidification dirigée d'alliages Al-Si. Une comparaison qualitative a été réalisée entre leur modèle, le modèle de Hunt (Hunt J.D 1984) et un modèle à prise de moyenne volumique (B. C. Martorano M.A 2003). Cette comparaison emmène les auteurs à proposer une valeur du critère de blocage du front g_{Hunt} comprise entre 0,125 et 0,2 pour les modèles à prise de moyenne.

Lee et coll. (L. P. Dong H.B 2005), (Dai H.J 2008) ont utilisé un modèle similaire d'automate Cellulaire et en différences finies (CAFD). Le modèle tente également d'estimer la diffusion à l'interface solide/liquide afin de pouvoir s'affranchir des modèles de cinétique de pointe, de manière comparable aux modèles à champ de phase (voir partie suivante). Il faut cependant remarquer que la taille de maille utilisée est plus d'un ordre de grandeur supérieure à celle que nécessite la description d'une interface solide/liquide, même diffuse.

Le modèle a cependant permis de simuler la TCE en 2D sur un système d'environ 1 mm^2 constitué d'Al-Cu. Une comparaison qualitative avec le modèle de Hunt (Hunt J.D 1984) est effectuée et les mêmes tendances sont retrouvées. Les auteurs avancent également que la zone maximale de surfusion lors de la solidification colonnaire n'est pas située directement en avant des pointes mais dans l'espace interdendritique entre deux bras colonnaires. Ce résultat est corroboré par les travaux de Badillo et Beckermann (Badillo A. 2006).

McFadden et Browne (McFadden S. 2009) ont proposé un autre type de modèle pour la modélisation directe des structures de solidification. En réalité seule la structure équiaxe est directement modélisée car le modèle macroscopique de suivi de la position du front établi par Browne et Hunt (H. J. Browne D.J 2004) est utilisé. Donc l'orientation cristallographique et la compétition équiaxe-colonnaire près du moule ne sont pas considérées par le modèle.

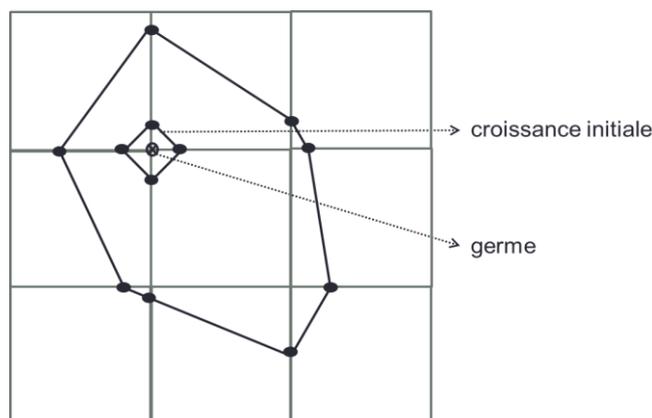


Figure I.7-10 Le germe d'un grain équiaxe, son enveloppe initiale après germination et l'enveloppe à un moment ultérieur de la croissance. D'après (McFadden S. 2009).

Contrairement au modèle de Mirihanage et coll. présenté précédemment (B. D. Mirihanage W.U 2010), cette fois-ci l'évolution de chaque grain équiaxe est calculée. Plutôt que de supposer la

forme de l'enveloppe équiaxe comme les modèles CAFE, les auteurs font un suivi réel de l'enveloppe du grain comme schématisé sur la Figure I.7-10. Chaque segment constituant l'enveloppe du grain équiaxe se déplace à sa propre vitesse, calculé par un modèle de type KGT (G. B. Kurz W. 1986) . La solidification dans la zone pâteuse équiaxe et colonnaire est calculée par le modèle de Scheil. Le défaut principal de ce type de méthode est d'être très coûteux en temps de calcul puisque la description de chaque grain est complexifiée à mesure qu'il croît. Il est par ailleurs difficile de traiter des phénomènes comme la refusion ou le mouvement des grains à l'aide de ce type de modèle. Pour les mêmes raisons, l'application de ce type de modèle en trois dimensions est difficilement envisageable.

Les auteurs présentent alors une comparaison avec les expériences de Gandin (Gandin Ch.-A 2000) sur un alliage Al-7% pds Si. Les comparaisons avec l'expérience sur la position de la TCE et l'évolution temporelle de la température restent qualitatives.

I.7.2.b Modèles à l'échelle microscopique

Ce type de modèle a pour but de calculer directement l'évolution de l'interface solide/liquide. Par conséquent, les modèles présentés ci-après peuvent s'affranchir des modèles de cinétique de pointe afin de décrire la croissance des grains.

Cependant les modèles qui suivent véritablement la position exacte de l'interface (Tryggvason G. 2001) (et fonctionnant sur un principe similaire au modèle de McFadden et Browne (McFadden S. 2009) mais à l'échelle de l'interface) sont trop complexes à mettre en œuvre et coûteux numériquement pour être appliquées largement à la solidification des alliages (Plapp M. 2007). De même les méthodes telles que le « level-set » ou le « Volume of Fluid » (VOF) (Lakehal D. 2002) restent principalement appliquées à des corps purs pour des raisons similaires.

Une des méthodes les plus utilisées est le champ de phase. La transition entre la phase liquide et solide se fait continûment sur une distance finie, d'environ un ou deux ordres de grandeur plus grande que l'épaisseur réelle de l'interface qui est d'environ un nanomètre.

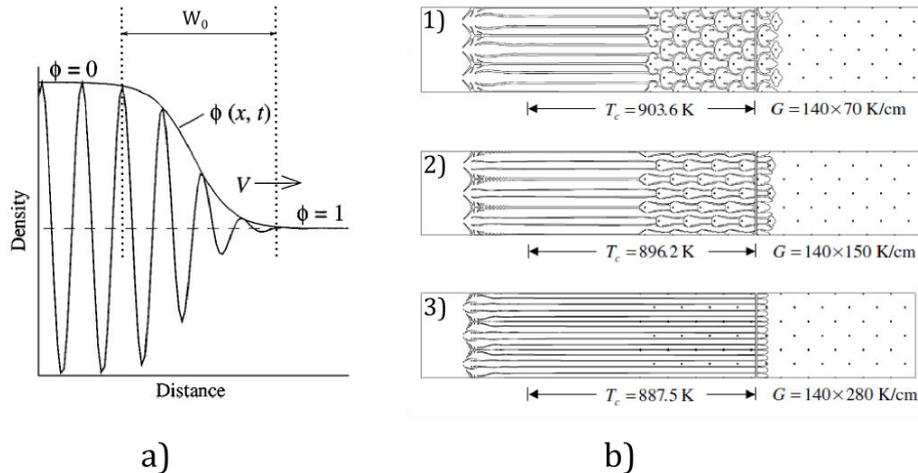


Figure I.7-11 a) Schéma illustrant l'interprétation physique liant la transition de phase entre le solide (à gauche) et le liquide (à droite) avec le champ de phase ϕ . D'après (Boettinger W.J 2002). b) Résultats en champ de phase pour la morphologie des grains sur un alliage Al-3%pds Cu (Badillo A. 2006). Le gradient thermique imposé augmente du cas 1 ($G \approx 10^6 K \cdot m^{-1}$) au cas 3 ($G \approx 4 \cdot 10^6 K \cdot m^{-1}$).

Sur la Figure I.7-11.a, la fonction ϕ nommée champ de phase varie ainsi entre $\phi = 0$ (ici la phase solide) et $\phi = 1$ quand les atomes sont considérés comme étant au sein du liquide. La taille de l'interface diffusive ainsi définie est notée W_0 .

Badillo et Beckermann (Badillo A. 2006) sont les premiers à avoir étudié avec un tel modèle la TCE pour la solidification d'un alliage Al-3% Cu (en 2D et en régime diffusif). De par la taille de maille utilisée ($\Delta x \sim 5 \cdot 10^{-8} m$), la zone de calcul est considérablement réduite ($\sim 10^{-4} \times 10^{-5} m$) et elle est « translaturée » au cours du tirage de l'alliage dans le gradient thermique supposé établi et constant. En conséquence, les densités de germes utilisées sont élevées ($10^{13} \lesssim n_{eqx} \lesssim 10^{15} grains \cdot m^{-3}$) ainsi que les valeurs imposées du gradient thermique ($G \sim 10^6 K \cdot m^{-1}$). Par conséquent les tailles finales de grains sont très faibles. Cependant, comme reproduit sur la Figure I.7-11.b, le modèle permet de reproduire l'évolution morphologique des structures et on peut alors observer une TCE pour les gradients les plus faibles avec des grains équiaxes relativement peu allongés devant des grains colonnaires.

Par la suite, Li et coll. (W. J. Li J. 2007) ont également étudié la TCE dans un système 2D de taille comparable constitué d'un alliage Ni-Cu. La température est considérée uniforme et un taux de refroidissement \dot{T} constant est appliqué. Le modèle montre que lorsque \dot{T} augmente, la structure équiaxe est favorisée.

Plus récemment, Viardin et coll. (Viardin A. 2011) ont présenté des résultats de TCE en 2D sur un alliage organique avec un modèle de champ de phase. Les auteurs concluent que les modélisations en 2D ne reproduisent pas les résultats expérimentaux (Z. G. Sturz L. 2011) de manière satisfaisante et présentent par la suite le premier résultat en 3D de TCE avec un modèle de champ de phase. Cependant, en 3D seul un bras primaire colonnaire est modélisé, au prix d'un effort numérique important.

I.8. Conclusion de l'étude bibliographique

Dans le Tableau 3, on a comparé les modèles indirects. On se limite également aux modèles basés sur la technique de la prise de moyenne. En effet, le code SOLID développé à Nancy étant lui-même à prise de moyenne volumique, les modèles à prise de moyenne de la littérature ont été classés selon différents critères qui nous paraissent pertinents afin d'établir le modèle colonnaire-équiaxe développé par la suite.

Au vu des applications du modèle désiré, nous avons identifié les caractéristiques générales suivantes :

- Pouvoir simuler la croissance des deux types de structures : colonnaires et équiaxes.
- Etudier l'influence du mouvement des grains équiaxes sur la TCE (Cone2D prend déjà en compte le mouvement des grains équiaxes).
- Etre le moins coûteux possible en temps de calculs (de sorte à pouvoir être utilisé sur des systèmes de taille industrielle).
- Inclure les mécanismes de TCE par blocage mécanique et blocage solutal.
- Laisser la possibilité de prédire la TEC, observée expérimentalement lors de la solidification des lingots.
- Etre applicable à la solidification en lingot et aussi en coulée continue.

La description des deux types de structures séparément est un prérequis pour les modèles indirects. On remarque qu'assez peu de modèles prennent en compte le mouvement des grains équiaxes et son influence sur la TCE car l'implémentation est plus difficile et le coût en temps de calcul est nettement supérieur. Pourtant, les auteurs comme Ludwig et coll. ont pu montrer l'impact des phénomènes comme la sédimentation sur la TCE. On remarque aussi qu'aucun des critères de TCE et des modèles analytiques présentés en Chapitre I.6 ne prennent en compte le mouvement des grains équiaxes.

On peut également noter à ce sujet que les modèles de cinétique de pointe utilisés ne tiennent pas non plus compte de l'influence de la convection sur la vitesse de croissance.

La forme des enveloppes utilisées pour décrire les deux types de structures reste généralement simple. De manière intéressante, plusieurs auteurs adoptent la même forme (sphérique) à la fois pour les grains équiaxes et colonnaires. Martorano et coll. (B. C. Martorano M.A 2003) et Ciobanas et Fautrelle (Ciobanas A.I 2007) ont justifié leur choix par le fait que l'erreur réalisée sur les distances entre grains et les longueurs de diffusion pouvait être négligée considérant les approximations réalisées par ailleurs sur ces grandeurs. Ludwig et coll. (L. A. Wu M. 2010) ont mené par la suite une étude paramétrique sur l'influence du type d'enveloppe et confirmé que la forme choisie pour les structures colonnaires avait peu d'influence sur la prédiction de la TCE.

La plupart des modèles considèrent également un nombre limité de « phases » (on comprend par phase ici le solide, les liquides intra- et extragranulaire de chaque structure équiaxe et colonnaire) afin d'obtenir des temps de calculs raisonnables. Cependant, la prise en compte d'un nombre limité de « phases » implique que les structures mixtes (c'est-à-dire les volumes qui contiennent à la fois le front colonnaire et des grains équiaxes) ne sont généralement pas traitées.

C'est pourtant devant le front que la surfusion dans le liquide est la plus élevée et le plus souvent la croissance des grains équiaxes (jusqu'à la fraction de blocage g_{Hunt}) se fait principalement dans une zone de taille assez réduite devant le front (L. P. Dong H.B 2005).

Les modèles qui ne décrivent pas les structures mixtes nécessitent alors une discrétisation suffisamment fine ou emploi des techniques de raffinement du maillage qui sont complexes en 2D et en 3D et peuvent rallonger les temps de calcul.

D'un autre côté, les modèles détaillant les structures mixtes n'ont que rarement été appliqués à des systèmes de taille industrielle de par leur coût en temps de calcul. Ludwig et coll. ont pu appliquer une version de leur modèle à un lingot d'acier de 2,45t mais les grains étaient considérés globulaires (W. M. Li J. 2014), ou avec une morphologie fixée (W. M. Li J. 2014).

Seul le modèle de Ludwig et coll. (L. A. Wu M. 2010) a été appliqué à des systèmes de taille industrielle en prenant en compte le mouvement du solide. Les comparaisons à des mesures expérimentales sur des lingots industriels sont rares faute de données suffisamment précises sur les conditions limites thermiques, les propriétés des alliages coulés et les inconnues sur les densités de germes présents dans le liquide.

Concernant les mécanismes de blocage du front, les modèles intègrent au moins un des deux mécanismes : « mécanique » (fraction limite de grains équiaxes) ou solutal. On peut noter que la valeur de la fraction de blocage g_{Hunt} reste un paramètre du modèle : Plusieurs auteurs (Vannier I. 1995), (B. C. Martorano M.A 2003), ont montré que cette valeur a un impact faible sur la TCE tandis que d'autres travaux (Biscuola V.B 2008), (A. M. Wu M. 2012) signalent un effet non-négligeable du choix de g_{Hunt} sur la position calculée de la TCE.

Afin de prédire la Transition-Equiaxe-Colonnaire (TEC), il semble adapté de baser la propagation du front colonnaire sur l'état des volumes voisins et d'éviter les modèles de propagation qui supposent une structure colonnaire forcément continue depuis le moule. Par exemple, le modèle de Ludwig et coll. (L. A. Wu M. 2007) semble le plus flexible et doit permettre d'intégrer un modèle de TEC.

Ce modèle de propagation semble également être bien adapté à l'application aux coulées continues. En effet, les seuls modèles qui aient été appliqués à des coulées continues industrielles sont ceux de M'Hamdi (M'Hamdi M. 1999) (en l'absence de mouvement des grains et en utilisant un système complexe de double maillage) et Ludwig et coll. (Hao J. 2011) (avec mouvement des grains mais en fixant à l'avance la surfusion au front colonnaire et en considérant des grains équiaxes globulaires). On peut noter également que les modèles CAFE ont été appliqués à la coulée continue de barreaux de petite taille (D. J.-L. Gandin Ch.-A. 1999).

Finalement, on remarque que tous les modèles supposent que l'unique origine des grains équiaxes est la germination hétérogène volumique. Ainsi les germes sont supposés initialement répartis de manière uniforme dans le liquide. Les phénomènes pouvant être modélisés de la sorte sont la germination hétérogène sur des particules inoculantes ou la germination « Big-Bang » où les grains sont créés principalement durant le remplissage. Notamment, on peut voir que le phénomène de fragmentation est complètement négligé dans tous les modèles. Or, comme on l'a vu au Chapitre I.6, la fragmentation est généralement considérée comme une source principale de grains équiaxes dans les coulées de taille industrielle non-inoculées d'acier.

Références du modèle	Propagation du front colonnaire	Modèle cinétique de croissance	Mécanismes de TCE	Nombre de « phases »	Morphologie des enveloppes	Prise en compte des structures mixtes	Mouvement des phases	Validation expérimentale
Flood et Hunt (Flood S.C 1987)	Suivi d'un seul point du front	$V_{tip} \propto \Delta T^2$	Blocage « mécanique » ($g_{Hunt} = 0,49$)	2	<u>Colonnaire</u> : n/a (front plan) <u>Equiaxe</u> : globulaire sphérique	Non. Raffinage du maillage nécessaire.	Non	Non
Beckermann et coll. (B. C. Martorano M.A 2003)	Suivi d'un seul point du front (extrapolé en 2D le long d'une isotherme)	LGK/KGT	Blocage solutal	3	<u>Colonnaire</u> : cylindre/sphère <u>Equiaxe</u> : sphère	Non. Raffinage du maillage nécessaire.	Non	Comparaison en 1D sur des alliages Al-Cu et Sn-Pb avec une erreur maximale ~20% sur la position de la TCE.
Vannier (Vannier I. 1995)	Critère sur le temps de passage du front puis propagation aux voisins	LGK	Blocage « mécanique » ($g_{Hunt} = 1,0$)	3	<u>Colonnaire</u> : n/a (front plan) <u>Equiaxe</u> : sphérique	Non	Mouvement du liquide	Comparaison quantitative en 1D sur un alliage Al-7%pds Si. Résultats qualitatifs sur des lingots d'acier 6,2 t et 65 t.
M'Hamdi (M'Hamdi M. 1999)	Position du front estimée à partir de la carte de fraction solide.	KGT	Blocage « mécanique » ($g_{Hunt} = 1,0$)	3	<u>Colonnaire</u> : n/a (front plan) <u>Equiaxe</u> : sphérique	Non	Mouvement du liquide	Comparaison qualitatives à des coulées continues d'acier.
Jacot et coll. (Jacot A. 2000)	Suivi de la ligne joignant les pointes primaires	$V_{tip} \propto \Delta T^2$	Blocage « mécanique » ($g_{Hunt} = 0,49$)	3 (4 avec les deux eutectiques équiaxes)	<u>Colonnaire</u> : n/a <u>Equiaxe</u> : globulaire sphérique	Oui	Non	Comparaison qualitative avec une coulée de taille réduite. Résultats qualitativement satisfaisants.
Roux (Roux P. 2005)	Critère sur le gradient de surface spécifique colonnaire	Déduit de la vitesse de solidification	Blocage solutal	3	<u>Colonnaire</u> : cylindre <u>Equiaxe</u> : sphère	Oui	Oui	Comparaison qualitative en 2D sur un alliage Sn-Bi.
Ludwig et coll. (Ludwig A. 2005), (L. A. Wu M. 2010)	Critère sur la longueur du front dans le volume puis propagation aux voisins	LGK/KGT	Blocage « mécanique » ($0,2 \leq g_{Hunt} \leq 0,49$) et blocage solutal	5 (3 pour les coulées de taille industrielle)	<u>Colonnaire</u> : cylindre <u>Equiaxe</u> : sphère/octaèdre	Oui	Oui	Comparaison avec la ségrégation axiale de lingots 2,45 t et 25 t. Comparaison quantitative en 2D sur un alliage Al-4%pds Cu

Martorano et Biscuola (B. V. Martorano M.A 2006)	Suivi de la ligne joignant les pointes primaires	LGK	Blocage « mécanique » ($g_{\text{Hunt}} = 0,49$)	3	<u>Colonnaire</u> : n/a <u>Equiaxe</u> : sphère	Non	Non	Pas de comparaison.
Ciobanas et Fautrelle (Ciobanas A.I 2007)	Suivi d'un seul point du front	LGK	Blocage « mécanique » ($g_{\text{Hunt}} = 0,49$) et blocage solutal	5	<u>Colonnaire</u> : sphère <u>Equiaxe</u> : sphère	Oui	Non	Comparaison en 1D sur des alliages Al-Cu et Sn-Pb avec une erreur maximale ~20% sur la position de la TCE.
Dagner et coll. (Dagner J. 2008)	Critère sur la longueur du front dans le volume puis propagation aux voisins	LGK	Blocage « mécanique » ($g_{\text{Hunt}} = 0,49$)	3	<u>Colonnaire</u> : cylindre <u>Equiaxe</u> : sphère	Non	Non	Comparaison qualitative en 2D sur un alliage Al-3%pds Si. Erreur ~15% sur la position de la TCE.
Mirihanage et coll. (B. D. Mirihanage W.U 2010)	Suivi de la ligne joignant les pointes primaires	$V_{\text{tip}} \propto \Delta T^n$	Blocage « mécanique » ($g_{\text{Hunt}} = 0,49$)	3	<u>Colonnaire</u> : n/a <u>Equiaxe</u> : sphère	Oui	Oui	Comparaison qualitative en 2D sur un alliage Al-7%pds Si. Comparaison quantitative sur un alliage inoculé Al-7%pds Si en microgravité.

Tableau 3 : Les différents modèles à prise de moyenne dans la littérature appliqués à la TCE

II. Représentation et modélisation des structures colonnaires et des structures équiaxes

II.1. Introduction : Représentation des structures équiaxes et colonnaires

Le modèle développé dans la suite de ce travail est basé sur le modèle préexistant dans SOLID, un code de calcul applicable à la coulée statique et continue, développé au laboratoire IJL à Nancy. Il s'agit d'un code Euler-Euler, c'est-à-dire que les phases liquide et solide sont décrites séparément par une approche eulérienne. SOLID est également basé sur la technique de prise de moyenne volumique des principales équations de la solidification. Comme on l'a dit dans le chapitre I.7, les variables physiques sont alors moyennées à l'échelle du VER. Sur les Figures II.1-1.a et II.1-1.b on a représentés des structures équiaxes à l'échelle d'un VER avant et après prise de moyenne respectivement. On voit qu'après prise de moyenne, on considère une taille et une morphologie unique à l'échelle du VER et on suppose qu'on décrit, localement, en moyenne les caractéristiques réelles des grains à cet endroit.

SOLID prend en compte le mouvement des phases liquide et solide, le mouvement des germes ainsi que la morphologie des grains équiaxes qui croissent dans le liquide. Il a déjà été utilisé pour prédire la macroségrégation et la taille des structures dans des lingots d'acier (Vannier I. 1995), (R. B. Combeau H. 2006), (Z. M. Combeau H. 2009), (K. A. Combeau H. 2012) ainsi que récemment en coulée semi-continue (Bedel M. 2014).

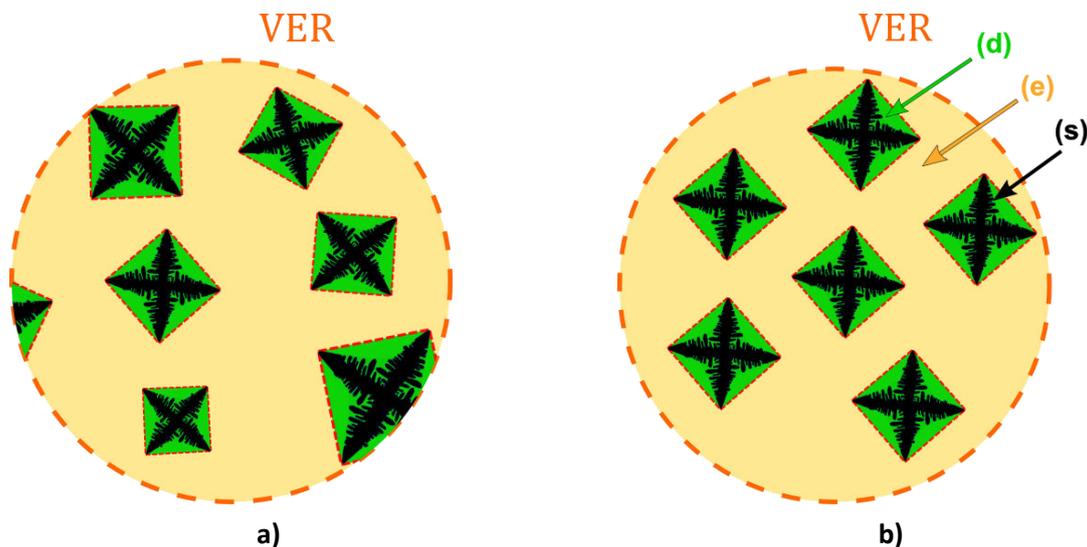


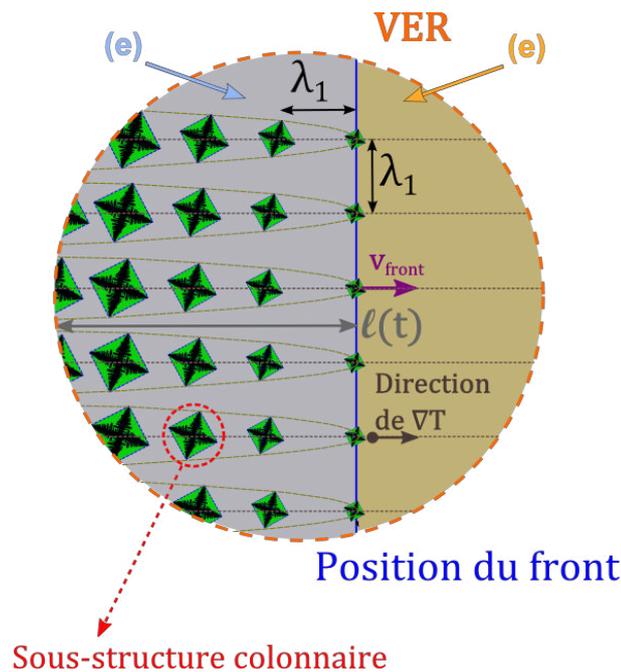
Figure II.1-1 : Représentation de structures équiaxes dans un Volume Élémentaire Représentatif (VER). a) Avant prise de moyenne. b) Après prise de moyenne. La phase solide (s) et les liquides intragranulaire (d) et extragranulaire (e) sont indiqués.

Le modèle à prise de moyenne utilisant le concept d'enveloppe déjà évoqué dans la partie bibliographique, les Figure II.1-1.a et Figure II.1-1.b mettent en évidence l'existence des différentes

« phases » : le solide (en noir), le liquide intragranulaire (en vert) et le liquide extragranulaire (en orangé).

L'objet du chapitre II.2 sera ainsi de rappeler le modèle spécifique à la modélisation de structures équiaxes uniquement et les principaux phénomènes : la germination, la croissance et le transport. Des détails sur le modèle final utilisé dans le cadre de ce travail peuvent être trouvés ailleurs (Bedel M. 2014).

La modélisation des structures colonnaires sera l'objet du chapitre II.3. Au vu de notre étude bibliographique, on a schématisé sur la Figure II.1-2 la représentation des structures colonnaires.



Sous-structure colonnaire
 Figure II.1-2 Schéma des structures colonnaires avant prise de moyenne. Les bras primaires sont schématisés par les pointillés verts. Le front colonnaire croît à la vitesse v_{front} dans le VER. Chaque « sous-structure » (entourée en rouge) possède une taille finale λ_1 constante. $\ell(t)$ est la longueur du front colonnaire dans le VER. On a mis également en évidence ici l'existence de deux liquides extragranulaires : colonnaire (noté (e) en bleu) et devant le front (noté (e) en orange).

Comme plusieurs auteurs (B. C. Martorano M.A 2003), (Ciobanas A.I 2007), nous avons choisi de modéliser chaque bras primaire colonnaire comme un alignement de « sous-structures ». Un exemple d'une telle structure est entouré en rouge sur la Figure II.1-2. L'intérêt de choisir cette représentation est que pour la description de la croissance de chacune de ces sous-structures colonnaires, on peut utiliser les mêmes grandeurs morphologiques (distances de diffusion, surfaces spécifiques) que pour un grain équiaxe. Nous supposons également comme les auteurs précédents que les sous-structures sont séparées par la distance λ_1 , la distance dendritique primaire. Ce paramètre est supposé constant dans le cadre de notre travail. Dans le chapitre II.3.1, nous vérifions que l'erreur réalisée en choisissant cette façon de présenter les enveloppes colonnaires reste faible dans le cadre des modèles à prise de moyenne.

Par ailleurs l'apparition des structures colonnaires se fait de manière très différente de la germination équiaxe. Il faut notamment suivre au cours du temps l'avancée du front colonnaire dans le système (caractérisée par v_{front}). Ce sera l'objet du chapitre II.3.2.

Enfin, sur la Figure II.1-2, on a mis en évidence les différentes « phases » que nous serons amenés à distinguer dans les volumes contenant le front colonnaire. Notamment, on verra dans le chapitre II.3.3 que pour décrire précisément la croissance des structures dans la zone proche du front, nous distinguerons le liquide extragranulaire colonnaire (en bleu clair) du liquide extragranulaire de la zone entièrement liquide ou équiaxe (en orange). Ceci constitue une des principales originalités de notre modèle, là où les modèles de la littérature supposent un seul liquide extragranulaire. Par conséquent, le volume sera séparé en deux zones dans le volume du front : la zone « colonnaire » caractérisée par la ligne joignant les pointes primaires du front et la zone liquide ou équiaxe devant le front.

II.2. Modélisation des structures équiaxes

Dans la suite on va résumer les principaux phénomènes modélisés par le modèle SOLID dans le cadre des structures équiaxes uniquement. Un aperçu plus détaillé du modèle est présenté en Annexe A.

M. Zaloznik et H. Combeau ont montré qu'il est possible, en pratique, d'effectuer une séparation des échelles temporelles durant l'ensemble du phénomène de solidification (C. H. Zaloznik M. 2010), (K. A. Zaloznik M. 2010). D'une part on peut résoudre les équations macroscopiques de transport sans la contribution de la croissance des grains. D'autre part, une fois que le mouvement du liquide et du solide a été pris en compte, on résout les phénomènes microscopiques de changement de phase et de diffusion chimique lors d'une deuxième étape séparée (la diffusion chimique macroscopique étant négligée).

Lors de cette deuxième étape de croissance à l'échelle microscopique, le modèle utilise le découpage du macro-pas de temps Δt en plusieurs « micro-pas de temps » δt , méthode proposée par Ph. Thévoz et M. Rappaz (Thévoz Ph. 1989). Remarquons que l'étape de germination dans SOLID n'est pas couplée dans le modèle « micro ». Il s'agit donc pour l'instant d'une étape intermédiaire entre le transport et le modèle microscopique de croissance. Un algorithme général du modèle est présenté en Figure II.2-1 . Un algorithme du modèle de germination et de croissance équiaxe après les phénomènes de transport est présenté en Figure II.2-2.

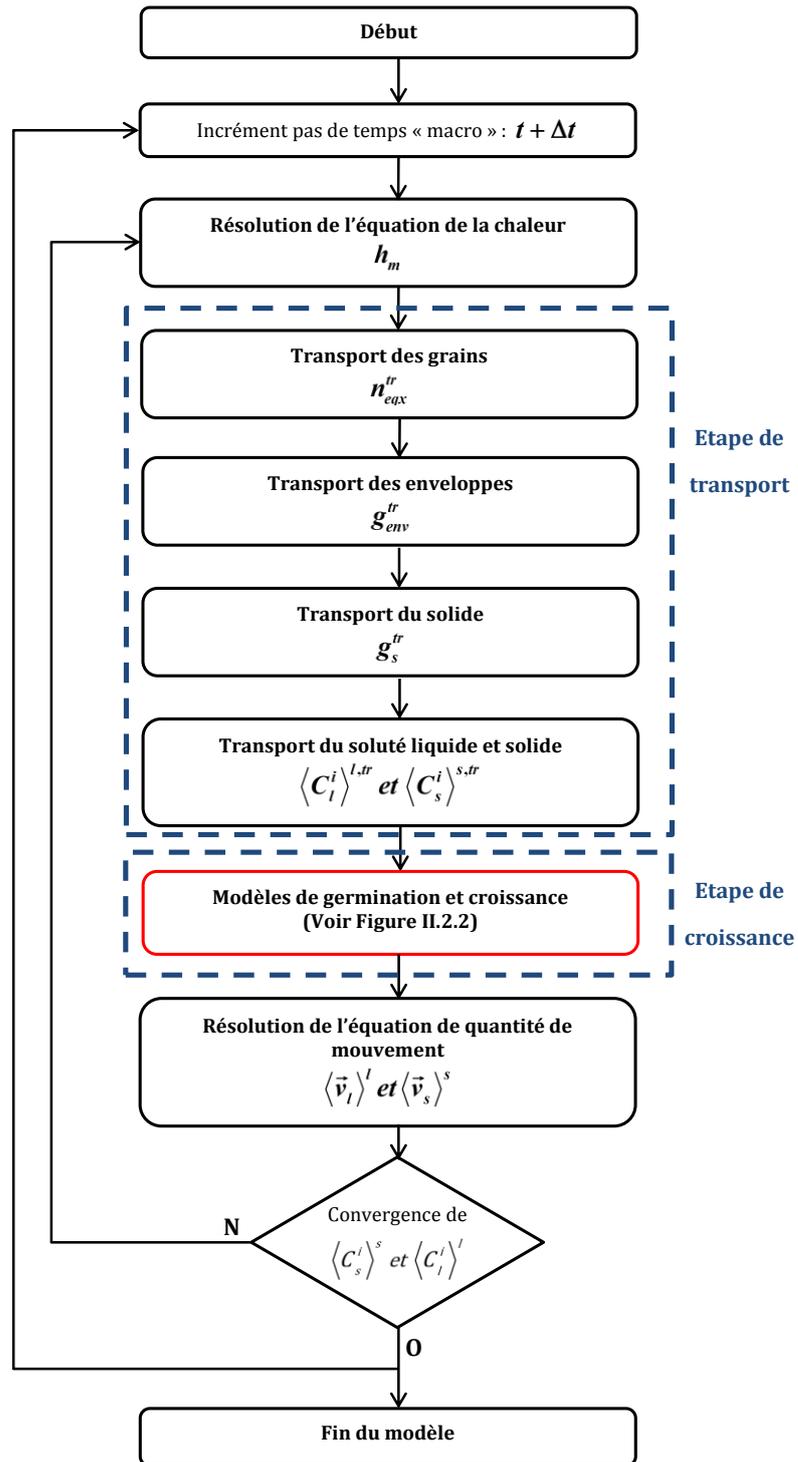


Figure II.2-1 : Organigramme général du modèle avec l'étape de transport résolue sur le pas de temps « macro » Δt et l'étape de croissance résolue sur le pas de temps « micro » δt (voir Figure II.2-2). D'après (C. H. Zaloznik M. 2010).

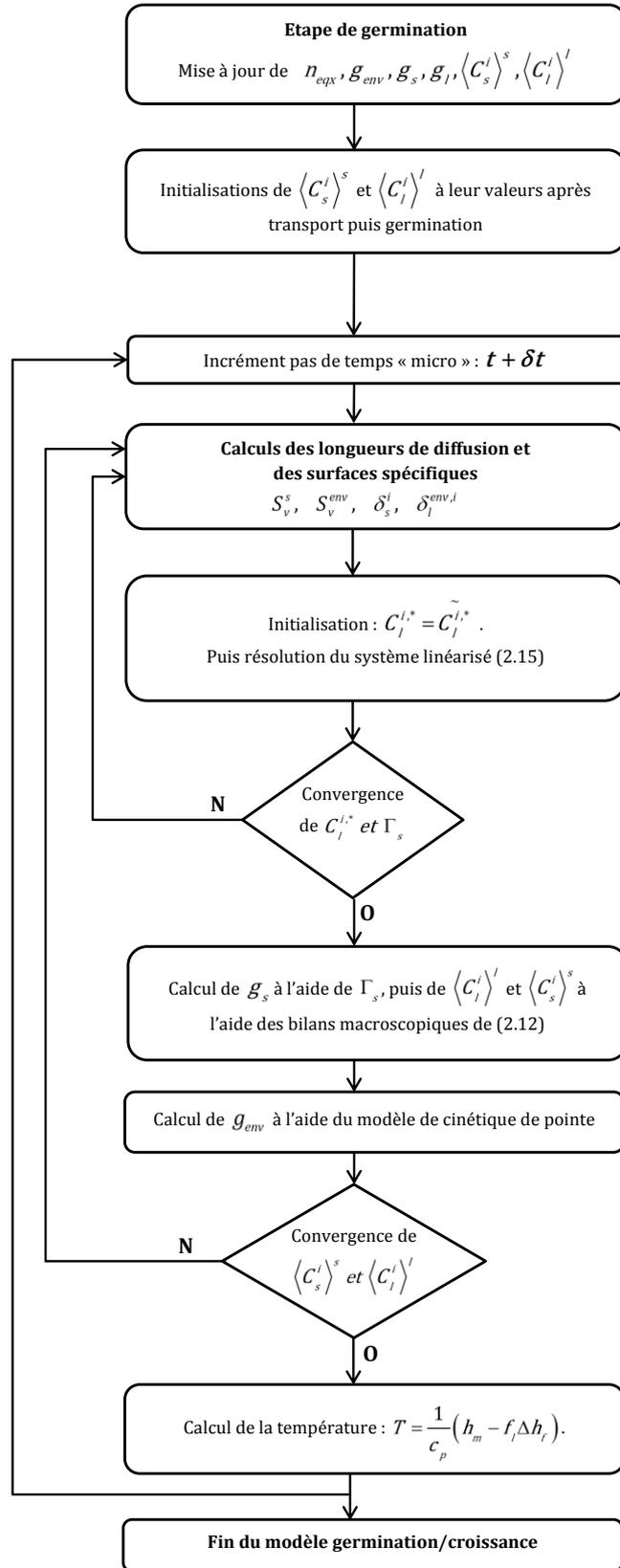


Figure II.2-2 : Organigramme du modèle de germination et croissance des structures équiaxes seules.

○ L'étape de transport :

Lors de l'étape de transport, une des particularités du modèle SOLID est de ne considérer que deux milieux : la phase solide et la phase liquide. Le liquide total (l) est considéré comme la somme du liquide intragranulaire (d) et extragranulaire (e). Cette distinction de deux liquides est notée sur les figures. Afin de traiter la présence de ces deux liquides dans le cadre des modèles à prise de moyenne, plusieurs hypothèses sont possibles.

C. Beckermann *et coll.* ont mis en place une partition de l'écoulement où une partie traverse l'enveloppe du grain, considérée comme un milieu poreux à l'échelle des bras secondaires, et l'autre partie se retrouve dans l'espace entre les grains (B. C. Wang C.Y 1996), (A. S. Wang C.Y 1995).

A. Ludwig *et coll.* font l'hypothèse, dans leur modèle le plus récent, que les phases solide et liquide intragranulaire se déplacent ensemble, donc que : $\rho_d^{tr} = \rho_s^{tr}$ et $\langle \vec{v}_l \rangle^d = \langle \vec{v}_s \rangle^s$ (L. A. Wu M. 2009). Ici ρ_i désigne les masses volumiques et $\langle \vec{v}_i \rangle$ les vitesses moyennes des phases. Néanmoins cette hypothèse n'est pas justifiée par les auteurs et de plus elle implique que le liquide intragranulaire des structures colonnaires est immobile en coulée statique.

Dans SOLID, on considère que les liquides intra- et extragranulaires forment un seul milieu hydrodynamique qui est le liquide total, on a : $\rho_e^{tr} = \rho_d^{tr} = \rho_l^{tr}$ et $\langle \vec{v}_l \rangle^d = \langle \vec{v}_l \rangle^e = \langle \vec{v}_l \rangle^l$. C'est l'hypothèse généralement admise dans les modèles à prise de moyenne où seuls deux milieux sont considérés (Ni J. 1991).

Considérant ces hypothèses, on peut alors écrire pour la conservation de la masse :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial(\rho_s g_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_s g_s \langle \vec{v}_s \rangle^s) = 0 \\ \frac{\partial(\rho_l g_d)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l g_d \langle \vec{v}_l \rangle^l) = 0 \\ \frac{\partial(\rho_l g_e)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l g_e \langle \vec{v}_l \rangle^l) = 0 \end{array} \right\} \frac{\partial(\rho_l g_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l g_l \langle \vec{v}_l \rangle^l) = 0 \quad (2.1)$$

Pour chaque élément de soluté i on peut également écrire :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial(\rho_s g_s \langle C_s^i \rangle^s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_s g_s \langle C_s^i \rangle^s \langle \vec{v}_s \rangle^s) = 0 \\ \frac{\partial(\rho_l g_e \langle C_l^i \rangle^e)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l g_e \langle C_l^i \rangle^e \langle \vec{v}_l \rangle^l) = 0 \\ \frac{\partial(\rho_l g_d \langle C_l^i \rangle^d)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l g_d \langle C_l^i \rangle^d \langle \vec{v}_l \rangle^l) = 0 \end{array} \right\} \frac{\partial(\rho_l g_l \langle C_l^i \rangle^l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l g_l \langle C_l^i \rangle^l \langle \vec{v}_l \rangle^l) = 0 \quad (2.2)$$

Les équations de droite pour le liquide total sont simplement la somme des contributions des deux liquides (d) et (e) avec $g_l = g_d + g_e$ et $\rho_l g_l \langle C_l^i \rangle^l = \rho_d g_d \langle C_l^i \rangle^d + \rho_e g_e \langle C_l^i \rangle^e$.



Figure II.2-3 : Schéma d'un grain équiaxe en 2D. a) : Notion d'enveloppe, reliant les pointes des bras primaires et secondaires et comparaison avec l'enveloppe octaédrique utilisée dans SOLID. b) : Illustration des phases solide (en noir), liquide intragranulaire (en vert) et liquide extragranulaire (en jaune-orangé).

La fraction de grain g_{env} doit aussi être transportée. Par contre elle reste attachée au transport du solide par le modèle d'enveloppe comme l'indique la Figure II.2-3. On a donc :

$$\frac{\partial g_{env}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(g_{env} \langle \vec{v}_s \rangle^s \right) = 0 \quad (2.3)$$

On doit aussi préciser le bilan de population des grains équiaxes lors du transport :

$$\frac{\partial n_{eqx}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(n_{eqx} \langle \vec{v}_s \rangle^s \right) = 0 \quad (2.4)$$

Lorsqu'il y a mouvement des germes, on doit également réaliser un bilan de population sur la densité de germes n_{nucl}^j de chaque classe.

$$\frac{\partial n_{nucl}^j}{\partial t} + \nabla \cdot \left(n_{nucl}^j \langle \vec{v}_l \rangle^l \right) = 0 \quad 1 \leq j \leq N_{nucl} \quad (2.5)$$

N_{nucl} est le nombre de classes de germes dont la signification est donnée plus en détail dans la partie suivante. On remarque que quelle que soit la classe du germe (donc sa taille) on néglige son coefficient de traînée et on suppose qu'il se déplace à la vitesse du liquide. Cette hypothèse est justifiée par le fait que la taille initiale des germes est habituellement de l'ordre de quelques micromètres (B. A. Greer A.L 2000).

o L'étape de germination et de fragmentation :

Entre le transport et le modèle de croissance se trouve l'étape de création de nouveaux grains. Comme on l'a vu lors de l'étude bibliographique, il existe deux grandes catégories de phénomènes qui expliquent cette création de grains (Spittle J.A 2006) :

- La germination hétérogène c'est-à-dire la croissance des grains à partir de germes généralement déjà présents dans le liquide. C'est le mécanisme prédominant dans les alliages inoculés.

- Les phénomènes de détachement ou de fragmentation du solide dendritique. Souvent à partir de la zone de peau ou plus tard au cours de la solidification dans la zone pâteuse. C'est un mécanisme important dans les coulées non-inoculées d'aciers.

On peut alors écrire pour le bilan de population des grains :

$$\frac{\partial n_{eqx}}{\partial t} = \sum_{1 \leq j \leq N_{nucl}} \phi_{nucl}^j + \sum_{1 \leq i \leq N_{vois}} \phi_{frag}^i \quad (2.6)$$

ϕ_{nucl}^j correspond à la germination de la classe j de germes, pour un nombre N_{nucl} de classes de germes. On a :

$$\phi_{nucl}^j = \begin{cases} \frac{n_{nucl}^j}{dt} & \text{si } \Delta T \geq \Delta T_{nucl}^j \text{ et } n_{nucl}^j > 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.7)$$

Où ΔT est la surfusion locale et ΔT_{nucl}^j est la surfusion qui permet la croissance libre des germes de classe j .

Concernant la contribution de la fragmentation, nous verrons en détail la manière dont elle sera prise en compte une fois que la modélisation des structures colonnaires aura été détaillée.

D'un point de vue pratique, on peut voir que la contribution de la fragmentation dans un élément P de volume donné V_0 dépend de l'état de ses N_{vois} voisins. Chacun d'entre eux peut injecter un flux surfacique de grains dans le volume et on a donc :

$$\phi_{frag}^i = \frac{1}{V_0} \cdot \iint_{\partial\Omega_{P/i}} \phi_{frag}^i dS_i \quad (2.8)$$

Où $\partial\Omega_{P/i}$ est la surface de contact entre P et son voisin i . Le flux ϕ_{frag}^i n'est calculé que si le voisin i contient le front colonnaire et que ce dernier n'est pas bloqué (blocage « mécanique » par les enveloppes équiaxes). Ainsi, on suppose qu'un front colonnaire bloqué ne fragmente plus. La manière dont est calculé ϕ_{frag}^i sera précisée dans le chapitre III.

Afin de conserver la quantité de germes, il faut également effectuer un bilan de population pour chaque classe de germes :

$$\frac{\partial n_{nucl}^j}{\partial t} = -\phi_{nucl}^j \quad 1 \leq j \leq N_{nucl} \quad (2.9)$$

De plus, le modèle gère le phénomène de refusion. En cas de refusion locale de tout le solide, n_{eqx} est mis à 0 et la quantité de grains ainsi refondue est rajoutée à la 1^{ère} classe de germes.

En conséquence, les bilans de masse donnent :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial(\rho_s g_s)}{\partial t} = \rho_s V_{germ} \sum_{1 \leq j \leq N_{nucl}} \phi_{nucl}^j + \rho_s V_{frag} \sum_{1 \leq i \leq N_{vois}} \phi_{frag}^i = \Phi_s \\ \frac{\partial(g_{env})}{\partial t} = \frac{1}{\rho_s} \Phi_s \\ \frac{\partial(\rho_l g_l)}{\partial t} = -\Phi_s \end{array} \right. \quad (2.10)$$

Les bilans de soluté pour chaque élément i :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial(\rho_s g_s \langle C_s^i \rangle^s)}{\partial t} = k_i \langle C_l^i \rangle^l \Phi_s \\ \frac{\partial(\rho_l g_l \langle C_l^i \rangle^l)}{\partial t} = -k_i \langle C_l^i \rangle^l \Phi_s \end{array} \right. \quad (2.11)$$

Quel que soit la classe de germe on utilise le même rayon initial de grain. De même, on considère un rayon initial unique des fragments.

En général la contribution de la germination est faible dans les bilans de masse et de soluté. On peut supposer qu'il en sera de même pour la fragmentation si la taille initiale des fragments est suffisamment faible et si le temps caractéristique de fragmentation est faible ou du même ordre de grandeur que le temps de solidification des grains. Si ce n'est pas le cas, il devient nécessaire de réaliser des bilans similaires de masse et de soluté sur les volumes voisins, d'où proviennent les fragments.

o [L'étape de croissance des grains :](#)

Lors de l'étape de croissance, on reprend la séparation du liquide total en un milieu intragranulaire et un milieu extragranulaire. Les hétérogénéités importantes d'échelle et de composition qui existent entre ces deux milieux impliquent qu'il est nécessaire de les prendre en compte séparément afin de bien décrire le couplage entre germination et croissance des grains (Bedel M. 2014).

A la suite de travaux initiés par M.Rappaz *et coll.* (T. P. Rappaz M. 1987) puis Wang et Beckermann (B. C. Wang C.Y 1996), K.Tveito a proposé un modèle simplifié de croissance dendritique dite à trois phases (Tveito K. 2014).

Dans le cadre de ce modèle, on suppose que le soluté dans le liquide intragranulaire possède une composition homogène et qu'il se trouve à l'équilibre, c'est-à-dire $\langle C_l^i \rangle^d = C_l^{i,*}$. La Figure II.2-4 illustre alors les profils de soluté dans chaque milieu.

De plus, comme Tveito a montré que l'on pouvait négliger au cours de la croissance tous les termes en $\frac{\partial C_l^{i,*}}{\partial t}$.

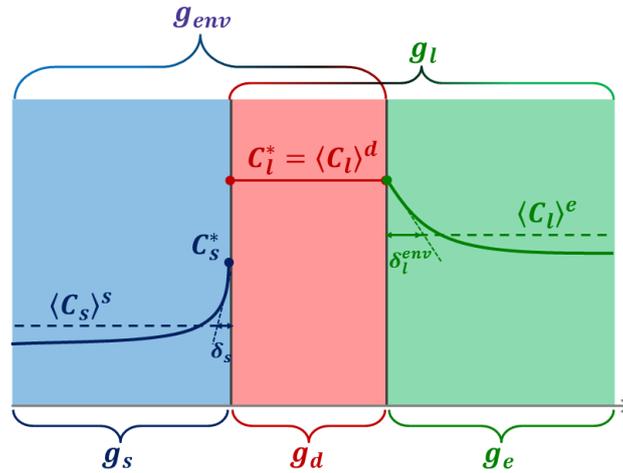


Figure II.2-4 : Schéma illustratif des trois milieux dans le modèle de croissance. D'après (Bedel M. 2014).

On obtient alors les équations suivantes qui correspondent respectivement pour l'élément d'alliage i : au bilan de soluté pour la phase solide et au bilan de soluté pour la phase liquide totale (on a $g_e + g_d = g_l$), au bilan de masse solide et au bilan microscopique à l'interface solide/liquide.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial (\rho_s g_s \langle C_s^i \rangle^s)}{\partial t} = \Gamma_s C_s^{i,*} + \frac{\rho_s S_v^s D_s^i}{\delta_s^i} (C_s^{i,*} - \langle C_s^i \rangle^s) \\ \frac{\partial (\rho_l g_l \langle C_l^i \rangle^l)}{\partial t} = -\Gamma_s C_l^{i,*} + \frac{\rho_l S_v^{env} D_l^i}{\delta_l^{i,env}} \frac{g_l}{g_e} (C_l^{i,*} - \langle C_l^i \rangle^l) \\ \frac{\partial g_s}{\partial t} = \frac{\Gamma_s}{\rho_s} \\ \Gamma_s (C_l^{i,*} - C_s^{i,*}) = \frac{\rho_s S_v^s D_s^i}{\delta_s^i} (C_s^{i,*} - \langle C_s^i \rangle^s) + \frac{\rho_l S_v^{env} D_l^i}{\delta_l^{i,env}} \frac{g_l}{g_e} (C_l^{i,*} - \langle C_l^i \rangle^l) \end{array} \right. \quad (2.12)$$

Γ_s correspond à la masse de solide formé par unité de volume et de temps et donc :

$$\Gamma_s = \rho_s \frac{\partial g_s}{\partial t} \quad (2.13)$$

Les détails concernant les surfaces spécifiques (S_v^s, S_v^{env}) et les longueurs de diffusion ($\delta_s^i, \delta_l^{env,i}$) utilisées peuvent être trouvés ailleurs (Bedel M. 2014).

Couplé à la croissance du solide, l'enveloppe du grain croît également suivant la relation :

$$\frac{\partial g_{env}}{\partial t} = \Gamma_{env} = S_v^{env} v_{env} \quad (2.14)$$

La vitesse de l'enveloppe v_{env} se calcule à partir de la vitesse de pointe v_{tip} et dépend de la forme d'enveloppe choisie. Comme indiqué sur la Figure II.2-3, l'enveloppe des grains est supposée octaédrique dans SOLID. Cela revient à supposer que la vitesse de croissance des bras secondaires

est égale à celle des bras primaires en tout point de l'enveloppe du grain.

Dans ce cas, on a : $\frac{\partial g_{env}}{\partial t} = 4R_{bras}^2 n_{eqx} \frac{dR_{bras}}{dt}$ et $S_v^{env} = 4\sqrt{3}R_{bras}^2 n_{eqx}$ où R_{bras} est le rayon moyen local des grains. Comme par définition $\frac{\partial R_{bras}}{\partial t} = v_{tip}$, on trouve par identification que $v_{env} = \frac{v_{tip}}{\sqrt{3}}$. La vitesse de croissance v_{tip} est calculée à l'aide d'un modèle de cinétique de pointes, par exemple un de ceux présentés dans la partie bibliographie. Elle peut donc dépendre non seulement de la surfusion et des données thermodynamiques de l'alliage considéré, mais également de la nature de l'écoulement autour des pointes du grain.

D'un point de vue numérique, l'algorithme du modèle de croissance est schématisé sur la Figure II.2-2, on va le résumer ci-après. Rappelons que les valeurs initiales des grandeurs physiques pour la croissance sont celles qui sont déterminées à la fin de l'étape de transport.

Pour chaque pas de temps « micro » δt , il y a d'abord une première boucle de convergence générale sur les bilans macroscopiques de soluté dans le liquide et le solide, donc sur $\langle C_l^i \rangle^l$ et $\langle C_s^i \rangle^s$. A l'intérieur de cette première boucle, on commence par calculer les grandeurs microscopiques : $S_v^s, S_v^{env}, \delta_l^{env}, \delta_s^i$. Après quoi une deuxième boucle de convergence sur le taux de solidification Γ_s et les concentrations à l'équilibre $C_l^{i,*}$ est réalisée, qui correspond à la résolution du système suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \Gamma_s \tilde{C}_l^{i,*} (1 - k_i) = \rho_l S_v^{env} D_l^i \frac{g_l^0}{g_e^0} \frac{C_l^{i,*} - \langle C_l^i \rangle^l}{\delta_l^{i,env}} + \rho_s S_v^s D_s^i \frac{g_l^0}{g_e^0} \frac{k_i C_l^{i,*} - \langle C_s^i \rangle^s}{\delta_s^i} \quad 1 \leq i \leq N_{ele} \\ dh_m = c_p \left(T_f + \sum_{1 \leq i \leq N_{ele}} m_l^i C_l^{i,*} - T^0 \right) - \Delta h_f \left(df_s^{tr} + \frac{\Gamma_s}{\rho_s} dt \right) \end{array} \right. \quad (2.15)$$

Avec $N_{ele} + 1$ équations et autant d'inconnues le système est donc correctement déterminé.

La première équation correspond au bilan microscopique de soluté à l'interface entre le solide et le liquide. Afin de linéariser le système à résoudre, on utilise pour le terme de gauche la concentration à l'équilibre obtenue lors de l'itération précédente, $\tilde{C}_l^{i,*}$

La deuxième équation lie la variation d'enthalpie de mélange, résultant du bilan d'énergie, au taux de solidification.

Il faut rappeler que les variations des grandeurs physiques écrites ici sont calculées sur la base du pas de temps « microscopique » δt qui est une subdivision du pas de temps principal Δt . De même T^0, g_l^0, g_e^0 font références aux valeurs du pas de temps micro précédent. La quantité df_s^{tr} correspond à la variation due au transport de la fraction solide, rapportée à un pas de temps micro.

Après résolution du système (2.15), la nouvelle fraction d'enveloppe g_{env} est déterminée à partir de l'équation (2.14).

Enfin, après convergence des bilans macroscopiques et microscopiques, la température peut être obtenue directement, car $T = \frac{1}{c_p} (h_m - f_l \Delta h_f)$. f_l désigne la fraction massique de liquide.

Une validation plus détaillée du modèle de croissance ayant déjà été réalisée (Bedel M. 2014), on a reporté en Annexe C, une comparaison avec un autre modèle à prise de moyenne développé par C.Beckermann *et coll.* (B. C. Martorano M.A 2003) qui a par ailleurs été utilisé pour prédire la TCE.

II.3. Modélisation des structures colonnaires

II.3.1 Modélisation des « sous-structures » colonnaires

On a déjà introduit au chapitre II.1 la représentation choisie pour les structures colonnaire qui est schématisée sur la Figure II.1-2 où les principales hypothèses sont résumées. Dans la suite et avant de détailler le modèle dédié à la croissance des structures colonnaires dans le volume du front, on va d'abord présenter les conséquences du choix de la représentation sous forme de « sous-structures » colonnaire sur la détermination de la densité de sous-structures n_{col} .

La croissance des pointes primaires, caractérisée par v_{front} , se traduit alors par l'apparition de nouvelles sous-structures colonnaires qui dans notre modèle constitue chaque bras colonnaire (B. C. Martorano M.A 2003). La solidification en arrière du front colonnaire est caractérisée par la croissance des enveloppes et la solidification interne des sous-structures constituant le bras. Le rayon final des sous-structures est imposé par :

$$R_f = \frac{\lambda_1}{2} \quad (2.16)$$

Remarquons que tout comme pour les équiaxes, la moyenne volumique sur tout le VER de la structure colonnaire peut se faire de manière similaire. Ainsi, si l'on veut par exemple trouver le rayon moyen des sous-structures colonnaires (qui sont réparties de manière très inégale dans le VER), on définit la fonction indicatrice suivante :

$$\gamma_{env} = \begin{cases} 1 & \text{à l'intérieur d'une enveloppe} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.17)$$

Alors, on peut définir la fraction d'enveloppe colonnaire dans le VER :

$$g_{env}^{col} = \langle \gamma_{env} \rangle = \frac{1}{V_0} \int \gamma_{env} dV \quad (2.18)$$

On peut également trouver le rayon moyen de l'enveloppe, par exemple pour des enveloppes sphériques :

$$R_{env} = \left(\frac{3}{4\pi n_{col}} \right)^{1/3} \quad (2.19)$$

n_{col} est simplement la densité de sous-structures colonnaires. On peut le calculer également de manière assez simple. Par exemple, définissons la longueur moyenne des bras colonnaires comme :

$$\ell(t) = \frac{1}{N_{bras}} \sum_{\substack{1 \leq k \leq N_{bras} \\ \in VER}} \ell_k(t) \quad (2.20)$$

Avec N_{bras} le nombre de bras dans le VER et $\ell_k(t)$ la longueur de chaque bras. En pratique $\ell(t)$ sera calculée par la méthode de suivi du front. Pour l'instant on ne s'intéresse pas à la manière de calculer $\ell(t)$ et de faire apparaître les nouvelles sous-structures colonnaires, ce sera l'objet du chapitre II.3.3.

Sachant que chaque bras « moyen » est alors constitué de $\frac{\ell(t)}{\lambda_1}$ sous-structures colonnaires, on peut écrire :

$$n_{col} = n_{bras} \frac{\ell(t)}{\lambda_1} \quad (2.21)$$

n_{bras} est la densité volumique de bras primaires dans le VER. Il dépend de la disposition des bras et de l'espacement primaire λ_1 .

Dans la pratique, on va faire plusieurs hypothèses simplificatrices concernant le calcul de n_{bras} puis pour le calcul de λ_1 .

Tout d'abord, pour le calcul de n_{bras} , on va baser notre calcul sur un VER parallélépipédique plutôt que sphérique. Il y a plusieurs différences qui sont illustrées sur la Figure II.3-1.a et Figure II.3-1.b. On voit que pour un VER de forme sphérique, comme initialement proposé en Figure II.1-2 la situation est équivalente quelle que soit l'orientation du front dans le VER. En particulier, les densités de bras et de sous-structures colonnaires restent inchangées par un changement d'orientation du front, comme schématisé sur la Figure II.3-1.a. De même, la distance maximale à parcourir pour que le front traverse le VER reste d_0 (le diamètre du VER). Il s'agit donc de la dimension du VER dans la direction de croissance du front et passant par le centre du volume.

En revanche, on voudrait se placer dans le cas d'un VER cubique, ce qui facilite le calcul de n_{bras} . En effet, pour une sphère, en supposant que l'on connaisse la longueur moyenne $\ell(t)$ des bras, la densité n_{bras} dépend de $\ell(t)$.

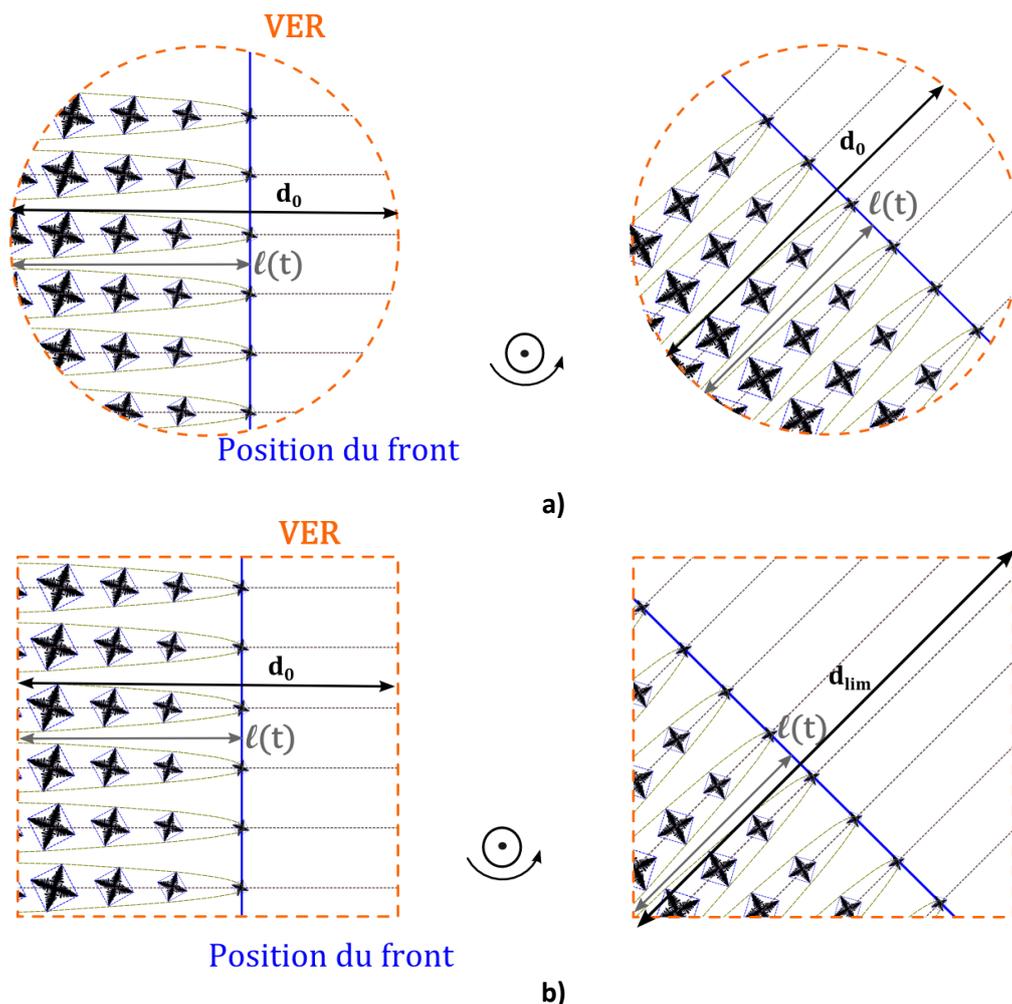


Figure II.3-1 : a) Dans le cas d'un VER sphérique, le nombre de sous-structures colonnaires et la longueur limite du front d_0 restent inchangés, quelle que soit l'orientation du front.

b) Dans le cas d'un VER parallélépipédique, l'orientation du front change le nombre de sous-structures colonnaires et la longueur limite du front d_{lim} .

Pour un VER parallélépipédique, si les bras primaires colonnaires sont alignés avec le VER, alors n_{bras} sera indépendant de $l(t)$. Par contre, comme schématisé sur la Figure II.3-1.b, on voit que la situation n'est plus équivalente pour une autre orientation du front. Notamment, la distance à parcourir d_{lim} pour quitter le VER peut être différente de d_0 et les densités n_{bras} et n_{col} sont modifiées.

Afin de simplifier les calculs, on va donc supposer que les bras primaires sont alignés avec le VER. Cela signifie que l'angle entre la direction de croissance des bras et la normale à la face du VER par où les bras entrent est nul, comme sur le schéma de gauche de la Figure II.3-1.b. Cependant afin de conserver la modification de la distance d_{lim} à parcourir, on va supposer que la longueur du VER dans la direction de croissance du front reste d_{lim} et on se base donc sur le cas schématisé en Figure II.3-2 pour calculer n_{bras} et n_{col} . La méthode pour le calcul de d_{lim} sera explicitée dans la suite de ce chapitre.

Connaissant λ_1 , la Figure II.3-2 montre alors comment calculer n_{bras} . On a pris un volume élémentaire cubique, car c'est généralement la forme des volumes numériques. Ce volume est

supposé avoir une section carré de côté d_0 dans le plan orthogonal à la direction de croissance du front et une longueur d_{lim} dans la direction de croissance.

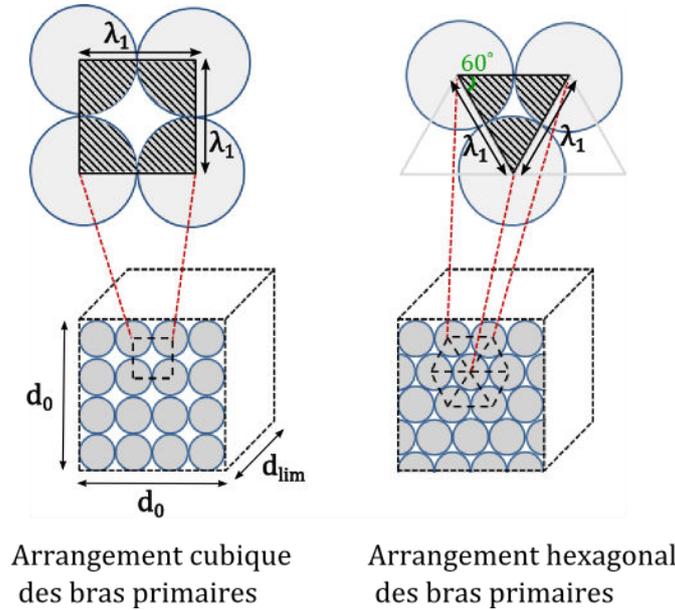


Figure II.3-2 : Deux exemples d'arrangements des bras colonnaires dans un volume de côté d_0 et de longueur d_{lim} . En haut, on a représenté le motif symétrique de l'arrangement ainsi que les bras colonnaires qu'il contient (partie hachurée).

Dans le cas de l'arrangement cubique simple par exemple, on remarque qu'on inclut en tout un bras dans le motif carré de surface λ_1^2 . Donc, on a :

$$n_{bras} = \frac{1}{\lambda_1^2 d_{lim}} \quad (2.22)$$

Et par conséquent :

$$n_{col} = \frac{1}{\lambda_1^3 d_{lim}} \ell(t) \quad (2.23)$$

Il s'agit ici de la densité de sous-structures colonnaires rapportée à l'ensemble du volume élémentaire. Lorsque le front a traversé le volume, la densité finale de sous-structures est donc :

$$n_{col}^{final} = \frac{1}{\lambda_1^3} \quad (2.24)$$

Pour un arrangement hexagonal des bras, on montre :

$$n_{col} = \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{1}{\lambda_1^3 d_{lim}} \ell(t) \quad (2.25)$$

Notons que l'on retrouve bien l'expression du rayon final donné par l'équation (2.16) si l'on prend en compte la compacité c de l'arrangement choisi. La compacité est définie par le rapport entre le volume occupé par les sous-structures et le volume élémentaire. Par exemple pour un arrangement cubique : $c = \frac{\pi}{6}$.

De plus, pour des sous-structures colonnaires sphériques :

$$\frac{4}{3} \pi \times R_f^3 n_{col}^{final} = c \quad (2.26)$$

On retrouve bien que $R_f = \frac{\lambda_1}{2}$.

Dans le cadre de notre travail, on a choisi un arrangement cubique centré car, comme déjà noté par Beckermann et coll. (B. C. Martorano M.A 2003), la densité n_{col} est la plupart du temps suffisamment élevée pour que le facteur $\frac{2}{\sqrt{3}}$ puisse être négligé.

Concernant le calcul de l'espacement dendritique, λ_1 sera pris identique durant tout le calcul. Physiquement, au cours de l'avancée du front dans le système, les branchements de bras supplémentaires ou le blocage de bras ayant une orientation différente est un phénomène connu (Lesoult G., Macrostructures et qualité des produits 1989). Plusieurs modèles analytiques existent dans la littérature qui donnent des expressions de λ_1 en solidification dirigée en fonction des conditions thermiques locales. Par exemple, J.D Hunt propose (Hunt J.D, Solidification and Casting of Metals 1979) :

$$\lambda_1 = (64 \times \Gamma D_l m_l (k-1) C_0)^{0,25} G^{-0,5} V_{front}^{-0,25} \quad (2.27)$$

Cette expression est établie pour des bras colonnaires ayant la forme de demi-ellipsoïdes. W. Kurz et D.J Fisher propose une expression semblable (à une constante près) ainsi qu'une autre expression légèrement plus complexe pour des bras cylindriques avec une pointe hémisphérique (F. D. Kurz W. 1992). Des travaux plus récents, basés sur des approximations de résultats expérimentaux, proposent également des expressions plus complètes (L. S. Hunt J.D 1996).

Il serait aisé d'implémenter les expressions évoquées plus haut pour peu que l'on connaisse le gradient thermique local G suffisamment précisément. Néanmoins pour simplifier, nous choisissons de garder λ_1 constant au cours de toute la solidification. On le prendra égal à l'espacement primaire moyen mesuré, lorsque celui-ci est disponible. La première raison est que les expressions évoquées plus haut ne permettent que de retrouver qualitativement les résultats expérimentaux et de plus elles ne prennent pas en compte l'influence de la convection. Par ailleurs, nous avons pu vérifier lors des calculs effectués que la valeur de λ_1 n'a que peu d'influence sur les résultats obtenus, du moment que λ_1 est choisi suffisamment faible (voir chapitre III).

En résumé, la description des structures colonnaires peut être vue comme identique à celle des structures équiaxes pour la croissance des enveloppes et la solidification interne mais avec une densité n_{col} différente. Les deux différences notables sont d'une part la manière de calculer n_{col} est

très différente et dépend de la position du front dans le volume et d'autre part l'apparition et la germination de nouveaux grains colonnaires dans un volume donné ne dépend plus uniquement des conditions locales comme c'est le cas pour les structures équiaxes mais de l'historique de la croissance du front colonnaire dans tout le système.

La description choisie de la géométrie des bras colonnaires pourrait paraître excessivement simplifiée. Cependant, lors de la bibliographie, nous avons passé en revue plusieurs modèles qui utilisent avec succès la même représentation (B. C. Martorano M.A 2003), (Ciobanas A.I 2007). En outre, une étude paramétrique sur la forme des enveloppes colonnaires réalisée par Wu *et coll.* a montré que, dans le cadre des modèles à prise de moyenne, cette forme avait relativement peu d'influence sur la prédiction de la TCE (L. A. Wu M. 2010).

Le but de cette partie est de valider ce choix en montrant que l'on arrive à retrouver la micro-ségrégation caractéristique d'une structure colonnaire.

Suivant les travaux de C. Beckermann *et coll.* (B. C. Wang C.Y 1993) nous choisissons cette fois-ci une solidification colonnaire rapide afin de tester les limites de notre modèle.

Le système étudié est, comme précédemment, un unique petit volume de taille semblable à celle d'un VER et formé d'un alliage Al-4,5%pds Cu dont les caractéristiques sont données en Annexe B. La température est uniforme dans le système et sa variation temporelle est imposée et est constante avec : $\dot{T} = -10^3 \text{ K} \cdot \text{s}^{-1}$. Afin de fixer la valeur de λ_1 on se sert de l'équation proposée en (2.27). Sachant que $\dot{T} = G \times V$, on trouve que $\lambda_1 \approx 18,4 \mu\text{m}$ en connaissant V_{front} . Ici, on ne se préoccupe pas de l'avancée et la propagation du front. La surfusion importante au front $\Delta T_{front} \approx 22 \text{ }^\circ\text{C}$ marquée sur la Figure II.3-3, mesurée sur la courbe indiquée par Flemings et $T_{liq}(C_0) - \Delta T_{front}$, a été imposée comme température d'apparition des structures colonnaires. A partir de la valeur de ΔT_{front} , on peut remonter à la valeur de la sursaturation $\Omega = \frac{\Delta T}{(1-k)(\Delta T - m_l C_0)}$ et ainsi déterminer V_{front} car c'est une fonction de $Iv^{-1}(\Omega)$. La valeur de V_{front} ainsi calculée permet de calculer λ_1 . En se servant de la relation (2.24), on trouve alors : $n_{col} = 1,6 \cdot 10^{14} \text{ grains} \cdot \text{m}^{-3}$.

La Figure II.3-3 montre les résultats obtenus comparés avec le modèle de Beckermann (B. C. Wang C.Y 1993) ainsi qu'avec des calculs établis par Flemings (Flemings 1991).

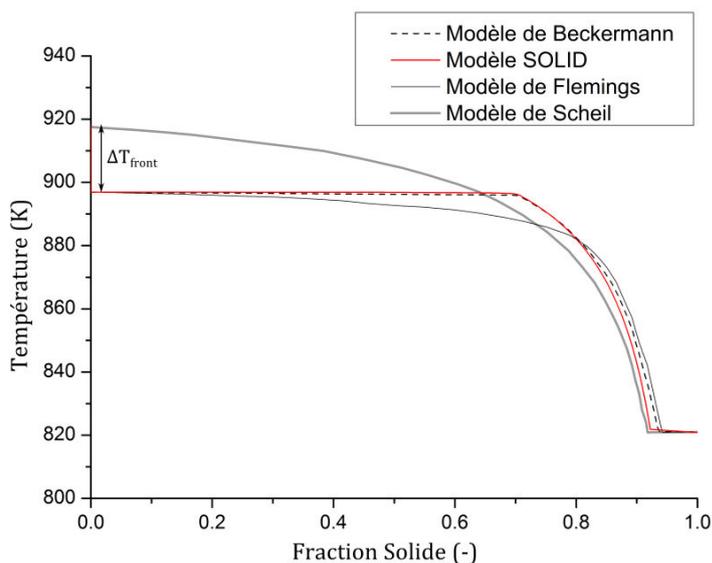


Figure II.3-3 : Comparaisons des résultats en solidification rapide colonnaire pour un alliage Al-4,5%pds Cu. La courbe rouge correspond aux résultats avec notre modèle. La courbe en pointillés noirs correspond aux calculs de Beckermann (B. C. Wang C.Y 1993). La courbe grise épaisse montre les résultats obtenus par Flemings (Flemings 1991). ΔT_{front} est la surfusion de croissance du front colonnaire.

Après que la température dans le volume a atteint celle des pointes, la solidification se fait à température quasi-constante jusqu'à une fraction solide $g_s = 0,7$. Par la suite, puisque la diffusion dans le solide est négligeable pour une telle vitesse de solidification, on se rapproche du modèle de Scheil jusqu'à atteindre la température eutectique où l'on observe un second palier.

On remarque que les résultats de notre modèle sont très proches de ceux de Beckermann. C'est d'autant plus notable que le modèle de Beckermann utilise des enveloppes cylindriques ainsi que des relations différentes pour les longueurs de diffusion et les surfaces spécifiques. Au final, l'influence de ces grandeurs sur la micro-ségrégation est minime dans ce cas.

Les écarts plus importants avec les résultats de Flemings peuvent s'expliquer par le fait que l'on a négligé les effets cinétiques lors de la solidification. Or, pour de telles vitesses de solidification, l'hypothèse de l'équilibre thermodynamique à l'interface n'est plus valable (G. B. Kurz W. 1986), ce qui est pris en compte dans le modèle de Flemings mais pas dans notre modèle. Notamment, le coefficient de partage k est alors variable en fonction de la vitesse du front V_{front} .

II.3.2 Modélisation de la propagation des structures colonnaires

Dans un premier temps, il est nécessaire de détecter la présence des structures colonnaires dans un volume du système pour savoir quand faire « germer » les sous-structures colonnaires. S'inspirant de précédents modèles (Dagner J. 2008), (F. A. Wu M. 2010)), on définit une grandeur fonction du temps et de l'espace qui prend des valeurs distinctes dans un volume selon la position de celui-ci par rapport au front colonnaire. En notant $I_{col}(\vec{x}, t)$ cette grandeur, on peut choisir par exemple :

$$I_{col}(\vec{x}, t) = \begin{cases} 0 & \text{si le front n'est pas dans le VER soit } \ell(t) = 0 \\ 1 & \text{si le front est dans le VER, soit } 0 < \ell(t) < d_{lim} \\ 2 & \text{si le front a dépassé le VER, soit } \ell(t) = d_{lim} \end{cases} \quad (2.28)$$

L'intérêt de la fonction I_{col} est qu'on peut alors définir la présence du front dans chaque volume, tandis que la longueur moyenne $\ell(t)$ donne la position du front dans les VER où $I_{col} = 1$. On a vu précédemment que d_{lim} correspondait à la dimension du volume dans la direction de croissance du front. Dans le cas d'un volume sphérique, cette distance correspond au diamètre d_0 du VER mais dans le cas d'un volume parallélépipédique elle dépend de la direction de croissance des bras colonnaires, nous verrons par la suite comment la calculer dans le cadre de notre modèle. $\ell(t)$ est obtenue en intégrant v_{front} , donc :

$$\ell(t) = \int_{t_{col0}}^t v_{front} dt \quad (2.29)$$

Où t_{col0} correspond au dernier instant où le front colonnaire est apparu dans le volume. A l'aide de I_{col} , on peut désormais conditionner et quantifier l'apparition des nouvelles sous-structures, c'est-à-dire là où $I_{col} = 1$. En effet, si on appelle ϕ_{nucl}^{col} le flux volumique de sous-structures colonnaires, on peut définir, en parallèle de l'équation (2.6) une étape de formation de nouvelles sous-structures colonnaires :

$$\begin{cases} \frac{\partial n_{col}}{\partial t} = \phi_{nucl}^{col} \cdot f(I_{col}) \\ f(I_{col}) = I_{col}(\vec{x}, t) \cdot (2 - I_{col}(\vec{x}, t)) \end{cases} \quad (2.30)$$

$f(I_{col})$ est construite de sorte à être non-nulle uniquement dans les volumes contenant le front, donc où $I_{col}(\vec{x}, t) = 1$.

ϕ_{nucl}^{col} se calcule simplement en dérivant par rapport au temps l'équation (2.23). Donc :

$$\frac{\partial n_{col}}{\partial t} = \frac{1}{\lambda_1^3 d_{lim}} \frac{\partial \ell}{\partial t} \cdot f(I_{col}) = \frac{1}{\lambda_1^3 d_{lim}} v_{front} \cdot f(I_{col}) \quad (2.31)$$

Puisqu'en coulée statique $\langle \vec{v}_s^{col} \rangle^s = \vec{0}$, la contribution due au transport est nulle pour n_{col} et on a donc déterminé l'évolution de la densité de sous-structures colonnaires.

Un autre point concerne la nécessité de décrire l'apparition des structures colonnaires dans le système. Dans notre modèle à prise de moyenne, on va négliger la compétition et subséquente transition équiaxe-colonnaire qui a lieu dans la zone de peau des coulées et qui donne naissance aux bras orientés colonnaires (Dantzig J. 2009). Les modèles à prise de moyenne de la littérature (B. C. Martorano M.A 2003), (Ciobanas A.I 2007), (Vannier I. 1995) prennent le parti d'imposer la présence des structures colonnaires dès le début de la solidification à l'endroit où le métal liquide est au contact du moule.

En suivant un raisonnement similaire, on va d'abord supposer l'absence de structures colonnaires ($I_{col} = 0$ dans tout le domaine). Par la suite, dans les volumes qui sont au contact d'une paroi où il y a extraction de chaleur, on vérifie que la condition suivante est réalisée :

$$T_f + \sum_{1 \leq i \leq N_{ele}} m_i^i \langle C_i^i \rangle^l - T \geq \Delta T_{col}^{moule} \quad (2.32)$$

Le membre de gauche correspond à la surfusion locale déterminée par la température T . ΔT_{col}^{moule} est un paramètre traduisant une surfusion minimale à atteindre au moule pour qu'il y ait apparition d'une structure colonnaire. En théorie, ΔT_{col}^{moule} devrait dépendre du type d'interface entre le moule et le métal liquide, des phénomènes complexes comme l'état de surface et le matériau constituant le moule peuvent entrer en jeu. Au vu de toutes ces incertitudes et du fait qu'on ne décrit pas la zone de peau où apparaissent les bras colonnaires, on prend généralement $\Delta T_{col}^{moule} \approx 0^\circ C$.

Dès que la condition (2.32) est vérifiée dans les volumes considérés, le front colonnaire est initialisé avec une longueur faible devant la taille du volume ($I_{col} = 1$ localement).

Nous avons vu comment modéliser l'apparition des structures colonnaires dans le système, il reste désormais à déterminer la longueur limite d_{lim} qui permet de définir si le front colonnaire a dépassé les volumes qui contiennent déjà des structures colonnaires.

Dans le cas général, la croissance des bras colonnaires se fait similairement à la Figure II.3-4.a. Il existe dans le VER plusieurs « grains » colonnaires chacun constitué de plusieurs bras colonnaires ayant une direction de croissance identique. Dans cette situation, il n'existe pas une unique direction de croissance dans le volume, ni une seule valeur de λ_1 . La position du front (la ligne qui joint les pointes primaires) n'est pas non plus une ligne droite.

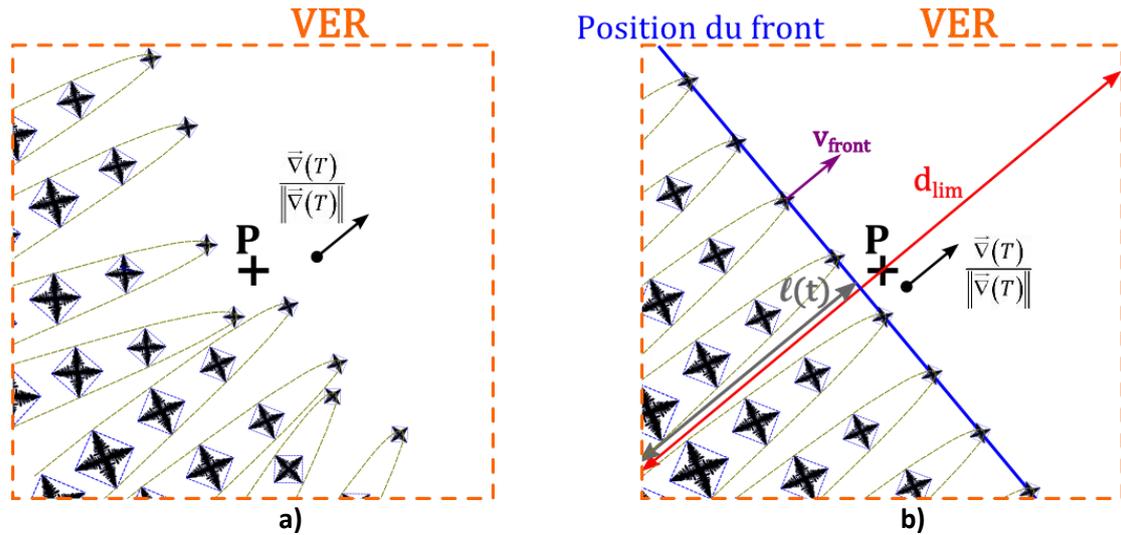


Figure II.3-4 a) Situation réelle dans un VER parallélépipédique contenant le front colonnaire. L'orientation des bras colonnaires, appartenant à différents grains colonnaires, peut varier dans le VER. L'espaceur denritique primaire λ_1 n'est alors pas forcément constant.

b) Situation idéalisée de notre modèle : Les bras sont régulièrement espacés par λ_1 constant et sont alignés dans la direction du gradient thermique.

On va donc se placer dans la situation idéale schématisée sur la Figure II.3-4.b. On suppose que tous les bras colonnaires sont alignés dans la direction du gradient thermique et la direction de croissance du front \vec{d}_{front} peut être définie par :

$$\vec{d}_{front} = \frac{\vec{\nabla}(T)}{\|\vec{\nabla}(T)\|} \quad (2.33)$$

Expérimentalement, il est également souvent admis dans la littérature que la direction de croissance du front colonnaire suffisamment loin du moule est celle du gradient thermique local (Lesoult G., Cristallisation et Microstructures 1986) sauf si l'anisotropie de l'interface solide/liquide est forte. Comme précisé auparavant, on suppose également que la distance λ_1 entre bras primaires est constante. De même, on rappelle que pour déterminer n_{bras} et n_{col} , on considère que le front est aligné avec une des faces du VER, en supposant que l'erreur commise sur la valeur de n_{col} n'a qu'une influence négligeable sur les résultats.

On connaît la longueur $\ell(t)$ grâce à (2.29). Après avoir calculé $\vec{\nabla}(T)$ et sachant que $\|\vec{\nabla}(T)\| = \sqrt{\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)^2}$, on en déduit \vec{d}_{front} . On supposera que \vec{d}_{front} ne change pas significativement au cours du passage du front colonnaire et donc on conserve la valeur de \vec{d}_{front} au moment où le front pénètre dans le volume. On choisit également comme point de référence le centre P du VER afin de calculer la longueur maximale à parcourir par le front colonnaire pour traverser le volume. On peut alors calculer d_{lim} comme la longueur du VER dans la direction $\pm \vec{d}_{front}$ et passant par le point P.

La situation idéalisée en Figure II.3-5.b en deux dimensions permet également de définir ce que nous appellerons par la suite les fractions de zone colonnaire g_{col} et extracolonnaire g_{ec} . Ainsi, la fraction de zone colonnaire g_{col} est le volume occupé par le front colonnaire (délimité sur la Figure

II.3-4.b par le trait bleu dans le VER indiquant la position du front et les limites du VER) par rapport au volume total du VER. La méthode de suivi du front utilisée ici ne permet un suivi aussi précis que d'autres méthodes existantes dans la littérature (H. J. Browne D.J 2004). On va donc, sans connaître précisément la forme du front dans le volume, supposer que la fraction volumique de la zone colonnaire est égale à la fraction linéique du front colonnaire. On a donc :

$$g_{col} = MIN\left(\frac{\ell(t)}{d_{lim}}, 1\right) \quad (2.34)$$

On vérifie bien sûr :

$$g_{col} + g_{ec} = 1 \quad (2.35)$$

Enfin, puisque vers la fin de la solidification on peut observer un gradient thermique négligeable dans le liquide, on choisit d'utiliser dans ce cas le gradient de fraction liquide $\vec{\nabla}(g_l)$ au lieu de $\vec{\nabla}(T)$. Le principe reste inchangé.

Un autre avantage de fixer la direction de croissance du front devient clair si on utilise, afin de calculer v_{front} , un modèle de cinétique de pointe qui prend en compte la convection. On a vu dans le chapitre I un exemple de tel modèle qui nécessite de connaître l'orientation des bras dendritiques par rapport à la vitesse relative du liquide (G. G. Gandin Ch.-A. 2003). Pour le front colonnaire, puisque $\langle \overline{v_s^{col}} \rangle^s = 0$, on peut définir localement la direction de l'écoulement du liquide :

$$\vec{d}_{rel} = \frac{\langle \overline{v_l} \rangle^l}{\left\| \langle \overline{v_l} \rangle^l \right\|} \quad (2.36)$$

On calcule alors simplement l'orientation α des bras primaires colonnaires par rapport au mouvement du fluide par :

$$\alpha = \left(\vec{d}_{front}, \vec{d}_{rel} \right) \quad (2.37)$$

Dès que $\ell(t) = d_{lim}$ dans un volume du front, on considère que le front colonnaire a dépassé le volume en question (et on a alors $I_{col} = 2$).

On considère désormais l'implémentation numérique du modèle de propagation des structures colonnaires. Numériquement, I_{col} sera un simple indicateur à valeur entière de la position du front colonnaire par rapport à un volume de discrétisation considéré. Sa valeur sera calculée en post-traitement en fonction de la valeur de $\ell(t)$ dans chaque maille. Afin de déterminer d_{lim} à partir de $\pm \vec{d}_{front}$, on « coupe » la droite passant par le centre P du volume et dirigée suivant \vec{d}_{front} par les limites du VER (Foley J.D 1996).

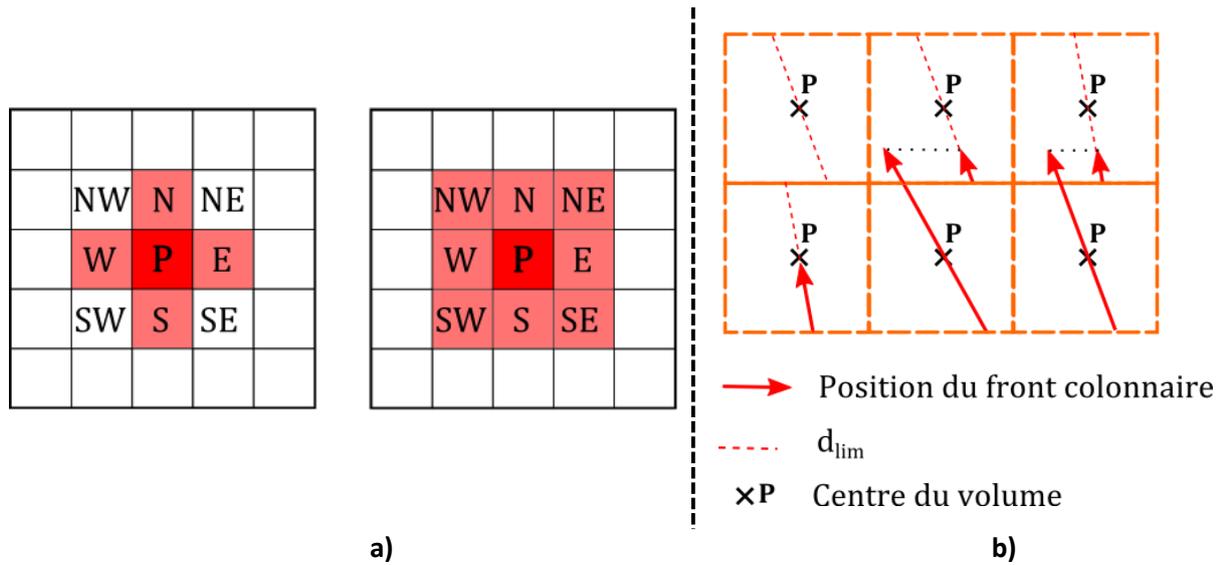


Figure II.3-5 a) Deux types de voisinages en 2D sont représentés. A gauche, le voisinage dit de von Neumann et à droite le voisinage au sens de Moore.

b) Schéma montrant la propagation du front colonnaire et la longueur de front associée. La longueur limite est en pointillé. Dans les volumes où la longueur du front a dépassé d_{lim} (en bas au centre et à droite), la longueur supplémentaire est reporté dans les volumes voisins (au sens de von Neumann) si ceux-ci ne contenaient pas déjà des structures colonnaires.

Par la suite, quand $\ell(t) \geq d_{lim}$ dans une maille alors il faut définir un voisinage qui représente les nouvelles mailles où les structures colonnaires seront propagées.

Si on reprend la terminologie des automates cellulaires, on a souvent le choix en 2D entre deux types de voisinages schématisés en Figure II.3-5.a : au sens de von Neumann (les quatre plus proches voisins) ou au sens de Moore (les huit plus proches voisins). Si un volume peut, à un instant donné, « recevoir » des structures colonnaires provenant de plusieurs volumes à la fois, on choisira le front le plus rapide. Dans la pratique, ce choix a peu d'influence. Ceci peut s'expliquer par le fait que même si le front se propage vers plus de mailles en choisissant un voisinage de Moore, la progression du front sera fortement contrainte par les conditions locales qui déterminent v_{front} . On choisit donc dans le cadre de notre modèle de sélectionner le voisinage de von Neumann qui est le plus utilisé dans la littérature. Si un volume peut, à un instant donné, « recevoir » des structures colonnaires provenant de plusieurs volumes à la fois, on choisira le front le plus rapide.

Le voisinage étant ainsi défini, lorsque $\ell(t) \geq d_{lim}$ dans une maille alors dans les mailles voisines où une surfusion positive existe et où les structures colonnaires ne sont pas encore présentes, on y propage les structures colonnaires (et ainsi $I_{col} = 1$).

A la fin d'un pas de temps dt on aura en fait $\ell(t) > d_{lim}$ dans une maille qui a été dépassée par le front colonnaire. Afin d'éviter des « sauts » de continuité dans la position du front, on va donc reporter la nouvelle position initiale du front à partir de l'ancienne position avant propagation. La procédure est schématisée en Figure II.3-5.b . On choisit donc $\ell(t) - d_{lim}$ comme longueur initiale du front colonnaire le long des nouvelles directions \vec{d}_{front} pour les mailles voisines concernées.

II.3.3 Modélisation du front colonnaire

II.3.3.a Présentation du modèle

On va présenter dans cette partie la problématique de la prise de moyenne dans un volume contenant le front colonnaire. La Figure II.3-6.a rappelle la représentation de la zone de pointe colonnaire avant le processus de prise de moyenne. Comme on l'a déjà remarqué, cette zone est caractérisée par une grande hétérogénéité de structures dans la direction de croissance du front. Sur cette figure, on a également schématisé en bas un profil de soluté (en noir) dans la direction de croissance entre deux bras primaires.

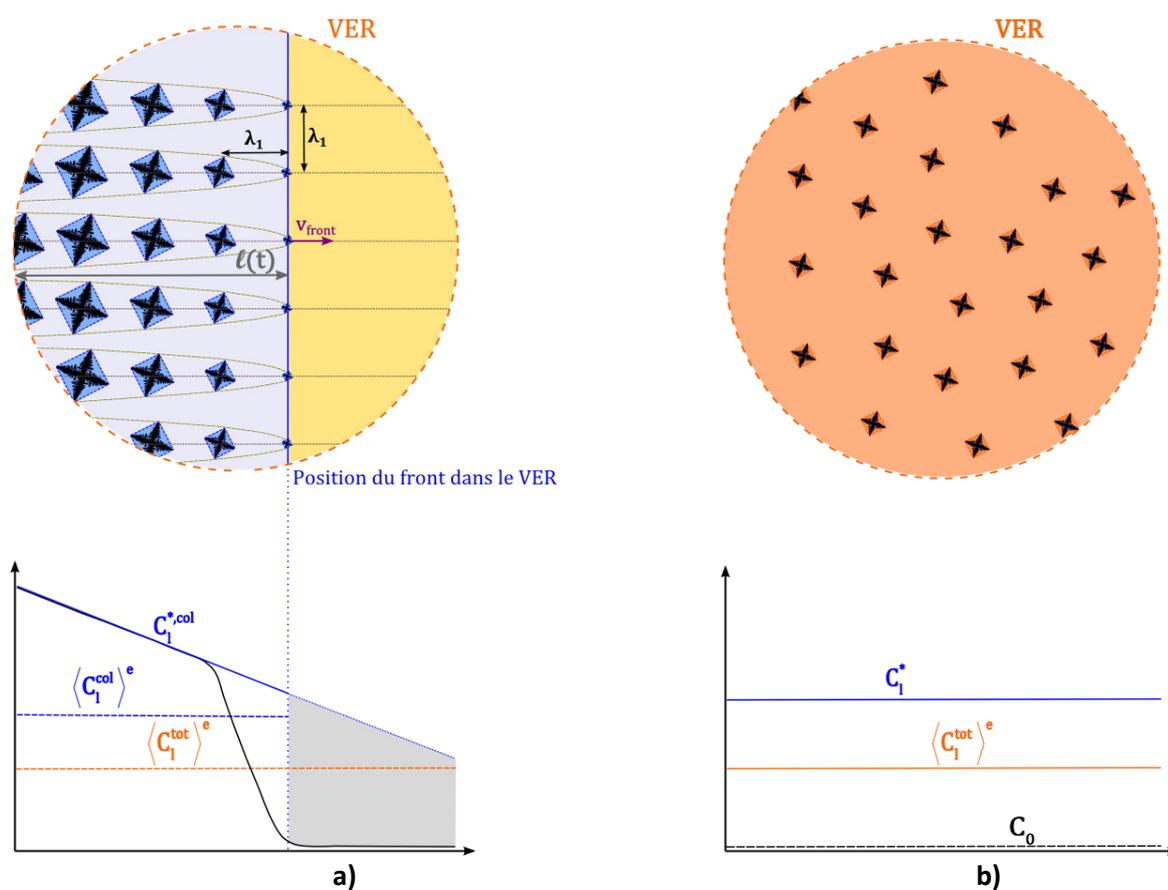


Figure II.3-6 : Schémas d'un VER comprenant des pointes colonnaires dans un gradient thermique linéaire a) avant prise de moyenne : en bas, on a schématisé en noir le profil de concentration le long du VER, entre deux bras colonnaires, $C_i^{*,col}$ étant la concentration d'équilibre et les concentrations moyennes volumiques étant en pointillés, b) après prise de moyenne : la concentration moyenne obtenue sur l'ensemble du VER est $\langle C_1^{tot} \rangle^e$ (en orange), C_0 correspondant à la concentration moyenne dans la zone liquide devant le front tracée en pointillés.

En vert et en trait plein, $C_i^{*,col}$ correspond à la concentration donnée par la température de l'interface solide/liquide. Bien que celle-ci n'ait pas réellement de sens dans la zone entièrement liquide, on a prolongé le profil de C_i^* devant le front (en pointillés), cette grandeur correspondant alors à la valeur de $\frac{T-T_f}{m_l}$. On va montrer par la suite que les hétérogénéités de structures s'accompagnent d'une forte hétérogénéité des concentrations de soluté dans le liquide.

La présence de forts gradients de concentration autour de la position du front colonnaire va ainsi nous amener à distinguer deux liquides extragranulaires. Un premier liquide extragranulaire colonnaire (en bleu clair sur la Figure II.3-6.a) dans la zone dite colonnaire, délimité par la position du front colonnaire dans le VER. Le deuxième liquide extragranulaire se trouve devant le front (en orange clair sur la Figure II.3-6.a). Ce liquide sera nommé « extracolonnaire » en l'absence de structures équiaxes, comme c'est le cas dans ce chapitre. En présence de grains équiaxes (cf. Chapitre III), ce liquide correspond au liquide extragranulaire équiaxe. Dans la suite, on notera de plus « k » l'indice correspondant à la zone colonnaire, extracolonnaire ou au volume total de la maille, $k \in [col, ec, tot]$.

Afin de démontrer dans le cas général la présence de ces gradients de concentration, on va présenter une analyse en ordre de grandeur, aux échelles de la zone pâteuse et du VER. Dans la suite, on suppose un gradient thermique linéaire et unidirectionnel G dans la zone pâteuse et des conductivités thermiques et des densités égales dans les phases liquide et le solide.

○ [Ordres de grandeurs des phénomènes de diffusion](#)

On a schématisé en rouge sur la Figure II.3-7 le profil de soluté dans le liquide devant le front et dans la zone pâteuse. On constate un enrichissement très faible, voire négligeable devant le front colonnaire. Cela implique, en l'absence de macro-ségrégations, que la distance de diffusion chimique devant le front est très faible et qu'elle est localisée juste devant les pointes des bras primaires. Cette distance devra être notamment faible devant l'étendue de la zone en surfusion dans le liquide devant le front, qui est grisée sur la Figure II.3-7 et dont la longueur est notée d_T .

On a :

$$d_T = \frac{\Delta T_{col}}{G} \quad (2.38)$$

ΔT_{col} est la surfusion chimique de croissance du front. On choisit comme alliage de référence l'acier 100C6 considéré comme un alliage binaire Fe-1,01% pds C. Les données thermodynamiques de la nuance 100C6 sont reportées en Annexe B. Pour l'estimation de ΔT_{col} et G , on prendra les valeurs que l'on peut obtenir lors de calculs en solidification colonnaire du lingot Ascométal 6,2 tonnes (voir Chapitre III). On trouve alors comme valeurs limites $\Delta T_{col} \in [2,5 ; 7,5]K$ et $G \in [10 ; 2,5 \cdot 10^3]K \cdot m^{-1}$. Les valeurs maximales de ΔT_{col} et G correspondent à celles qui sont calculées au début de la solidification du lingot d'acier. Les valeurs minimales sont celles qui sont calculées au moment de la TCE ou en fin de solidification colonnaire. On obtient alors : $d_T \in [3 \cdot 10^{-3} ; 0,25] m$.

En avant du front, il existe toujours une couche limite de soluté $\delta_C \approx \frac{D_l}{v_{front}}$ (cf. Figure II.3-7). Néanmoins, durant le temps qu'il faut au front pour parcourir d_T , le soluté aura le temps de diffuser d'une longueur d_C , supérieure à δ_C . La longueur d_C peut être approximée par :

$$d_C \approx \sqrt{D_l \frac{d_T}{v_{front}}} \quad (2.39)$$

On va également supposer que l'on peut écrire V_{front} sous la forme (Burden M.H 1974) :

$$V_{front} = A \cdot \Delta T_{col}^n \quad (2.40)$$

A et n dépendent de l'alliage considéré. Pour l'acier 100C6 et l'intervalle de surfusion considéré, les valeurs $A = 5,59 \cdot 10^{-6} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} \text{K}^{-n}$ et $n = 2,75$ permettent une bonne approximation de la vitesse obtenue par le modèle LGK (G. M. Lipton J. 1984).

Ainsi :

$$d_c = \sqrt{\frac{D_l \Delta T_{col}^{1-n}}{G A}} \quad (2.41)$$

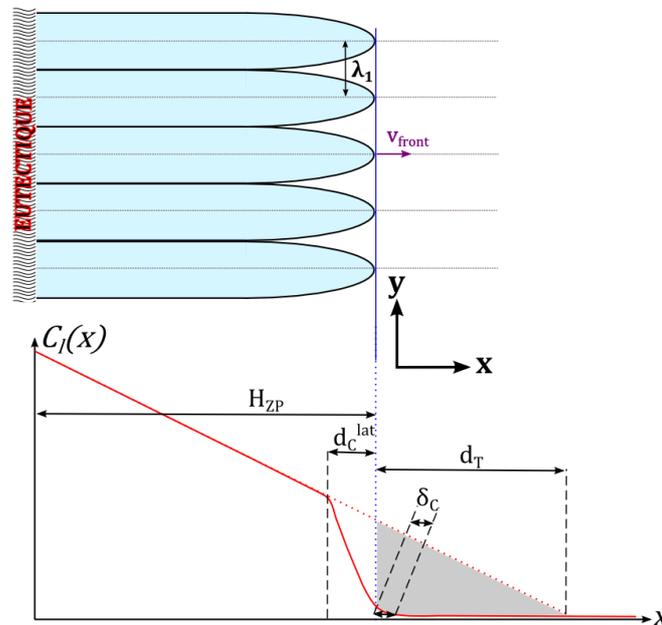


Figure II.3-7 Distances caractéristiques devant le front colonnaire et dans la zone pâteuse.

On en déduit donc : $d_c \in [1,4 \cdot 10^{-4} ; 6,1 \cdot 10^{-3}] \text{ m}$. Afin de vérifier que dans tous les cas on a $d_c \ll d_T$, il est utile de considérer les valeurs du nombre de Fourier pour le soluté dans le liquide devant les pointes :

$$Fo_l^f = \frac{d_c^2}{d_T^2} = \frac{D_l d_T / v_{front}}{d_T^2} = \frac{D_l G}{A \Delta T_{col}^{n+1}} \quad (2.42)$$

On trouve $Fo_l^f \in [6,1 \cdot 10^{-4} ; 2 \cdot 10^{-3}]$. Cela justifie que l'enrichissement solutal peut être considéré comme négligeable dans le liquide devant le front, à l'échelle de la zone en surfusion de longueur d_T . Cela justifie également l'utilisation de l'équation (2.40) qui n'est valable que si $\frac{GD_l}{v_{front}} \ll \Delta T_{col}$ (Burden M.H 1974).

A l'échelle du VER, le temps caractéristique devient le temps de passage du front $t_{front} = \frac{d_0}{v_{front}}$ et donc on peut définir un nombre de Fourier à l'échelle du VER $Fo_l^x = \frac{D_l}{v_{front}d_0}$. Cette échelle reste à définir mais il est généralement accepté que $1\text{ mm} < d_0 < 1\text{ cm}$, donc on choisit ici $d_0 = 5\text{ mm}$. Les résultats sont reportés dans le Tableau 5 et confirment qu'on peut également négliger l'enrichissement solutal devant le front à l'échelle du VER.

En arrière des pointes, il y a deux tailles caractéristiques différentes. Dans la direction x des bras primaires, la distance maximale à considérer est la hauteur de la zone pâteuse H_{ZP} . Elle peut se calculer simplement (en négligeant ΔT_{col} par rapport à l'intervalle de solidification ΔT_0) :

$$H_{ZP} = \frac{\Delta T_0}{G} \quad (2.43)$$

On peut donc définir, à l'échelle de la zone pâteuse, un premier nombre de Fourier solutal Fo_l^x pour le soluté liquide dans la zone pâteuse. Le temps caractéristique à considérer est alors le temps local de solidification $t_{sl} = \frac{H_{ZP}}{v_{front}}$. Les résultats sont reportés dans le Tableau 4. Dans la direction de croissance, on confirme bien que l'enrichissement est négligeable à l'échelle de la zone pâteuse.

La deuxième dimension est $\frac{\lambda_1}{2}$ dans la direction y des bras colonnaires secondaires définie sur la Figure II.3-7 et on définit donc Fo_l^y . λ_1 sera calculée par la relation (2.27). Pour l'alliage Fe-1,01%pds C utilisé, $\lambda_1 = B \times G^{-0,5} v_{front}^{-0,25}$ avec $B = 1,07.10^{-3} m^{3/4} K^{1/2} s^{-1/4}$.

Cela donne l'intervalle $\lambda_1 \in [1,1.10^{-4} ; 3,7.10^{-3}] m$. On peut vérifier que ces valeurs sont cohérentes en observant la Figure II.3-8. Il s'agit d'une macrographie d'une coupe longitudinale et transversale de la zone colonnaire en haut d'un lingot 100C6 de 6,2 tonnes doté d'une masselotte exothermique. Dans cette zone on sait par le calcul que les valeurs de G et ΔT_{col} appartiennent aux intervalles donnés précédemment.

Vers le milieu de la zone colonnaire (trait rouge sur la Figure II.3-8) on peut constater sur la coupe longitudinale un espacement moyen de $\lambda_1 \approx 1,2\text{ mm}$ des bras colonnaires, valeur qui se trouve bien dans l'intervalle calculé et qui est confirmé en ordre de grandeur sur la courbe transversale. La distance λ_1 reste également du même ordre de grandeur sur les 7 cm de la zone colonnaire sauf très près du moule.

Dans la direction y (cf. Figure II.3-7), il faut donc un temps $t_{diff}^y = \left(\frac{\lambda_1}{2}\right)^2 / D_l$ pour que le soluté diffuse totalement dans le liquide intragranulaire. En comparaison, le temps pendant lequel le soluté diffuse est toujours le temps local de solidification t_{sl} . En conséquence, on a : $Fo_l^y = \frac{t_{sl}}{t_{diff}^y}$.

Tableau 4 : Nombres de Fourier solutaux et thermiques à l'échelle de la zone pâteuse. L'indice « j » correspond à « l », « s » ou « T ». La direction x est celle de la croissance des bras primaires et la direction y (direction de croissance des bras secondaires) est orthogonale à x la direction de croissance du front, comme définie sur la Figure II.3-7.

	Solutal dans le liquide (l)	Solutal dans le solide (s)	Thermique (T)
$FO_j^x = \frac{D_j H_{ZP}}{v_{front} H_{ZP}^2} = \frac{D_j G}{v_{front} \Delta T_0}$	$[10^{-5}; 2.10^{-4}]$	$[6.10^{-8}; 8.10^{-7}]$	$[10^{-2}; 0,2]$
$FO_j^y = \frac{D_j H_{ZP}}{v_{front} \left(\frac{\lambda_1}{2}\right)^2} = \frac{4 \times D_j \Delta T_0}{v_{front}^{1/2} B^2}$	$[10^2; 5.10^2]$	$[0,5; 2]$	$[10^5; 5.10^5]$

Tableau 5 : Nombres de Fourier solutaux et thermiques à l'échelle du VER.

	Solutal dans le liquide (l)	Solutal dans le solide (s)	Thermique (T)
$FO_j^x = \frac{D_j}{v_{front} d_0}$	$[10^{-3}; 3.10^{-2}]$	$[7.10^{-6}; 10^{-4}]$	$[1; 30]$
$FO_j^y = \frac{D_j d_0}{v_{front} \left(\frac{\lambda_1}{2}\right)^2}$	$[0,2; 15]$	$[9.10^{-4}; 7.10^{-2}]$	$[2.10^2; 10^4]$

Le fait que $FO_l^y \gg 1$ à l'échelle de la zone pâteuse justifie que le liquide extragranulaire derrière les pointes revient rapidement à l'équilibre. Par conséquent, si l'on se réfère à la Figure II.3-7, on a : $d_c^{lat} \ll H_{ZP}$. Pour un élément interstitiel comme le carbone qui diffuse rapidement dans le fer, on voit également que le solide peut être également, suivant les cas, considéré comme homogène dans cette direction.

A l'échelle du temps de passage dans le VER, le calcul de FO_l^y (voir Tableau 5) montre que l'on peut considérer le liquide dans la zone colonnaire comme à l'équilibre pour les forts gradients thermique et les fortes vitesses mais pas forcément pour des valeurs plus faibles.

Cette analyse est à mettre en regard de calculs en 2D utilisant le champ de phase (Badillo A. 2006) et les automates cellulaires (L. P. Dong H.B 2005) sur des alliages Al-Cu. Les auteurs démontrent, lors de la solidification Bridgman (gradient thermique imposé) et sans considérer la convection, que le liquide derrière les pointes revient complètement à l'équilibre sur une distance de l'ordre de 100 μm . Par contre les gradients thermiques imposés sont généralement supérieurs à ceux trouvés lors de la coulée industrielle d'acier.

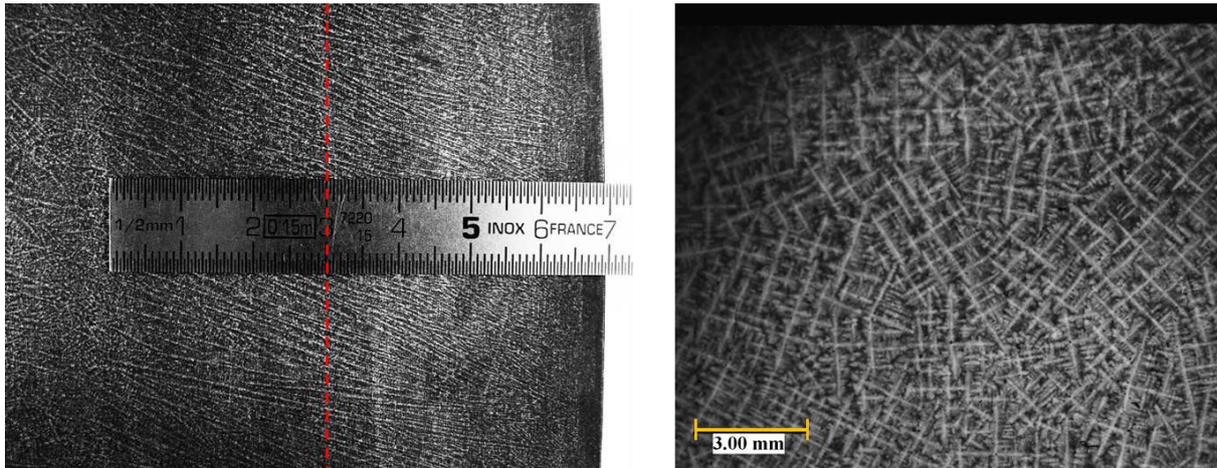


Figure II.3-8 : Macrographies de la zone colonnaire dans un lingot Acométal de 6,2 tonnes et de nuance 100C6, tirée de (Demurger J. 2012). A gauche, la coupe longitudinale comprend l'ensemble de la zone colonnaire et la TCE. La position du moule est à droite de la photo. Suivant le trait en pointillés rouge, on effectue un comptage du nombre de bras intersectés sur la zone visible. On détermine alors $\lambda_1 \approx 1,2 \text{ mm}$. A droite, une coupe transversale réalisée à 4 cm du moule (donc à l'endroit des pointillés rouges) confirme que cette valeur est du bon ordre de grandeur.

De manière similaire, on peut définir les mêmes nombres de Fourier pour la diffusion dans le solide (Fo_s^x, Fo_s^y) et enfin les nombres de Fourier pour la diffusion thermique (Fo_T^x, Fo_T^y), sachant que $D_T = \frac{\lambda}{\rho c_p}$. Les résultats sont résumés dans le Tableau 4 et le Tableau 5.

L'équilibre thermique des phases dans le VER est une hypothèse qui est le plus souvent admise dans le cadre des modèles à prise de moyenne (Benetton W.D 1987), basée sur le fait que D_T est suffisamment grand pour pouvoir considérer que tout changement des conditions thermiques dans le VER sera immédiatement répercuté sur l'ensemble des phases. Comme le remarquent C.Beckermann *et coll* (V. R. Beckermann C. 1993), même en l'absence de gradient macroscopique, il doit forcément exister des micro-gradients afin d'évacuer la chaleur latente dégagée. Cependant, le phénomène de solidification est généralement contrôlé par la diffusion chimique. Les valeurs calculées de Fo_l^T à l'échelle du VER montrent que cette hypothèse n'est pas forcément vérifiée pour les plus faibles gradients et vitesse du front (pour lesquels $Fo_l^y \approx 1$) mais on l'adopte dans notre modèle tout de même.

Une autre conséquence implicite de cette hypothèse est de supposer la température à l'interface solide/liquide $T_i^{s/l}$ uniforme sur la surface du grain. La taille d'un grain d_{grain} pouvant être de l'ordre du millimètre, on constate que pour des gradients thermiques élevés, la différence de température à l'échelle du grain ($\Delta T_{grain} \approx G \cdot d_{grain} \approx 2,5 \text{ K}$) peut remettre en doute cette hypothèse. Une conséquence notable de cette différence de température est l'allongement du grain dans la direction opposée au gradient. Ce phénomène peut également être à l'origine de la transition graduelle entre structures équiaxes et colonnaires (C. C. Rappaz M. 1994).

○ [Nouvelle proposition de VER colonnaire](#)

L'analyse précédente confirme donc la présence de forts gradients chimiques devant et en arrière des pointes colonnaires. Cela justifie notre choix de séparer les zones colonnaire et extracolonnaire et de distinguer ainsi deux liquides extragranulaires différents, comme schématisé sur la Figure II.3-9.

En bleu clair, le liquide extragranulaire dans la zone colonnaire (délimitée par les limites du VER et la position du front, cf. chapitre II.3.2) possède une concentration moyenne $\langle C_l^{col} \rangle^e$. D'après ce qui précède, $\langle C_l^{col} \rangle^e$ est relativement proche de la concentration d'équilibre $C_l^{*,col}$.

A contrario, on pourra considérer ici la concentration moyenne du liquide devant le front (en jaune) comme étant égale à C_0 , en l'absence de macroségrégation.

Si on applique la prise de moyenne sur l'ensemble du VER, les grandeurs comme la concentration seront calculées sur l'ensemble du volume et pas sur la zone colonnaire et extracolonnaire séparément. L'ensemble du volume devient alors une zone colonnaire (cf. Figure II.3-6.b). D'après l'hypothèse de l'équilibre thermique dans le VER : $C_l^* = C_l^{*,col}$. Par contre, la concentration moyenne du liquide extragranulaire est $\langle C_l^{tot} \rangle^e$ (en orange sur la Figure II.3-9), il s'agit simplement de la moyenne pondérée de la zone colonnaire à $\langle C_l^{col} \rangle^e$ et d'une zone à C_0 . Alors, on constate que d'une part $\langle C_l^{tot} \rangle^e$ sous-estime de façon importante la surfusion chimique présente au front colonnaire, qui devrait être proportionnelle à : $C_l^* - \langle C_l^{ec} \rangle^e = C_l^* - C_0$.

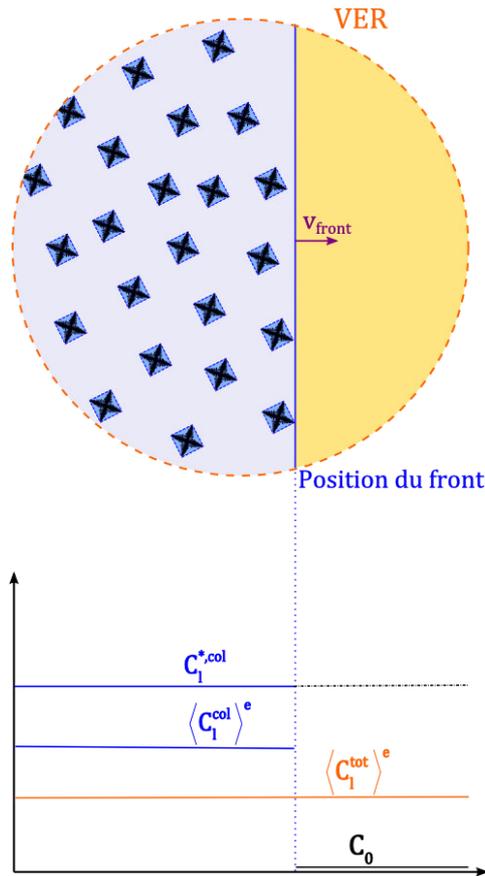


Figure II.3-9 : Schéma illustrant la situation après prise de moyenne pour la Figure II.3-6.a si l'on sépare la zone du front de la partie entièrement liquide du volume. On peut alors déterminer $\langle C_i^{col} \rangle^e$, pris uniquement dans la zone colonnaire. Ici, $\langle C_i^{ec} \rangle = C_0$.

En fait si on utilise $C_i^* - \langle C_i^{tot} \rangle^e$ comme moteur de la croissance du front et puisque le liquide revient rapidement à l'équilibre derrière les pointes colonnaires, il est possible que l'on ait $(\langle C_i^{tot} \rangle^e - C_i^*) \rightarrow 0$ et par conséquent $V_{front} \rightarrow 0$. On prédirait alors un blocage solutal artificiel du front colonnaire. D'autre part, l'effet inverse se produit si l'on considère $\langle C_i^{tot} \rangle^e$ afin de calculer la croissance des sous-structures colonnaires. En effet, puisqu'on a $\langle C_i^{tot} \rangle^e < \langle C_i^{col} \rangle^e$ la surfusion dans la zone colonnaire sera surestimée si on ne considère pas les deux liquides extragranulaires.

Cette approche consistant à prendre en compte deux liquides extragranulaires est originale dans la littérature concernant les modèles à prise de moyenne.

Si l'on se réfère à la conclusion de l'étude bibliographique, il y a premièrement les modèles à prise de moyenne qui ne considèrent pas les structures « mixtes » (Dagner J. 2008), (B. C. Wang C.Y 1994). Dans ce cas, le volume du front est considéré comme entièrement colonnaire. Pour calculer v_{front} , la concentration du liquide extragranulaire au moment où le front pénètre dans le volume doit être utilisée pour éviter l'effet de blocage solutal artificiel évoqué ci-dessus. Par ailleurs, afin de décrire précisément la zone autour des pointes colonnaires, les auteurs utilisent des tailles de VER plus restreintes à l'endroit du front colonnaire (B. C. Martorano M.A 2003), qui peuvent atteindre des tailles caractéristiques de l'ordre de 0,1 mm.

Deuxièmement, les autres modèles à prise de moyenne qui traitent les structures « mixtes » (L. A. Wu M. 2010), (Ciobanas A.I 2007) ne considèrent pas non plus deux liquides extragranulaires mais un seul liquide extragranulaire total, un milieu continu qui est donc partagé entre les structures colonnaires et le reste du VER. En conséquence, on peut se poser la question si ces modèles modélisent de manière appropriée la zone autour du front colonnaire.

La distinction entre les deux liquides extragranulaires n'est par contre plus nécessaire une fois que le front colonnaire a dépassé le VER. En conséquence, on va supposer dans le cadre de notre modèle que la distinction entre la zone colonnaire et le reste du VER (et donc la séparation du liquide extragranulaire) ne se fait que dans les volumes qui contiennent le front. On fait cette hypothèse car à l'échelle du temps de solidification, le temps de passage du front est négligeable. La situation est schématisée sur la Figure II.3-10 .

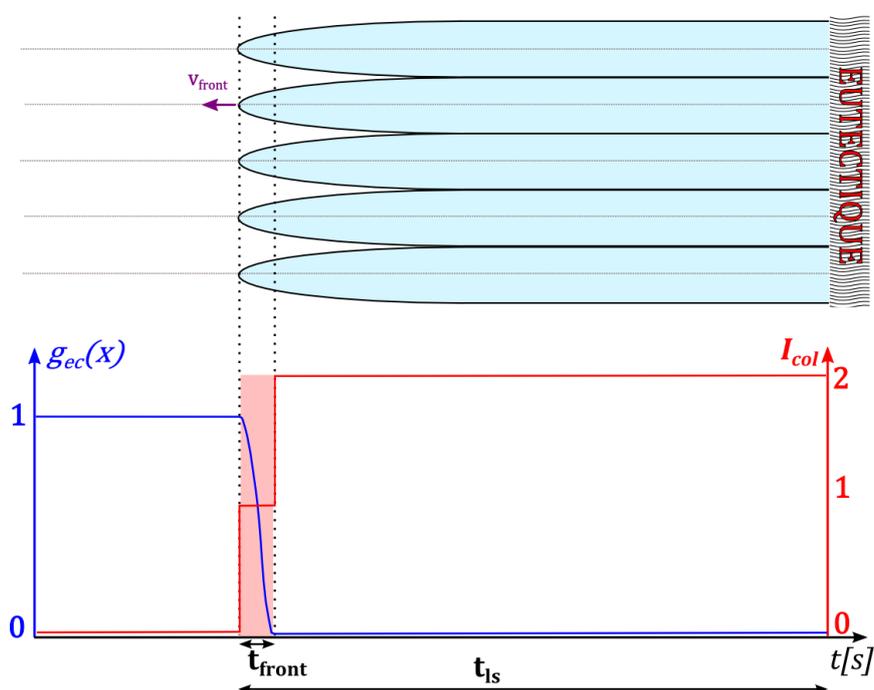


Figure II.3-10 Schéma indiquant le passage du front colonnaire au cours du temps. L'évolution temporelle de I_{col} indique la présence du front (I_{col} passe de 0 à 1) et la solidification derrière le front ($I_{col} = 2$). La fraction extracolonnaire g_{ec} (en bleu) passe rapidement de 1 à 0 lors du passage du front. La zone en rouge indique l'intervalle de temps t_{front} où les deux liquides extragranulaires coexistent et cet intervalle est petit devant le temps total de solidification t_{ls} .

La zone en rouge correspond au moment où le front est présent dans le VER considéré. On a alors $I_{col} = 1$ et la fraction de zone extracolonnaire g_{ec} (qui correspond également à la fraction de liquide extracolonnaire) passe de 1 à 0, signifiant que le VER a été dépassé par le front colonnaire. Après quoi la solidification se poursuit en arrière du front ($I_{col} = 2$).

Si on compare le temps de passage du front $t_{front} = \frac{d_0}{v_{front}}$ et le temps de solidification $t_{ls} = \frac{H_{ZP}}{v_{front}}$,

$\frac{t_{front}}{t_{ls}} = \frac{d_0}{H_{ZP}} = d_0 \cdot \frac{G}{\Delta T_0}$. Pour les valeurs maximales des gradients calculés sur les lingots d'acier ($G \approx 2500 \text{ K} \cdot \text{m}^{-1}$), on trouve $\frac{t_{front}}{t_{ls}} \approx 0,1$ ce qui indique donc que l'hypothèse précédente devrait être vérifiée lors des coulées en lingot.

Les volumes en arrière du front seront alors traités de manière identique à une zone poreuse de grains équiaxes (voir chapitre II.2 et Annexe A).

○ [Modélisation du VER colonnaire en croissance](#)

On peut désormais détailler le modèle concernant les volumes contenant le front colonnaire. Comme dans le chapitre II.2, on peut détailler le modèle en utilisant le liquide total de la zone colonnaire (liquide intragranulaire et liquide extragranulaire). En effet, la concentration de soluté dans le liquide colonnaire $\langle C_l^{col} \rangle^l$ peut être reliée à la concentration dans le liquide extragranulaire colonnaire $\langle C_l^{col} \rangle^e$ par la relation :

$$\langle C_l^{col} \rangle^e = \frac{g_l^{col} \langle C_l^{col} \rangle^l - g_d^{col} C_l^{*,col}}{g_e^{col}} \quad (2.44)$$

Pour pouvoir écrire la relation (2.44), on a supposé $\langle C_l^{col} \rangle^d = C_l^{*,col}$.

On réitère également l'hypothèse que les liquides intra- et extragranulaires sont transportés ensemble, donc : $\langle \bar{v}_l^{col} \rangle^d = \langle \bar{v}_l^{col} \rangle^e = \langle \bar{v}_l^{col} \rangle^l$. Afin de simplifier encore le modèle, on va également faire l'hypothèse que l'on vérifie :

$$\langle \bar{v}_l^{col} \rangle^l = \langle \bar{v}_l^{ec} \rangle^l = \langle \bar{v}_l \rangle^l \quad (2.45)$$

La relation (2.45) permet alors de résoudre une seule équation de quantité de mouvement pour la phase liquide totale. Cette égalité n'est pas vérifiée dans le cas général car la zone colonnaire est constituée de sous-structures fixes où l'écoulement est modélisé par un terme de Darcy tandis que le liquide devant le front est quant à lui libre de se mouvoir. Par ailleurs, on a vu que le temps où les deux liquides coexistent est faible devant le temps total de solidification. Néanmoins, notre modèle est alors limité dans sa description des écoulements présents dans la zone des pointes colonnaires.

En partant de ces hypothèses, on peut écrire les équations de conservation de la masse :

$$\begin{cases} \frac{\partial(\rho_s g_{col} g_s^{col})}{\partial t} = g_{col} \Gamma_s^{col} + \Phi_s^{col} \\ \frac{\partial(\rho_l g_{col} g_l^{col})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l g_{col} g_l^{col} \langle \bar{v}_l \rangle^l) = -g_{col} \Gamma_s^{col} - \Phi_s^{col} + \frac{\partial(\rho_l g_{col})}{\partial t} \\ \frac{\partial(\rho_l g_{ec})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l g_{ec} \langle \bar{v}_l \rangle^l) = -\frac{\partial(\rho_l g_{col})}{\partial t} \end{cases} \quad (2.46)$$

En l'absence de structures équiaxes et sachant que les structures colonnaires ne sont pas transportées par les phénomènes de convection, on vérifie $\langle \bar{v}_s \rangle = 0$. Par la suite, l'équation de continuité : $\nabla \cdot (\rho_l g_{col} g_l^{col} \langle \bar{v}_l \rangle^l + \rho_l g_{ec} \langle \bar{v}_l \rangle^l) = \nabla \cdot (\rho_l g_l^{tot} \langle \bar{v}_l \rangle^l) = 0$ ainsi que la conservation de la

masse nous assurent que la contribution du transport (termes en bleu) est nulle en ce qui concerne les fractions de phase dans chaque zone.

Les équations de conservation du soluté dans le cas d'un alliage binaire (pour un alliage multiconstitué on résout ces équations pour chaque élément i) :

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \frac{\partial \left(\rho_s g_{col} g_s^{col} \langle C_s^{col} \rangle^s \right)}{\partial t} = g_{col} \Gamma_s^{col} C_s^{*,col} + \rho_s S_v^{s,col} D_s g_{col} \frac{k C_l^{*,col} - \langle C_s^{col} \rangle^s}{\delta_s^{col}} + \Phi_s^{col} k \langle C_l^{col} \rangle^l \\
 \frac{\partial \left(\rho_l g_{col} g_l^{col} \langle C_l^{col} \rangle^l \right)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho_l g_{col} g_l^{col} \langle C_l^{col} \rangle^l \langle \vec{v}_l \rangle^l \right) = -g_{col} \Gamma_s^{col} C_s^{*,col} - \Phi_s^{col} k \langle C_l^{col} \rangle^l \\
 \quad + \rho_l S_v^{env,col} D_l \frac{g_l^{col}}{g_e^{col}} g_{col} \frac{C_l^{*,col} - \langle C_l^{col} \rangle^l}{\delta_l^{env,col}} + \frac{\partial (\rho_l g_{col})}{\partial t} \langle C_l^{col} \rangle^l \\
 \frac{\partial \left(\rho_l g_{ec} \langle C_l^{ec} \rangle^l \right)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho_l g_{ec} \langle C_l^{ec} \rangle^l \langle \vec{v}_l \rangle^l \right) = - \frac{\partial (\rho_l g_{col})}{\partial t} \langle C_l^{ec} \rangle^l
 \end{array} \right. \quad (2.47)$$

Dans les équations précédentes, on a mis en bleu les termes qui correspondent aux variations dues au transport, en marron celles qui correspondent à la croissance et à la germination. Enfin, les termes en vert correspondent à la redistribution des fractions de liquide et du soluté à la suite de l'avancée du front. Ces variations sont les conséquences de l'avancée du front dans le volume et peuvent être déduites de la conservation de la masse et du soluté totale et de la variation de g_{col} , calculée par l'équation :

$$\frac{\partial g_{col}}{\partial t} = \frac{v_{front}}{d_{lim}} \quad (2.48)$$

On a déjà vu dans le chapitre II.3.2 la définition des fractions de zone g_{col} et g_{ec} et de la longueur limite d_{lim} .

La vitesse du front colonnaire V_{front} est calculée en utilisant la concentration dans la zone extracolumnaire $\langle C_l^{ec} \rangle^l$ et la surfusion $\Delta T_{front} = T_f + m_l \langle C_l^{ec} \rangle^l - T$.

Γ_s^{col} correspond au taux de production du solide colonnaire, donc :

$$\Gamma_s^{col} = \rho_s \frac{\partial g_s^{col}}{\partial t} \quad (2.49)$$

Φ_s^{col} correspond au solide créé lors de l'apparition des sous-structures colonnaires. Cette grandeur est liée à l'avancée du front colonnaire et au volume initial de ces sous-structures que l'on prendra égal à celui des germes équiaxes V_{germ} . On a alors :

$$\Phi_s^{col} = V_{germ} n_{col}^{final} \frac{\partial g_{col}}{\partial t} \quad (2.50)$$

Où n_{col}^{final} est donné par l'équation (2.24).

En parallèle de l'équation (2.12), on peut également écrire le bilan microscopique à l'interface solide/liquide dans la zone colonnaire :

$$\Gamma_s^k C_l^{*,k} (1-k) = \frac{\rho_s S_v^{s,k} D_s}{\delta_s} \left(k C_l^{*,k} - \langle C_s^k \rangle^s \right) + \frac{\rho_l S_v^{env,k} D_l}{\delta_l^{env,k}} \frac{g_l^k}{g_e^k} \left(C_l^{*,k} - \langle C_l^k \rangle^l \right) \quad (2.51)$$

Où ici l'indice k vaut nécessairement col .

Comme dans le cas des structures équiaxes, notre modèle gère la refusion des structures colonnaires en supposant la diminution de la quantité de solide dans les sous-structures, tout en gardant la fraction d'enveloppe constante.

Néanmoins, dans le cas (rare) de la refusion totale des structures colonnaires, on considère logiquement l'ancienne zone colonnaire comme une zone entièrement liquide (et en l'absence de grains équiaxes tout le VER devient ainsi liquide).

On a vu que l'hypothèse $\langle \vec{v}_l^{col} \rangle^l = \langle \vec{v}_l^{ec} \rangle^l$ permettrait de traiter les volumes contenant le front de manière similaire à une zone de grains bloqués et donc de ne pas modifier la modélisation du transport de la quantité de mouvement.

En fait, on va chercher dans le cadre de notre modèle à ne pas, si possible, modifier la modélisation du transport (termes en bleu) dans le modèle initial.

En effet, les termes liés à la croissance et à l'avancée du front peuvent être traités de manière locale dans chaque volume (en négligeant la diffusion macroscopique). En conséquence, on peut traiter séparément les volumes contenant le front colonnaire et distinguer les deux liquides extragranulaires uniquement dans ces volumes. Dans les autres parties du système (entièrement liquide ou en arrière du front), on ne considère alors qu'une seule zone et un liquide extragranulaire. On revient donc à une modélisation « classique » telle que présentée dans le chapitre II.2

En revanche, les variations dues au transport ne peuvent pas être traitées de manière locale *a priori* car elles sont des termes d'échanges avec les volumes voisins. Ceci étant, sachant que pour les structures colonnaires $\langle \vec{v}_s \rangle^s = \vec{0}$, les seules grandeurs physiques qui sont à même d'être modifiées par les phénomènes de convection sont les concentrations de soluté dans le liquide $\langle C_l^{col} \rangle^l$ et $\langle C_l^{ec} \rangle^l$.

On va donc être amenés à faire l'hypothèse supplémentaire suivante :

$$\left[\frac{\partial \left(\rho_l^{col} \langle C_l^{col} \rangle^l \right)}{\partial t} \right]_{tr} = \left[\frac{\partial \left(\rho_l^{ec} \langle C_l^{ec} \rangle^l \right)}{\partial t} \right]_{tr} \quad (2.52)$$

Où l'indice « tr » indique qu'il s'agit de la variation uniquement due aux phénomènes de convection.

A l'aide de cette hypothèse, on peut donc déterminer le transport des solutés $\langle C_l^{col} \rangle^l$ et $\langle C_l^{ec} \rangle^l$ en considérant uniquement le transport du soluté dans le liquide total $\langle C_l^{tot} \rangle^l$:

$$\frac{\partial(\rho_l g_l^{tot} \langle C_l^{tot} \rangle^l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l g_l^{tot} \langle C_l^{tot} \rangle^l \langle \vec{v}_l \rangle^l) = 0 \quad (2.53)$$

En sachant par ailleurs que la conservation du soluté dans le liquide permet d'écrire :

$$g_l^{tot} \langle C_l^{tot} \rangle^l = g_l^{col} g_{col} \langle C_l^{col} \rangle^l + (1 - g_{col}) \langle C_l^{ec} \rangle^l \quad (2.54)$$

Les équations (2.52), (2.53) et (2.54) permettent alors de déterminer le transport du soluté liquide en ne considérant qu'un seul liquide, y compris dans les volumes contenant le front colonnaire. Comme pour l'hypothèse (2.45), on justifie cette simplification en remarquant que le temps de coexistence des deux liquides extragranulaires est faible devant le temps total de solidification. Néanmoins, on retiendra que le traitement des phénomènes de convection dans les volumes contenant le front est assez fortement simplifié dans le cadre de notre modèle.

La modélisation du transport de chaleur n'est pas non plus modifiée dans le cadre de notre modèle car elle n'est pas résolue pour les phases liquide et solide séparément mais via une équation de « mélange » :

$$\frac{\partial(\rho_s f_s^{tot} h_s + \rho_l f_l^{tot} h_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l f_l^{tot} h_l \langle \vec{v}_l \rangle^l) = \nabla \cdot (\lambda_m \vec{\nabla}(T)) \quad (2.55)$$

Où f_s^{tot} et f_l^{tot} sont les fractions massique dans le liquide total. On verra par la suite comment calculer ces grandeurs à partir des fractions volumiques.

La température peut-être relié à $C_l^{*,col}$ par (pour un alliage multiconstitué) :

$$T = T_f + \sum_{1 \leq i \leq N_{ele}} m_i^i C_l^{i*,col} \quad (2.56)$$

On ne peut pas définir de concentrations à l'interface solide/liquide dans la zone extracolonnaire entièrement liquide, mais l'équilibre thermique à l'échelle du VER permet d'écrire :

$$T_{col} = T_{ec} = T \quad (2.57)$$

L'équation de conservation de la densité de sous-structures colonnaires s'écrit :

$$\frac{\partial(g_{col} n_{col})}{\partial t} = \frac{\Phi_s^{col}}{V_{germ}} \quad (2.58)$$

L'équation de conservation de la fraction d'enveloppes (uniquement dans la zone colonnaire) :

$$\frac{\partial(g_{col} g_{env}^{col})}{\partial t} = g_{col} \Gamma_{env}^{col} + \Phi_s^{col} \quad (2.59)$$

Où $\Gamma_{env}^{col} = S_v^{env,col} v_{env}^{col} = S_v^{env,col} \frac{v_{tip}^{col}}{\sqrt{3}}$. v_{tip}^{col} est la vitesse de croissance des pointes dans la zone colonnaire et est calculée en se basant sur la concentration $\langle C_l^{col} \rangle^e$.

Dans ce qui précède, on a supposé que $\rho_l^{col} = \rho_l^{ec} = \rho_l^{tot}$ afin d'alléger la description du modèle. Néanmoins, on considère en réalité des densités variables des liquides en fonction de la température et de la concentration suivant la relation :

$$\rho_l^k = \rho_l^{ref} \left[1 + \beta_T (T - T_{ref}) + \sum_{1 < j < N_{ele}} \beta_j \left(\langle C_l^{j,k} \rangle^l - C_{ref}^j \right) \right] \quad (2.60)$$

Où k correspond à la zone que l'on considère (ou le volume total), soit $k \in \{col, ec, tot\}$. β_T est le coefficient d'expansion thermique exprimé en K^{-1} . β_j est le coefficient d'expansion solutale de l'élément d'alliage j , exprimé en $\%pds^{-1}$.

A partir de ces masses volumiques, on peut déterminer les fractions massiques f_l^k à l'aide des fractions volumiques g_l^k :

$$f_l^k = \frac{\rho_l^k g_l^k}{(\rho_l^k - \rho_s) g_l^k + \rho_s} \quad (2.61)$$

Pour les zones colonnaire et extracolonnaire, il est également possible de calculer la fraction massique de zone f_k à partir de leur fractions volumiques g_{col} et g_{ec} :

$$f_k = \frac{g_k \left[g_l^k (\rho_l^k - \rho_s) + \rho_s \right]}{g_l^{tot} (\rho_l^{tot} - \rho_s) + \rho_s} \quad (2.62)$$

Enfin, dans notre modèle on néglige (sauf indication contraire) la retassure totale dans le lingot. Par contre, le modèle considère le retrait, c'est-à-dire le fait que $\rho_s \neq \rho_l$. On suppose une densité constante du solide et on définit le coefficient de retrait :

$$c_r = \frac{\rho_s - \rho_l}{\rho_s} \quad (2.63)$$

Le coefficient c_r est constant et on prend ρ_l pour la composition nominale du liquide et à la température de liquidus.

II.3.3.b Implémentation numérique du modèle

Ci-dessous, on définit la liste des variables nécessaires à l'implémentation du modèle :

- Les masses volumiques : $\rho_l^{col}, \rho_l^{ec}, \rho_l^{tot}$
- Les densités de grains : n_{col}, n_{tot}
- Les fractions volumiques (massiques) de liquide : $g_l^{col}(f_l^{col}), g_l^{tot}(f_l^{tot})$
- Les fractions volumiques (massiques) de solide : $g_s^{col}(f_s^{col}), g_s^{tot}(f_s^{tot})$
- Les fractions d'enveloppes : $g_{env}^{col}, g_{env}^{tot}$
- Les concentrations moyennes de la phase liquide : $\langle C_l^{col} \rangle^l, \langle C_l^{ec} \rangle^l, \langle C_l^{tot} \rangle^l$

- Les concentrations moyennes de la phase liquide : $\langle C_s^{col} \rangle^s, \langle C_s^{tot} \rangle^s$
- Les concentrations d'équilibre à l'interface solide/liquide : $C_l^{*,col}, C_l^{*,tot}$
- Les enthalpies massiques de mélange : h_{col}, h_{ec}, h_{tot}
- Les fractions volumiques (massiques) de zone : $g_{col}(f_{col}), g_{ec}(f_{ec})$

On va dans la suite détailler le traitement des différentes étapes du modèle : le transport, l'avancée du front colonnaire et enfin la croissance.

L'algorithme général est résumé en Figure II.3-11. L'algorithme du modèle de croissance est présenté en Figure II.3-12. Comme l'étape de croissance est un problème local, le modèle de croissance est utilisé sur chaque volume de discrétisation séparément. Le seul « couplage » que le modèle entraîne se trouve au niveau du modèle de propagation, lorsque le front peut se transmettre aux volumes voisins et que I_{col} doit être recalculé dans le domaine.

Un schéma des principales étapes numériques est également présenté sur la Figure II.3-13.a-d.

On notera en exposant « 0 » pour la situation à $t_0 = t - \Delta t$ et « tr » après l'étape de transport. On rappelle également que l'indice « k » correspond à la zone colonnaire, extracolonnaire ou au volume total de la maille, $k \in [col, ec, tot]$.

On part donc à la fin de l'étape de transport. Comme on l'a vu dans la partie précédente, la situation pour les variables d'intérêt est la même qu'au pas de temps précédent t_0 à l'exception notable de l'enthalpie totale de mélange $h_m^{tot} = c_p T + g_l^{tot} \Delta h_f$ (donnée par la résolution de l'équation de la chaleur) et des concentrations du soluté liquide dans chaque zone.

On peut donc écrire pour l'initialisation des autres variables :

$$\phi_k^{tr} = \phi_k^0 \quad \text{avec } \phi_k = g_l^k, g_{env}^k, \rho_l^k, \dots \quad (2.64)$$

Concernant les concentrations dans le liquide, la conservation totale du soluté dans le liquide avant et après transport permet d'écrire :

$$\rho_l^{tot} g_l^{tot,0} \left(\langle C_l^{tot} \rangle^{l,tr} - \langle C_l^{tot} \rangle^{l,0} \right) = \rho_l^{col} g_l^{col,0} g_{col} \left(\langle C_l^{col} \rangle^{l,tr} - \langle C_l^{col} \rangle^{l,0} \right) + \rho_l^{ec} g_{ec} \left(\langle C_l^{ec} \rangle^{l,tr} - \langle C_l^{ec} \rangle^{l,0} \right) \quad (2.65)$$

D'après l'équation (2.64), on a $g_l^{k,tr} = g_l^{k,0}$, ce qui nous permet d'écrire l'équation (2.65). On a de plus supposé ici que $\rho_l^{k,tr} = \rho_l^{k,0}$ pour alléger l'écriture des équations. Dans l'équation (2.65), les inconnues $\langle C_l^{col} \rangle^{l,tr}$ et $\langle C_l^{ec} \rangle^{l,tr}$ sont en rouge.

En se servant de l'hypothèse (2.52), on peut également écrire :

$$\rho_l^{col} \left(\langle C_l^{col} \rangle^{l,tr} - \langle C_l^{col} \rangle^{l,0} \right) = \rho_l^{ec} \left(\langle C_l^{ec} \rangle^{l,tr} - \langle C_l^{ec} \rangle^{l,0} \right) \quad (2.66)$$

On peut remarquer que si on peut supposer $\rho_l^{col} \approx \rho_l^{ec}$ (ce qui est souvent le cas en pratique) on trouve alors simplement l'égalité des variations de concentrations massiques :

$$\left(\langle C_i^{tot} \rangle^{l,tr} - \langle C_i^{tot} \rangle^{l,0} \right) = \left(\langle C_i^{col} \rangle^{l,tr} - \langle C_i^{col} \rangle^{l,0} \right) = \left(\langle C_i^{ec} \rangle^{l,tr} - \langle C_i^{ec} \rangle^{l,0} \right) \quad (2.67)$$

Dans la pratique, cela signifie que l'on va répartir la variation totale de soluté dans chaque zone k au prorata de la fraction de zone g_k et de la fraction liquide correspondante g_l^k . La situation pour la répartition du soluté est schématisée sur la Figure II.3-14.

Les équations (2.65) et (2.66) permettent dans tous les cas de déterminer $\langle C_i^{col} \rangle^{l,tr}$ et $\langle C_i^{ec} \rangle^{l,tr}$.

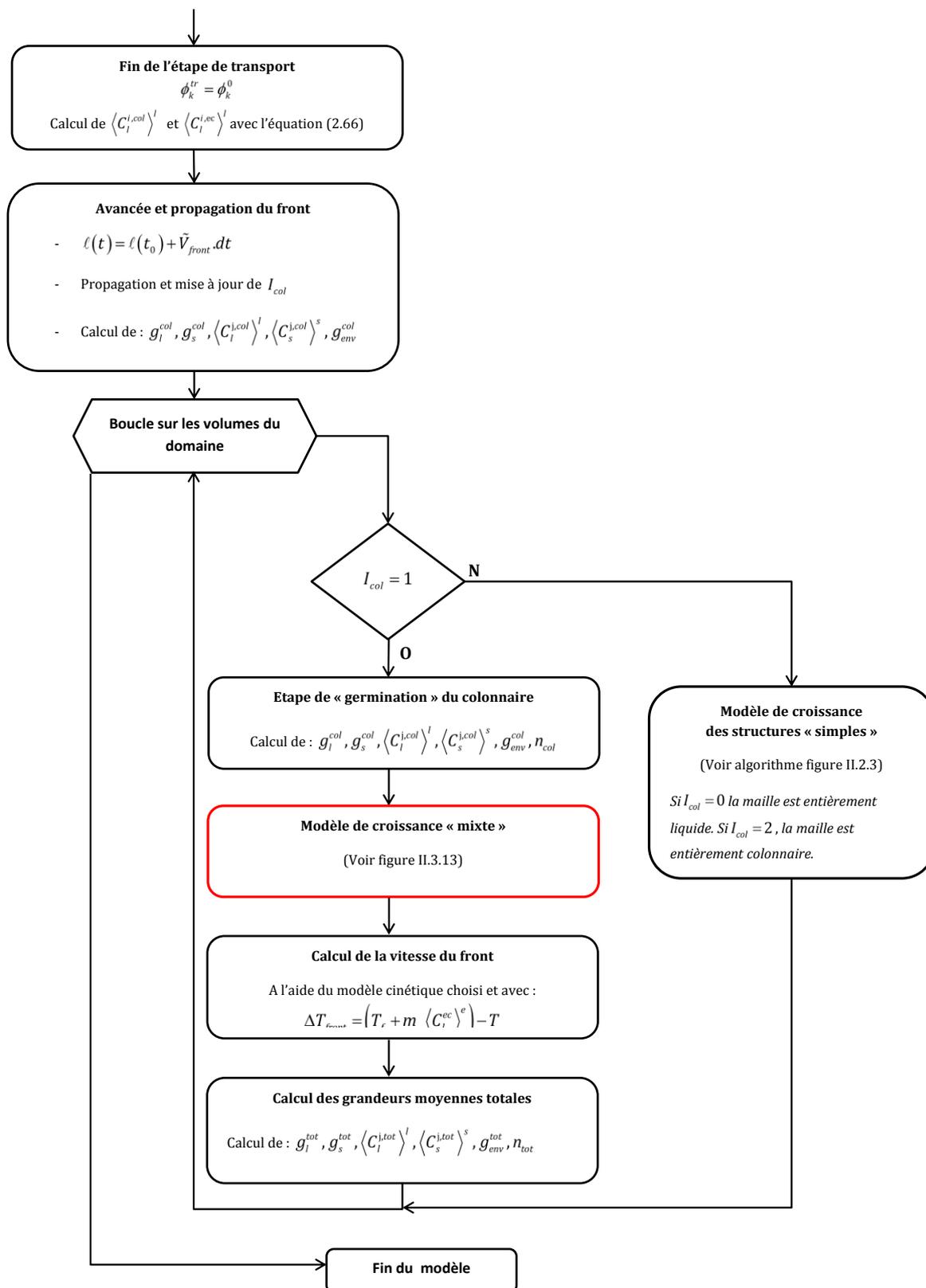


Figure II.3-11 : Algorithme pour le modèle complet d'avancée du front, de germination et de croissance dans le cas de structures purement colonnaires. Le modèle de croissance « mixte » proprement dit est encadré en rouge et est explicité en Figure II.3-12.

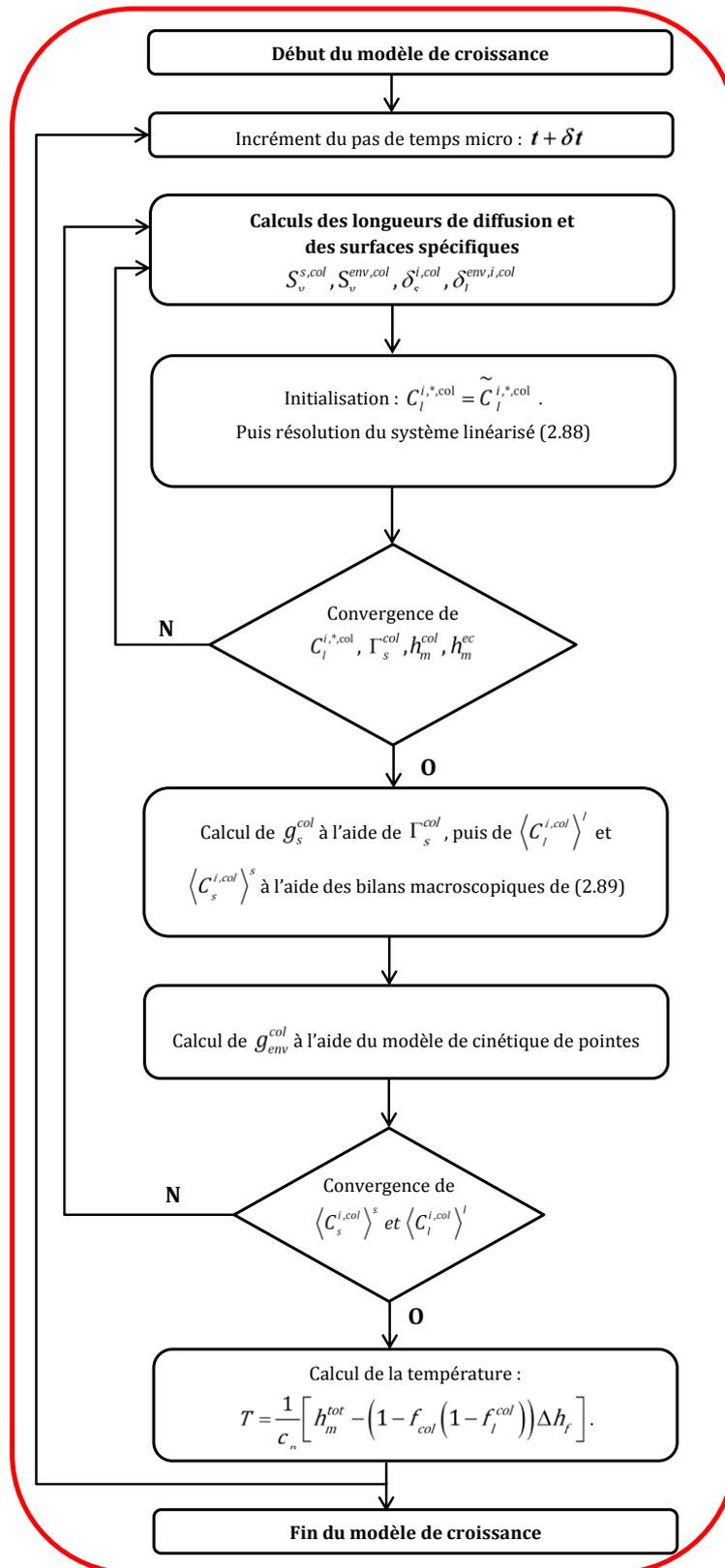
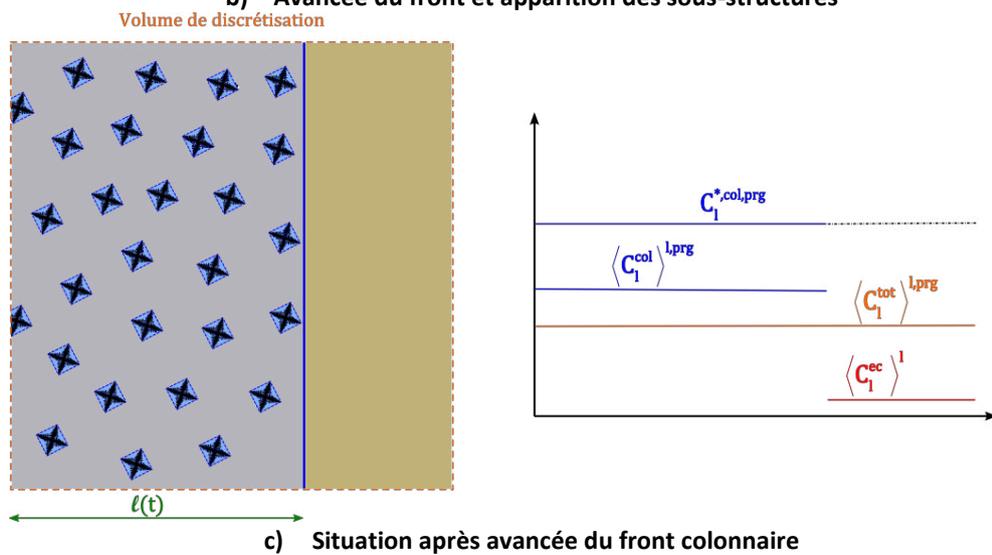
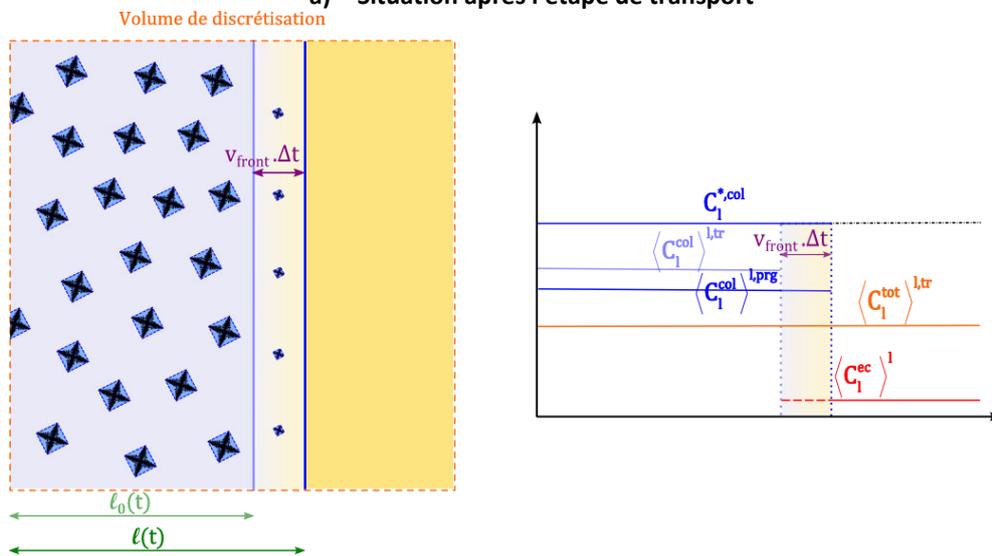
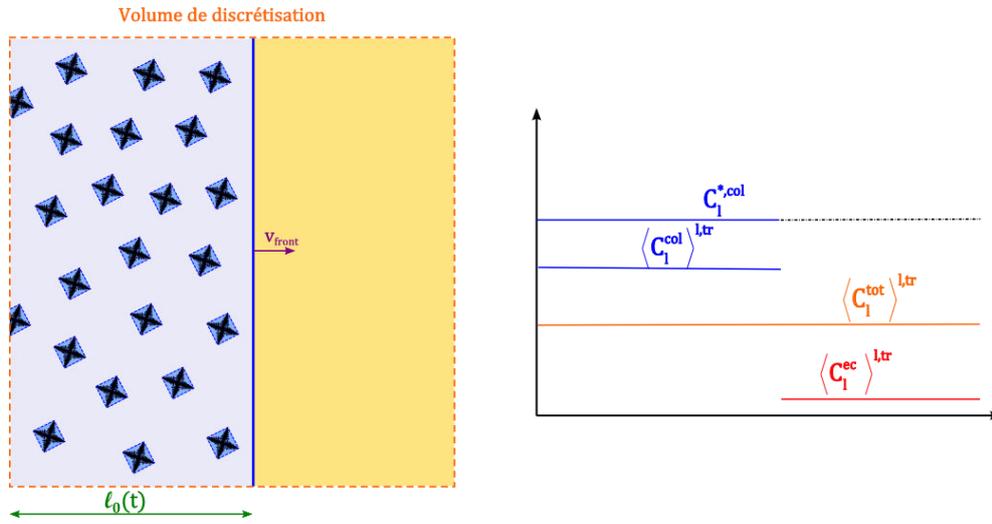


Figure II.3-12 : Algorithme pour le modèle de croissance des volumes du front dans le cas de structures purement colonnaires.



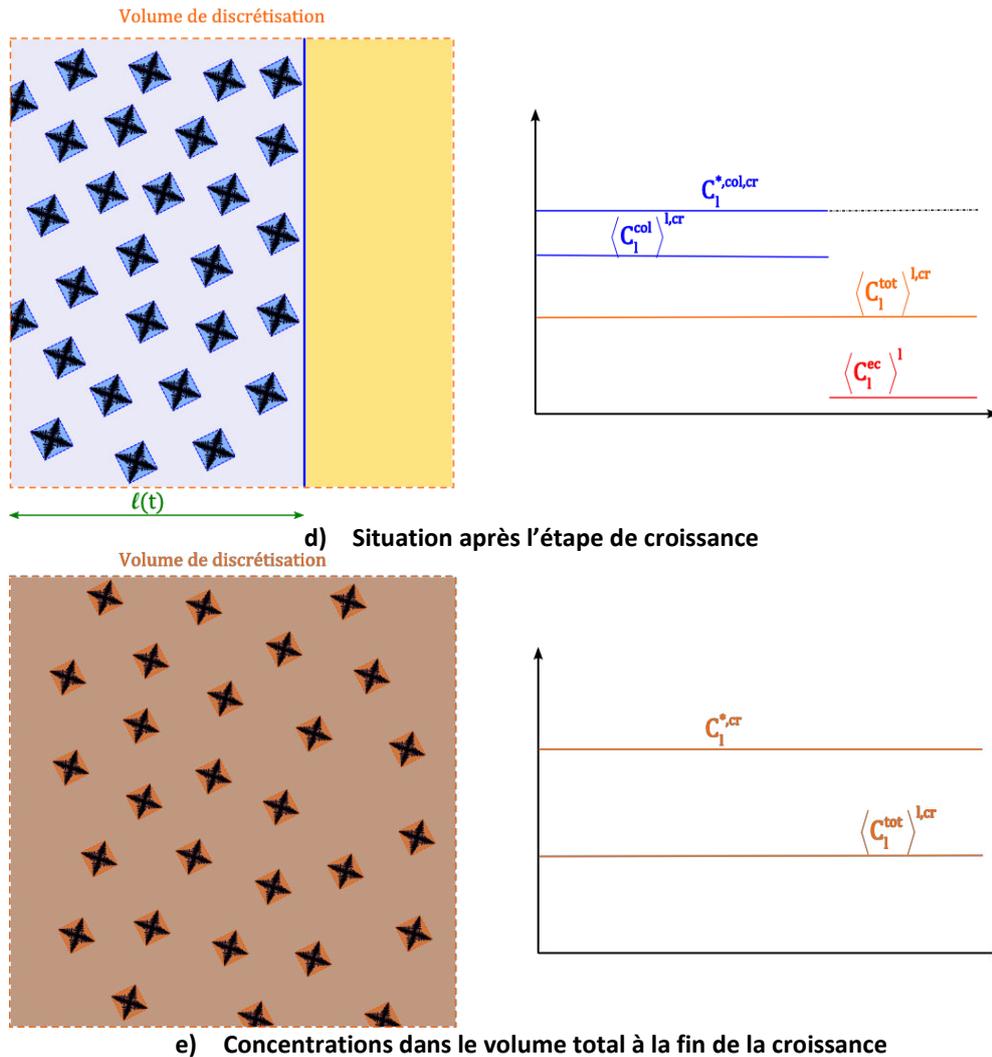


Figure II.3-13 : Schémas des principales étapes de modélisation d'un volume du front. A gauche, les schémas du volume de discrétisation avec une population de grains moyens et la position du front symbolisée par une ligne bleue. A droite, les profils des concentrations moyennes dans les différentes zones du volume. La concentration dans la zone extracolonnaire ne varie pas après le transport et reste donc à $\langle C_1^{ec} \rangle^{l, tr}$. a) Situation après transport. b) Déroulement de l'avancée du front et l'apparition des sous-structures colonnaires. c) Après la propagation du front. d) Après croissance. e) Situation à la fin du modèle et calcul des grandeurs moyennes totales finales.

La situation initiale après transport dans un volume contenant déjà le front est schématisée sur la Figure II.3-13.a où $\ell_0(t)$ est la position du front à t_0 .

o Etape de propagation du front colonnaire

Après l'étape de transport, on réalise la propagation du front colonnaire et on calcule donc les nouvelles positions du front et les valeurs de I_{col} dans le domaine. Là où $I_{col} = 1$, on calcule $\ell(t)$ par :

$$\ell(t) = \ell(t_0) + \tilde{v}_{front} \Delta t \tag{2.68}$$

\tilde{v}_{front} est la vitesse du front calculée à l'itération précédente afin qu'elle soit prise en compte de manière implicite. Elle est calculée à l'aide de la surfusion $\Delta T = T_f + \sum_i m_i^i \langle C_i^{i,ec} \rangle^l - T$.

Associées à cette avancée du front, deux conséquences sont illustrées sur la Figure II.3-13.b.

Premièrement, une zone de liquide (coloriée en dégradé sur la figure) sera intégrée au front durant son avancée. Il faut donc recalculer les grandeurs moyennes pour la nouvelle zone colonnaire dont la longueur passe de $\ell_0(t)$ à $\ell(t)$ et la fraction dans la maille passe de g_{col}^0 à g_{col} .

Deuxièmement, l'apparition de nouvelles sous-structures colonnaires doit se faire selon le modèle de représentation de ces structures expliqué précédemment, en suivant l'équation (2.58).

D'après l'algorithme en Figure II.3-11 ces deux calculs se font séquentiellement. On pourrait avoir envie de les réaliser de manière couplée. Cependant, afin d'alléger les calculs effectués, on choisit de les faire à la suite, dans l'ordre ci-dessus. Ceci est justifié par le fait que la germination a très peu d'effet sur les grandeurs moyennes de la zone colonnaire. On prend en effet un volume initial V_{germ} des sous-structures identique à ceux des équiaxes, c'est-à-dire avec un rayon de l'ordre du micromètre. Naturellement, la seule grandeur qui est changée de manière significative est la population de sous-structures. On recalculera donc n_{col} à ce moment-là.

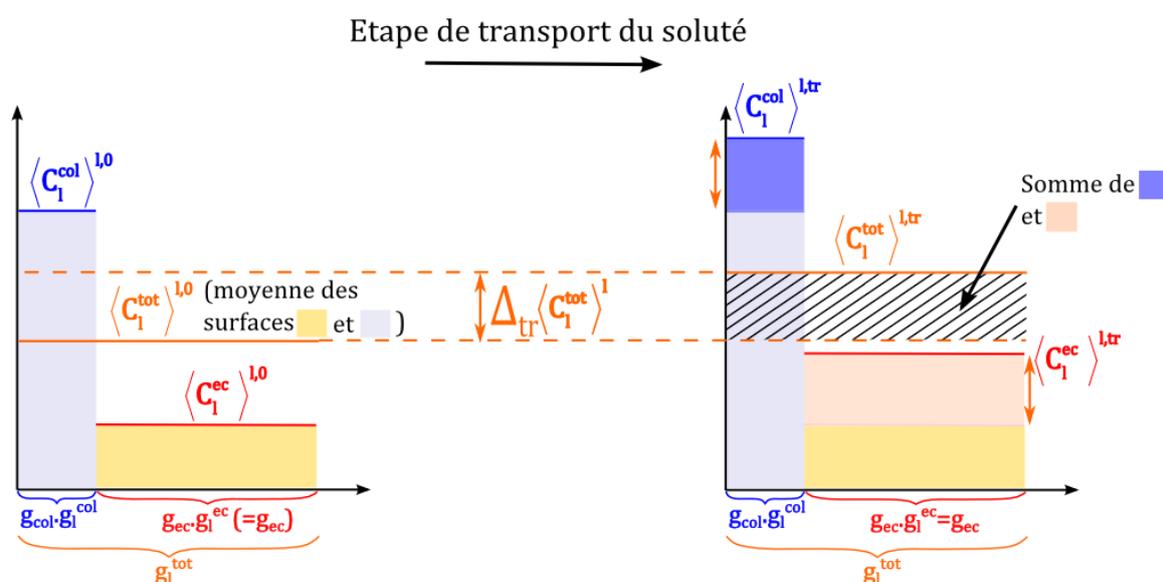


Figure II.3-14 Schéma de répartition du soluté liquide lors de l'étape de transport, suivant l'hypothèse (2.52) et d'après l'équation (2.67) (en supposant donc $\rho_1^{col} = \rho_1^{ec}$).

On a également choisi de ne pas coupler directement l'avancée du front à l'étape de croissance et on résout ces étapes successivement (voir algorithme Figure II.3-11). Une conséquence est que l'avancée du front et l'apparition des sous-structures sont basées sur le pas de temps macroscopique.

On a choisi de procéder ainsi car dans le modèle SOLID original, la germination des grains équiaxes n'était pas non plus couplée à la croissance, et par facilité d'implémentation, on réalise ici la même hypothèse pour les sous-structures colonnaires.

L'avancée du front affecte principalement les grandeurs dans la zone colonnaire mais comme les deux zones du volume sont couplées, la position du front aura forcément un impact sur les grandeurs

totales et donc in fine sur la température. Dans le chapitre précédent, on a vu que la vitesse du front pour la solidification colonnaire d'un lingot d'acier se trouve dans l'intervalle $v_{front} \in [7.10^{-5}; 1,5.10^{-3}] m.s^{-1}$. Donc on a l'intervalle du temps de passage dans une maille $\frac{\Delta x}{v_{front}} = t_{front} \in [3; 70] s$ avec $\Delta x = 5 mm$. Comparé à l'intervalle des pas de temps (macroscopique) utilisés lors des calculs $\Delta t \in [10^{-3}; 0,1] s$, on voit que les temps de passage sont suffisamment importants pour que l'erreur faite à chaque pas de temps sur la position du front soit faible et permette de découpler l'avancée du front et la croissance des structures.

Voyons donc la première étape d'intégration d'une zone liquide dans la nouvelle zone colonnaire. On rappelle que cette étape ne modifie pas les propriétés intensives de la zone extracolonnaire (à part g_{ec} bien sûr) car on a justifié l'absence de diffusion chimique entre les deux zones.

La fraction de zone colonnaire après transport et avant propagation est alors g_{col}^0 . On notera en indice « *pr* » les nouvelles grandeurs (sauf n_{col}) pour la zone colonnaire après avancée du front, mais avant germination. La fraction de zone colonnaire devient alors g_{col} .

Comme il y a conservation des grandeurs moyennes totales, les équations qui suivent découlent directement de la conservation de la masse, du soluté et de la fraction d'enveloppe sur l'ensemble de la maille.

Pour la fraction volumique de liquide :

$$g_l^{col,pr} = g_l^{col,tr} \frac{g_{col}^0}{g_{col}} + \frac{\rho_l^{eqx}}{\rho_l^{col}} \left(1 - \frac{g_{col}^0}{g_{col}} \right) \quad (2.69)$$

La fraction de solide se déduit directement de $g_l^{col,pr} + g_s^{col,pr} = 1$.

Pour la concentration moyenne de soluté dans le liquide :

$$\langle C_l^{col} \rangle^{l,pr} = \frac{1}{g_l^{col,pr}} \left[\langle C_l^{col} \rangle^{l,tr} g_l^{col,tr} \frac{g_{col}^0}{g_{col}} + \langle C_l^{ec} \rangle^{l,tr} \frac{\rho_l^{eqx}}{\rho_l^{col}} \left(1 - \frac{g_{col}^0}{g_{col}} \right) \right] \quad (2.70)$$

Afin de simplifier les notations, on a omis l'indice i pour indiquer le numéro d'élément chimique. $\langle C_l^{ec} \rangle^{l,tr}$ représente la concentration du liquide devant le front.

Pour la concentration moyenne du solide :

$$\langle C_s^{col} \rangle^{s,pr} = \langle C_s^{col} \rangle^{s,tr} \frac{g_s^{col,tr} \frac{g_{col}^0}{g_{col}}}{g_s^{col,pr}} \quad (2.71)$$

Pour la fraction d'enveloppe :

$$g_{env}^{col,pr} = g_{env}^{col,tr} \frac{g_{col}^0}{g_{col}} \quad (2.72)$$

Voyons maintenant l'étape d'apparition de nouvelles sous-structures colonnaires. Sachant que λ_1 est pris constant dans le modèle et considérant la représentation par zone choisie, il est aisé de voir que la densité de sous-structures dans la zone colonnaire ne varie pas tout au long de l'avancée du front et on a donc à tout moment :

$$n_{col} = n_{col}^{final} \quad (2.73)$$

n_{col}^{final} est donnée par l'équation (2.24).

En revanche, et dans un souci d'exactitude, on doit également ajouter la contribution de l'apparition de ces germes sur les grandeurs moyennes précédemment calculées. On appelle V_{germ} le volume d'un germe colonnaire, comme pour les germes équiaxes. On notera en indice « *prg* » les nouvelles grandeurs après germination, ce qui complète la partie propagation du modèle.

Pour la fraction de liquide :

$$g_l^{col,prg} = g_l^{col,pr} - V_{germ} \left(1 - \frac{g_{col}^0}{g_{col}} \right) n_{col}^{final} \quad (2.74)$$

Ici et dans la suite, on suppose $\rho_s = \rho_l^{col}$ lors de la création des sous-structures colonnaires. Les variations de solide mises en jeu étant très faibles, l'hypothèse se justifie et permet d'alléger les calculs.

Dans le cas général où $\rho_s \neq \rho_l^{col}$, l'équation (2.74) devient :

$$g_l^{col,prg} = g_l^{col,pr} - V_{germ} \left(1 - \frac{g_{col}^0}{g_{col}} \right) n_{col}^{final} \frac{\rho_s}{\rho_l^{col}} \quad (2.75)$$

Considérant notre hypothèse que l'avancée du front et la germination ne se font pas simultanément, il est intéressant de noter que l'on retrouve exactement les mêmes résultats si l'on fait d'abord l'étape de germination puis l'avancée du front.

Pour la concentration moyenne du liquide :

$$\langle C_l^{col} \rangle^{l,prg} = \frac{\langle C_l^{col} \rangle^{l,pr}}{g_l^{col,prg}} \left[g_l^{col,pr} - V_{germ} \left(1 - \frac{g_{col}^0}{g_{col}} \right) n_{col}^{final} k \right] \quad (2.76)$$

De même pour la concentration moyenne du solide :

$$\langle C_s^{col} \rangle^{s,prg} = \frac{1}{g_s^{col,prg}} \left[g_s^{col,pr} \langle C_s^{col} \rangle^{s,pr} + V_{germ} \left(1 - \frac{g_{col}^0}{g_{col}} \right) n_{col}^{final} k \langle C_l^{col} \rangle^{l,pr} \right] \quad (2.77)$$

Pour la fraction d'enveloppe :

$$g_{env}^{col,prg} = g_{env}^{col,pr} + V_{germ} \left(1 - \frac{g_{col}^0}{g_{col}} \right) n_{col}^{final} \quad (2.78)$$

Le résultat final est schématisé sur la Figure II.3-13.c. Les tailles de sous-structures sont ainsi diminuées par cette étape car une partie de la zone entièrement liquide a été intégrée dans la zone colonnaire. De même la concentration moyenne du liquide $\langle C_l^{col} \rangle^{l,prg}$ est un peu inférieure à sa valeur après transport. En revanche la concentration moyenne $\langle C_l^{tot} \rangle^{l,prg}$ n'a pas été modifiée (sauf de façon marginale par l'apparition des sous-structures). La densité n_{col} reste également inchangée.

○ [Etape de croissance](#)

La prochaine étape sur la Figure II.3-11 est la croissance des structures dans les volumes « mixtes » (volumes du front). Si un volume n'est pas un volume du front (donc si $I_{col} \neq 1$) il sera traité par le modèle microscopique comme pour les structures équiaxes, détaillé dans le chapitre II.2.

En effet, si $I_{col} = 0$ alors le volume est tout liquide donc il n'y pas de croissance proprement dite et le calcul de T est trivial. Si $I_{col} = 2$, le front a dépassé le volume est celui-ci est donc effectivement constitué d'une seule zone entièrement colonnaire. Comme la description de la croissance des grains colonnaires et équiaxes est identique, on peut sans problème utiliser le modèle de croissance original de SOLID.

On verra cependant dans la partie suivante qu'en présence d'équiaxes, cela implique qu'on ne peut alors pas décrire l'évolution des grains équiaxes qui se retrouvent derrière les pointes du front (donc les structures véritablement mixtes).

Le modèle de croissance (voir Figure II.3-12) débute comme dans la cas équiaxe par la détermination des grandeurs microscopiques : les surfaces spécifiques $S_v^{s,col}$ et $S_v^{env,col}$ et les longueurs de diffusion $\delta_s^{i,col}$ et $\delta_l^{env,i,col}$. Ces calculs sont de même nature que pour les structures équiaxe du chapitre II.2 et leur expressions exactes peuvent être trouvées autre part (Bedel M. 2014). Evidemment pour la zone entièrement liquide, aucune grandeur de ce type n'est alors à définir.

Par la suite, on veut décrire la croissance couplée d'une zone colonnaire et d'une zone entièrement liquide. On peut donc déterminer les équations à résoudre pour les bilans microscopiques à l'interface, en parallèle du système d'équations (2.15):

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \Gamma_s^{col} \tilde{C}_l^{i,*col} (1 - k_i) = \rho_l^{col} S_v^{env,col} D_l^i \frac{g_l^{0,col} C_l^{i,*col} - \langle C_l^{i,col} \rangle^l}{g_e^{0,col} \delta_l^{i,env,col}} \\
 \quad + \rho_s S_v^{s,col} D_s^i \frac{k_i C_l^{i,*col} - \langle C_s^{i,col} \rangle^s}{\delta_s^{i,col}} \quad 1 \leq i \leq N_{ele} \\
 dh_{col} = c_p \left(T_f + \sum_{1 \leq i \leq N_{ele}} m_i C_l^{i,*col} - T^0 \right) - \Delta h_f \left(\frac{\Gamma_s^{col}}{\rho_s} dt \right) \\
 dh_{ec} = c_p (T_{ec} - T^0)
 \end{array} \right. \quad (2.79)$$

Les inconnues sont en rouge dans le système (2.79). On a pris avantage ici du fait qu'il n'y a pas de bilans microscopiques à réaliser dans la zone extracolonnaire liquide. De plus, on sait que dans tous les cas $df_s^{col,tr} = 0$ car la structure solide colonnaire est immobile.

Pour le bilan microscopique dans la zone colonnaire, on linéarise le système de manière analogue au système (2.15), en utilisant dans le membre de gauche la valeur à l'itération précédente de la concentration d'équilibre. En parallèle avec la définition de Γ_s^{tot} , Γ_s^{col} est défini par l'équation (2.49) où $\frac{dg_s^{col}}{dt}$ est la variation de fraction volumique de solide dans la zone colonnaire durant un micro-pas de temps.

Le problème alors vient du fait que le système (2.79) n'est pas complet car il y a $N_{ele} + 1$ équations et $N_{ele} + 3$ inconnues. Il faut donc déterminer deux nouvelles équations pour fermer le système.

La première équation de fermeture vient de l'hypothèse que la température est égale dans tout le volume de discrétisation. Le fait que $T_{col} = T_{ec} = T$ permet alors d'écrire :

$$\sum_i m_i C_l^{i,*col} = T_{ec} - T_f \quad (2.80)$$

Comme on ne peut pas définir de concentrations à l'interface solide/liquide C_l^* dans la zone extracolonnaire entièrement liquide, on conserve T_{ec} comme inconnue.

S'inspirant de la définition de h_m^{tot} , on peut également définir pour chaque zone une enthalpie de mélange :

$$h_m^k = c_p (T_f + m_l C_l^{i,*k}) + f_l^k \Delta h_f \quad (2.81)$$

D'après les définitions de f_l^k et f_k ainsi que l'équation (2.80), on vérifie bien :

$$h_m^{tot} = f_{col} h_m^{col} + (1 - f_{col}) h_m^{ec} \quad (2.82)$$

La variation d'enthalpie totale sur un pas de temps, $dh_m^{tot} = h_m^{tot} - h_m^{tot,0}$, est connue car elle est un résultat de la résolution de l'équation de la chaleur. Elle est ensuite répartie de manière égale sur chaque micro-pas de temps. Donc on a :

$$\delta h_m^{tot} = \frac{h_m^{tot} - h_m^{tot,0}}{N_{mic}} = \frac{dh_m^{tot}}{N_{mic}} \quad (2.83)$$

N_{mic} correspond au nombre de micro-pas de temps.

Considérant ce qui précède, on peut écrire $h_m^{tot} - h_m^{tot,0}$ en fonction des variations d'enthalpie dans chaque zone $dh_m^k = h_m^k - h_m^{k,0}$. Il faut prêter attention au fait que $h_m^{k,0}$ est l'enthalpie de la zone k avant propagation donc correspond à une zone d'étendue f_k^0 dans le volume.

On trouve alors :

$$h_m^{tot} - h_m^{tot,0} = f_{col} (h_m^{col} - h_m^{col,0}) + (1 - f_{col}) (h_m^{ec} - h_m^{ec,0}) + (f_{col} - f_{col}^0) (h_m^{col,0} - h_m^{ec,0}) \quad (2.84)$$

En divisant par N_{mic} pour avoir la variation sur un micro-pas de temps, on fait apparaître les variations δh_{mic}^{col} et δh_{mic}^{ec} que l'on cherche. On a défini, comme pour l'équation (2.83): $\delta h_m^k = \frac{dh_m^k}{N_{mic}}$. Puisque l'avancée du front n'est pas couplée à la croissance des structures sur le micro-pas de temps, on va également répartir de manière égale l'avancée du front. On définit ainsi :

$$\delta f_{col} = \frac{f_{col} - f_{col}^0}{N_{mic}} \quad (2.85)$$

Ce qui permet d'écrire :

$$\delta h_m^{tot} = f_{col} \delta h_m^{col} + (1 - f_{col}) \delta h_m^{ec} + \delta f_{col} (h_m^{col,0} - h_m^{ec,0}) \quad (2.86)$$

L'équation (2.86) constitue la dernière équation de fermeture. On peut donc écrire maintenant le système déterminé pour le bilan microscopique :

$$\left\{ \begin{array}{l} \Gamma_s^{col} \tilde{C}_l^{i,*col} (1 - k_i) = \rho_l^{col} S_v^{env,col} D_l^i \frac{g_l^{0,col} C_l^{i,*col} - \langle C_l^{i,col} \rangle^l}{g_e^{0,col} \delta_l^{i,env,col}} \\ \quad + \rho_s S_v^{s,col} D_s^i \frac{k_i C_l^{i,*col} - \langle C_s^{i,col} \rangle^s}{\delta_s^{i,col}} \quad 1 \leq i \leq N_{ele} \\ \delta h_m^{col} = c_p \left(T_f + \sum_{1 \leq i \leq N_{ele}} m_l^i C_l^{i,*col} - T^0 \right) - \Delta h_f \left(\frac{\Gamma_s^{col}}{\rho_s} \delta t \right) \\ \delta h_{mic}^{ec} = c_p (T_{ec} - T^0) \\ \sum_i m_l^i C_l^{i,*col} = T_{ec} - T_f \\ \delta h_m^{tot} = f_{col} \delta h_m^{col} + (1 - f_{col}) \delta h_m^{ec} + \delta f_{col} (h_m^{col,0} - h_m^{ec,0}) \end{array} \right. \quad (2.87)$$

Remarquons que le système reste linéaire donc on peut utiliser la même méthode de résolution numérique que le système d'équations (2.15). On choisit les variables $C_l^{i*,col}$, Γ_s^{col} , h_m^{col} et h_m^{ec} pour tester la convergence du système.

Concernant le bilan macroscopique, il suffit de le résoudre dans la zone colonnaire. A l'instar des deux premières équations du système (2.12), on résout donc :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial g_s^{col}}{\partial t} = \frac{\Gamma_s^{col}}{\rho_s} \\ \frac{\partial \left(\rho_s g_s^{col} \langle C_s^{i,col} \rangle^s \right)}{\partial t} = \Gamma_s^{col} k C_l^{i*,col} + \frac{\rho_s S_v^{s,col} D_s^i}{\delta_s^{i,col}} \left(k C_l^{i*,col} - \langle C_s^{i,col} \rangle^s \right) \\ \frac{\partial \left(\rho_l^{col} g_l^{col} \langle C_l^{i,col} \rangle^l \right)}{\partial t} = -\Gamma_s^{col} C_l^{i*,col} + \frac{\rho_l S_v^{env,col} D_l^i}{\delta_l^{i,env,col}} \frac{g_l^{col}}{g_e^{col}} \left(C_l^{i*,col} - \langle C_l^{i,col} \rangle^l \right) \end{array} \right. \quad (2.88)$$

On teste la convergence des résultats sur $\langle C_s^{i,col} \rangle^s$ et $\langle C_l^{i,col} \rangle^l$.

Une fois que le modèle microscopique de croissance est terminé, on obtient alors la nouvelle température dans chaque volume, donnée par :

$$T = \frac{1}{c_p} \left[h_m^{tot} - \left(1 - f_{col} \left(1 - f_l^{col} \right) \right) \Delta h_f \right] \quad (2.89)$$

Après le modèle de croissance microscopique, on calcule la nouvelle vitesse du front dans le domaine en utilisant le modèle de cinétique de pointes choisi et en utilisant pour le calcul de la surfusion la concentration du liquide devant le front, c'est-à-dire $\langle C_l^{ec} \rangle^l$.

Les résultats du modèle sont schématisés sur la Figure II.3-13.d avec l'indice « cr » pour signifier la fin de la croissance.

o Détermination des grandeurs finales moyennes

La dernière étape du modèle global (cf. Figure II.3-11) consiste à déterminer les valeurs finales moyennes sur l'ensemble du volume. Jusqu'ici nous n'avons pas eu besoin des grandeurs globales pour déterminer la valeur correspondante dans chaque zone. Néanmoins, comme on l'a vu, la séparation des volumes du front en deux zones n'est valable que lors de l'étape de croissance. Il faut donc, à la fin du pas de temps, déterminer les grandeurs sur le volume entier pour qu'elles soient utilisées par le modèle de transport (et dans l'équation de la chaleur) au nouveau pas de temps.

Il s'agit là encore de respecter la conservation de la masse, du soluté, de la fraction d'enveloppe et des densités de sous-structures.

Pour la fraction volumique de liquide :

$$g_l^{tot} = \frac{1}{\rho_l^{tot}} (\rho_l^{col} g_l^{col} g_{col} + \rho_l^{col} (1 - g_{col})) \quad (2.90)$$

De là, on déduit g_s^{tot} , f_l^{tot} et f_s^{tot} .

Pour la concentration moyenne dans le liquide :

$$\langle C_l^{tot} \rangle^l = \frac{1}{\rho_l^{tot} g_l^{tot}} (\rho_l^{col} g_l^{col} g_{col} \langle C_l^{col} \rangle^l + \rho_l^{ec} (1 - g_{col}) \langle C_l^{ec} \rangle^l) \quad (2.91)$$

Pour la concentration moyenne dans le solide :

$$\langle C_s^{tot} \rangle^s = \frac{g_s^{col} g_{col} \langle C_s^{col} \rangle^s}{g_s^{tot}} \quad (2.92)$$

Pour la fraction d'enveloppe :

$$g_{env}^{tot} = g_{env}^{col} g_{col} \quad (2.93)$$

Pour la densité de sous-structures colonnaires :

$$n_{tot} = n_{col}^{final} g_{col} \quad (2.94)$$

La situation finale est illustrée sur la Figure II.3-13.e. En fait on se retrouve dans la situation discutée initialement lorsqu'il n'y a pas de séparation des zones dans le volume du front. Lors du transport, on n'utilise donc pas les informations sur chaque zone que nous avons pu déduire de la position du front dans le volume.

Dans le modèle SOLID, les densités du liquide sont calculées à chaque pas de temps selon l'équation (2.60) après le transport et la croissance. Dans le cadre de notre modèle, on recalcule donc ρ_l^{col} et ρ_l^{eqx} à ce moment. Dès que l'on a besoin de déterminer f_l^k et f_k , on pourra donc se servir de ces densités dans les équations (2.61) et (2.62).

II.3.4 Validation du modèle colonnaire

Afin de tester la capacité du modèle à prédire la croissance d'un front colonnaire, nous allons simuler un cas de solidification unidirectionnelle schématisé sur la Figure II.3-15. Un lingot de 10 cm de long, constitué d'un alliage Al-7%pds Si, est refroidi par le bas (position à 0mm) en utilisant une condition de Fourier. Les autres parois sont adiabatiques.

Les paramètres physiques spécifiques à notre modèle (utilisé ici en 1D) ainsi que les paramètres numériques pour le modèle de cinétique sont regroupés dans le Tableau 6. Les propriétés thermodynamiques de l'alliage sont reportées en Annexe B. En l'absence de données sur les valeurs de λ_1 , on a choisi une valeur suffisamment petite pour permettre au liquide extra-dendritique dans la zone colonnaire de revenir quasi-instantanément à l'équilibre.

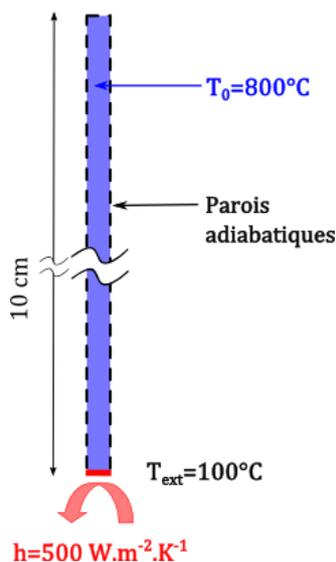


Figure II.3-15 : Schéma des conditions initiales et limites.

Paramètre	Symbole		
Espacement entre bras	λ_1	$5 \cdot 10^{-4}$	m
Germination du colonnaire	ΔT_{col}^{moule}	0	°C
Cinétique de croissance du front	A	$2,9 \cdot 10^{-6}$	$m \cdot s^{-1} \cdot K^{-n}$
$(v_{front} = A \cdot \Delta T^n)$	n	2,7	-

Tableau 6 : Paramètres spécifique au modèle pour le calcul Figure II.3-15.

L'intérêt principal de ce cas test est de reprendre des conditions déjà utilisées avec un véritable modèle de front-tracking en 1D (G. C. Guillemot G. 2004). Ce modèle, établi par Ch-A. Gandin (Gandin Ch.-A 2000), a été utilisé par ailleurs avec succès pour retrouver les températures et les vitesses de front obtenues lors de mesures expérimentales sur des lingots Al-Si. On peut donc le considérer comme un modèle de référence pour cette simulation. Nous reprenons par ailleurs dans SOLID la même cinétique de croissance du front et des enveloppes (cf. Tableau 6). Nous comparons également nos résultats avec des simulations effectuées à l'aide du modèle CAFE (automate cellulaire) qui a été utilisé par la suite pour prédire la TCE (Carazonni T. 2012).

Les Figure II.3-16.a et Figure II.3-16.b présentent l'évolution de la température et de la fraction solide au cours du temps pour des points situés tous les 2 cm le long du lingot. Les courbes rouges correspondent aux résultats de notre modèle. Les courbes grises sont les résultats du modèle de front-tracking. Les courbes noires correspondent au modèle CAFE.

Pour ce calcul, on a utilisé 100 mailles le long du lingot, ce qui correspond au nombre de mailles en éléments finis dans le modèle CAFE, et un pas de temps $\Delta t = 5 \cdot 10^{-3} s$. Le calcul a été effectué en séquentiel sur un processeur Intel Xeon X5550 cadencé à 2,66 GHz pour un temps processeur d'environ 50 min et pour décrire environ 16 minutes de solidification.

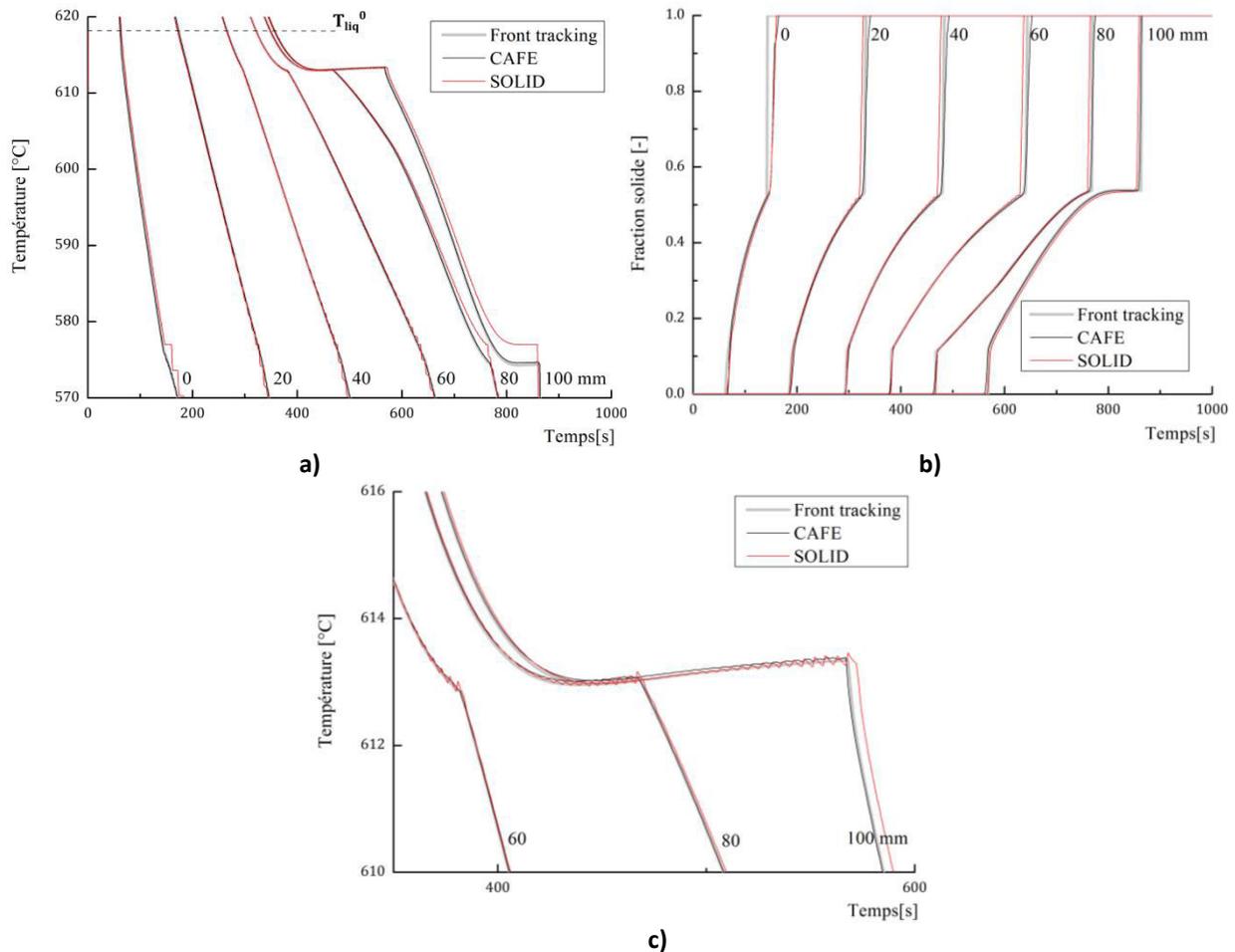


Figure II.3-16 : Courbes représentant l'évolution a) de la température et b) de la fraction solide pour des points situés tous les 2cm en partant du moule (0 mm) jusqu'en haut du domaine (100 mm). Les courbes en c) correspondent à un zoom de la figure a) pour les trois derniers thermocouples.

Les courbes rouges correspondent à notre modèle, les courbes grises au modèle d'automate cellulaire, les courbes noires au résultat « exact » par la méthode de front-tracking. Pour cet alliage, $T_{liq}^0 = 618 \text{ }^\circ\text{C}$.

On remarque que notre modèle permet de retrouver avec une bonne précision les courbes de température et de fraction solide, excepté lors de la fin de solidification (formation de l'eutectique). Notamment le plateau de température (bien visible sur la courbe à 100 mm) traduit la surfusion présente dans le liquide devant le front colonnaire, à une température d'environ $613 \text{ }^\circ\text{C}$, ce qui correspond à une surfusion devant le front de $5 \text{ }^\circ\text{C}$. Sur les courbes de fraction solide, comme on l'avait déjà remarqué lors du cas de solidification rapide au chapitre II.2, on observe alors un saut de fraction solide jusqu'à environ $g_s = 0,12$ au moment où le front arrive.

Bien que peu visibles ici, l'arrivée du front se traduit d'un point de vue numérique par de faibles oscillations non-physiques, de l'ordre de $0,5 \text{ }^\circ\text{C}$ en amplitude. On peut constater ces oscillations sur la Figure II.3-16.c qui représente une zone plus précise vers le haut du lingot. Ces oscillations apparaissent lors de la solidification primaire et sont dues à l'imprécision sur la détermination de $\frac{dT}{dh}$. Le pas de temps joue un rôle négligeable dans la suppression de ces oscillations. Ceci peut s'expliquer en considérant la valeur du résidu ε_T utilisée pour la température et l'enthalpie dans le cadre de notre modèle :

$$\varepsilon_T = \text{MAX} \left[\text{MAX}_i \left(\frac{T - \tilde{T}}{T} \right), \text{MAX}_i \left(\frac{h_m - \tilde{h}_m}{h_m} \right) \right] \quad (2.95)$$

Le critère de convergence choisi, $\varepsilon_T < 10^{-4}$, est suffisamment sévère pour assurer une bonne précision. Le seul moyen d'éliminer virtuellement les oscillations est alors de réduire la taille de maille. La Figure II.3-16.c confirme que l'amplitude des oscillations est faible et donc on ne s'est pas intéressé plus en détails à l'origine de ces oscillations.

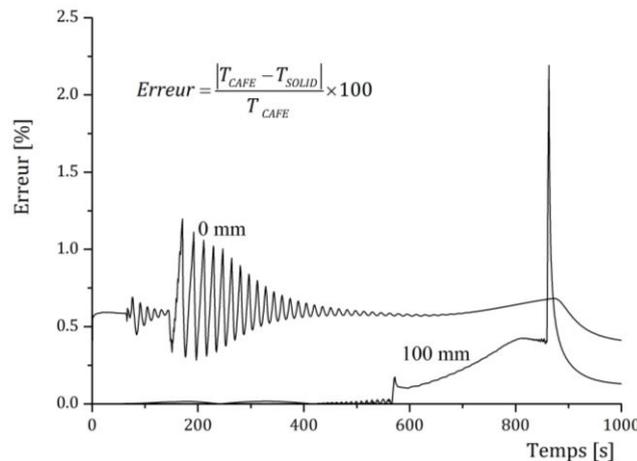


Figure II.3-17 Erreur relative au cours du temps entre les résultats en température du modèle CAFE et de notre modèle SOLID. Seules les courbes pour les thermocouples à 0 mm et 100 mm sont reportées car c'est là qu'on observe les erreurs maximales.

Les différences les plus importantes se trouvent à la fin de la solidification, lorsque $T < T_{eut}$. On constate sur la Figure II.3-16.a pour la courbe à 100 mm que le modèle SOLID prévoit un plateau de température exactement à $T = T_{eut}$, environ 3°C au-dessus des valeurs prédites par les deux autres modèles. Ces écarts proviennent directement du fait que les modèles front-tracking et CAFE prennent en compte une surfusion de croissance pour les structures eutectiques en les modélisant directement par une cinétique de croissance similaire à celle rapportée dans le Tableau 6 pour les structures dendritiques. SOLID ne prend pas en compte cela et considère une solidification isotherme complète à $T = T_{eut}$. La différence de l'ordre de 3-4°C correspond donc à la surfusion de croissance des phases eutectiques et il s'agit d'une limite physique de notre modèle. Cela explique également qu'à mesure que l'on se rapproche du haut du lingot, on observe un décalage progressif des courbes de notre modèle vers des températures plus élevées. Ainsi, même avant l'eutectique on peut observer une différence d'environ 2°C visible sur la courbe à 100 mm.

Pour confirmer que les erreurs relatives sont faibles par rapport aux deux autres modèles, on a reporté en Figure II.3-17 l'erreur relative entre les résultats du modèle CAFE et notre modèle (SOLID). Les erreurs au cours du temps pour le premier thermocouple (0 mm) et le dernier (100 mm) sont tracées car c'est à ces positions qu'elles sont maximales. On constate que les erreurs sont de l'ordre de 1% durant la plupart de la solidification avec un pic (et des oscillations pour la position 0 mm) qui correspond à la solidification eutectique. Ces oscillations n'existent pas dans le cas d'un suivi direct du front de croissance eutectique.

Une autre série d'oscillations de température, en forme d'escalier, est associée à cette nécessité d'imposer $T = T_{eut}$ dans chaque maille jusqu'à ce que $g_s = 1$. Comme précédemment, on peut réduire ces oscillations en diminuant la taille des mailles.

Tableau 7 : Déviations absolues des courbes de températures entre le modèle SOLID et les résultats FT. Les paramètres numériques choisis sont : Le nombre de mailles sur la hauteur du lingot N_{maille} , le pas de temps macro Δt , le nombre de micro-pas de temps N_{micro} et le critère de convergence ε_T . Les résultats sont donnés sous forme de déviation maximale $|\Delta T|_{max}$, d'écart type $|\Delta T|_\sigma$, d'écart moyen $|\Delta T|_a$ et de temps d'utilisation du CPU.

Cas	Référence	1	2	3	4	5	6
$N_{maille} (-)$	50	100	20	50	50	50	50
$\Delta t (s)$	10^{-2}	10^{-2}	10^{-2}	10^{-2}	10^{-3}	10^{-2}	10^{-2}
N_{micro}	5	5	5	1	5	5	5
Critère $\varepsilon_T (-)$	10^{-4}	10^{-4}	10^{-4}	10^{-4}	10^{-4}	10^{-6}	1
Résultats							
$ \Delta T _a (^\circ C)$	0,3294	0,3279	0,4476	0,3303	0,3290	0,3291	0,3367
$ \Delta T _\sigma (^\circ C)$	0,4362	0,4266	0,6183	0,4372	0,4358	0,4359	0,4424
$ \Delta T _{max} (^\circ C)$	2,197	2,216	4,179	2,197	2,193	2,193	2,200
temps CPU	10min51s	14min06s	8min57s	10min10s	1h11min	27min53s	10min16s

Une étude de l'influence des principaux paramètres numériques de la simulation est reportée en Tableau 7. Pour ce faire, on a calculé sur l'ensemble des courbes de température présentées en Figure II.3-16 la différence ΔT entre les modèles SOLID et front-tracking (FT). Considérant l'ensemble des valeurs absolues, on reporte le maximum $|\Delta T|_{max}$ ainsi que l'écart-type $|\Delta T|_\sigma$. On calcule également l'écart moyen $|\Delta T|_a$ défini par :

$$|\Delta T|_a = \frac{1}{N_{maille}} \sum_{i=1}^{N_{maille}} \left| |\Delta T|_i - \overline{|\Delta T|} \right| \quad \text{si } T \geq T_{eut} \quad (2.96)$$

Pour le calcul de référence, on choisit un cas avec seulement 50 mailles dans la longueur du lingot afin d'étudier l'influence du maillage. Puisque dans tous les cas on peut s'attendre à l'écart le plus important à l'eutectique, il est difficile de voir une différence entre les calculs si on considère l'ensemble de la solidification. On se limite donc ici seulement aux cas où $T > T_{eut}$ afin de prendre

en compte uniquement les différences durant la phase de croissance primaire pour le calcul de $|\Delta T|_{max}$, $|\Delta T|_{\sigma}$, $|\Delta T|_a$.

On peut noter tout d'abord qu'en dépit du maillage suffisamment grossier de 50 mailles choisi pour le calcul de référence, une précision suffisante dans le cadre de notre modèle est atteinte. En fait, à part le cas où seulement 20 mailles sont utilisées, on remarque des variations entre les calculs qui restent marginales.

En choisissant un maillage plus fin ($N_{maille} = 100$), l'amélioration des résultats n'est pas visible ici même si comme on l'a remarqué on diminue les oscillations associées au passage du front. Par contre, on obtient même une erreur maximale un peu plus grande que le cas de référence, qui survient juste avant l'eutectique.

La réduction du pas de temps ($\Delta t = 10^{-3}$ s) ainsi que l'utilisation d'un critère de convergence plus stricte ($\varepsilon_T < 10^{-6}$) n'entraînent que des gains faibles sur la précision, au prix d'un coût de calcul nettement plus important. La diminution du nombre de micro-pas de temps ($N_{micro} = 1$) n'a quasiment pas d'effet.

Le cas 6, où une seule itération est effectuée sur la thermique, confirme que le critère de convergence n'est pas le facteur déterminant pour la précision du calcul, les déviations restant proches de la référence.

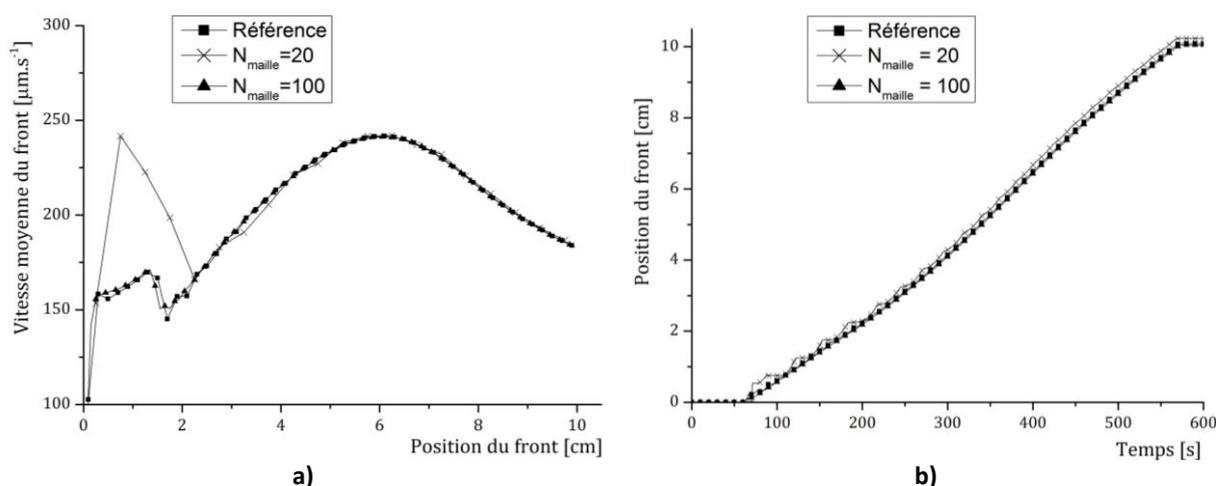


Figure II.3-18 a) Vitesse moyenne du front en fonction de sa position dans le système pour les différents maillages. Les courbes pour les autres paramètres sont confondues avec la référence.

b) Position du front dans le système au cours du temps pour les différents maillages. Là encore, les autres courbes sont confondues avec la référence.

Afin de compléter cette étude paramétrique, on a tracé en Figure II.3-18.a la vitesse de passage du front colonnaire en fonction de sa position dans le lingot pour les différents calculs. Les courbes sont alors confondues, excepté celles pour les différentes valeurs du nombre de maille, on a donc uniquement représenté ces courbes-ci. On remarque que la différence est particulièrement flagrante pour $N_{maille} = 20$ en bas du lingot. La différence de vitesse visible comme un pic pour $N_{maille} = 20$ provient de l'erreur réalisée sur la surfusion prédite devant le front et est une conséquence des erreurs importantes réalisées sur la température avec des mailles de 5 mm. Par ailleurs, si les volumes devant le front sont encore en surchauffe, le front ne pourra se propager tant qu'il n'y pas de surfusion positive dans ces mailles. Ainsi, sur la Figure II.3-18.b, on a tracé la position du front en fonction du temps pour les mêmes cas. Pour $N_{maille} = 20$, on remarque des plateaux

dans la position du front. Ces plateaux correspondent aux endroits où le front colonnaire a dépassé une maille mais ne peut se propager dans la suivante car l'absence de surfusion l'interdit. Néanmoins on remarque que l'erreur réalisée sur la position du front colonnaire est globalement faible. Comme dans le cas de la Figure II.3-18.a, les courbes pour les autres valeurs des paramètres sont confondues, on a donc décidé de ne pas les représenter sur la Figure II.3-18.b .

Par ailleurs, on rappelle que le maximum de la vitesse de croissance du front observée en Figure II.3-18.a a été corrélé à la position de la TCE (Gandin Ch.-A 2000). Nous y reviendrons plus en détail dans le chapitre suivant.

III. Modélisation de la solidification mixte colonnaire-équiaxe et prédiction de la TCE et de la TEC

Après avoir exposé en détail le modèle proposé pour la solidification colonnaire dans le chapitre II, on va présenter désormais le modèle en incluant cette fois la croissance des grains équiaxes couplée à celle des structures colonnaires. Le principe restant identique, on insistera surtout sur les différences et les hypothèses supplémentaires que nous serons amenés à faire.

III.1. Présentation du modèle

III.1.1 Modélisation des structures mixtes

La situation pour un volume du front contenant à la fois des structures équiaxes et colonnaires est rappelée sur les Figure III.1-1.a et Figure III.1-1.b, avant et après prise de moyenne respectivement. Sur la Figure III.1-1.a on a représenté en bleu et en transparence les grains équiaxes qui sont incorporés au front lors de son avancée (tant que celui-ci n'est pas bloqué). Ceci donne lieu à des structures « mixtes » de grains équiaxes piégés entre les bras colonnaires. De telles structures sont particulièrement visibles sur des coulées où la TCE se fait de manière graduelle, par exemple des alliages inoculés (Vandyoussefi M. 2002) . Par ailleurs, on trouve la plupart du temps dans les coulées non-inoculées une transition brusque, qui peut être la conséquence de phénomènes tels que la fragmentation ou la déstabilisation du front (Gandin Ch.-A 2000).

En parallèle de la présentation du modèle au chapitre II.3, on justifie la nécessité de distinguer deux zones dans le VER (colonnaire et équiaxe) et deux liquides extragranulaires par l'existence de gradients élevés de la concentration du liquide autour de la position du front colonnaire. L'analyse en ordre de grandeur réalisée au chapitre II est toujours valable en présence d'une population de grains équiaxes devant le front, on ne la répète donc pas ici. En conséquence, on distingue en tout six « phases » dans le cadre de notre modèle : le solide et les liquides intra- et extragranulaires pour chacune des deux structures colonnaires et équiaxes.

Sur la Figure III.1-1.b, après prise de moyenne, la connaissance de la position du front (ligne bleue) puis la croissance mixte des deux zones permettent de déduire les grandeurs moyennes colonnaires et équiaxes (sur la figure les concentrations sont schématisées à titre d'exemple). Comme précédemment, on suppose l'égalité des températures des deux zones ce qui justifie qu'on ait pris $C_l^{*,col} = C_l^{*,eqx}$ sur la Figure III.1-1.b. Remarquons que l'égalité $T_{col} = T_{eqx}$ implique l'égalité des concentrations d'équilibre $C_l^{*,k}$ uniquement dans le cas d'un alliage binaire.

Par ailleurs, on peut déjà noter (cf. Figure III.1-1.a) que les grains équiaxes en arrière du front (en transparence en bleu) seront intégrés à la zone colonnaire lors de la prise de moyenne. Ces grains équiaxes sont donc considérés comme faisant partie des sous-structures colonnaires et les grandeurs notées « col » sur la Figure III.1-1.b représentent en fait un résultat mixte entre structures colonnaires et grains équiaxes en arrière du front. On ne modélise donc pas l'évolution des structures véritablement mixtes.

Ceci peut être justifié par le fait que le liquide extracolonnaire retourne rapidement à l'équilibre et donc les grains équiaxes derrière le front voient leur croissance bloquée solutalement (Nguyen-Thi H. 2007).

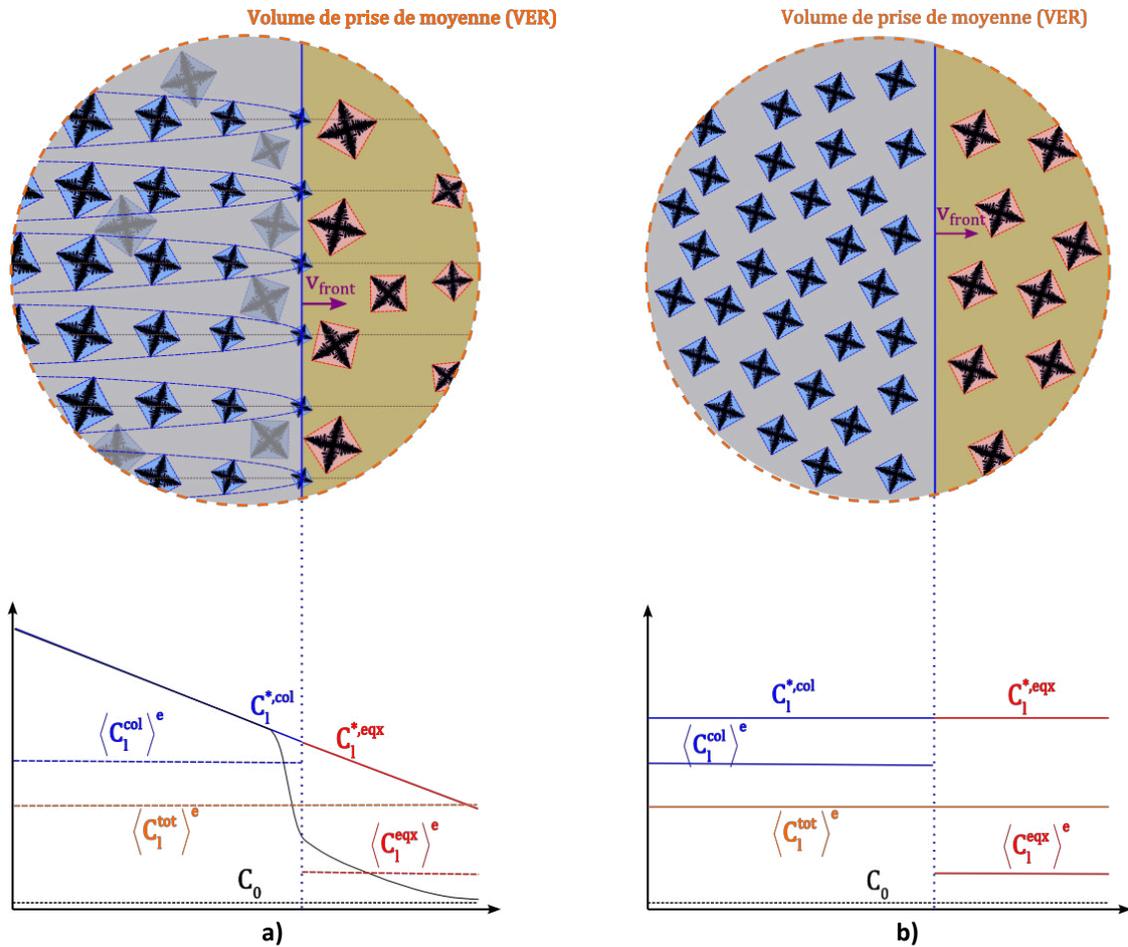


Figure III.1-1 : Schémas d'un volume contenant le front. Les concentrations moyennes pour la zone équiaxe sont en rouge, en bleu pour la zone colonnaire et en orange pour le volume total. a) Avant prise de moyenne. Le profil de soluté dans la direction de croissance entre deux bras colonnaires est en noir. Les concentrations moyennes sont en pointillés. b) Après prise de moyenne. Les concentrations dans chaque zone seront calculées par notre modèle. Les grains équiaxes qui se retrouvent dans la zone colonnaire sont intégrés à celle-ci.

Comme dans le cas des structures purement colonnaire du chapitre précédent, on va exposer ici les hypothèses simplificatrices et les équations principales du modèle. On notera k en indice pour indiquer les zones colonnaire, équiaxe ou le volume total, soit $k \in [col, eqx, tot]$.

Notre modèle considère donc six « phases » dans les volumes du front. Comme précédemment, en faisant l'hypothèse que $\langle C_i^k \rangle^d = C_i^{*,k}$, on peut détailler le modèle en utilisant les phases liquides comme l'union des liquides intra- et extragranulaire de chaque zone, sachant que :

$$g_i^k \langle C_i^{k,l} \rangle^l = g_e^k \langle C_i^{k,e} \rangle^e + g_d^k C_i^{*,k} \quad (3.1)$$

Si l'on s'intéresse désormais à la modélisation du transport dans les volumes « mixtes » (les volumes du front), la différence principale avec le chapitre précédent concerne la possibilité pour les

grains équiaxes situés devant le front de se mouvoir avec le liquide (s'ils n'ont pas atteint leur fraction de cohérence g_{env}^{bloc}), c'est-à-dire : $\langle \overline{v_s^{eqx}} \rangle^s \neq \vec{0}$.

La partie bibliographique nous a permis de constater qu'il n'existe pas de modèle détaillé d'interaction entre des bras colonnaires fixes et des grains équiaxes en mouvement dans le cadre des modèles à prise de moyenne.

A. Ludwig *et coll.* (L. A. Wu M. 2007) prennent en compte le mouvement du solide dans les volumes mixtes en considérant les structures colonnaires comme une zone poreuse (modélisée par un terme déduit de la loi de Darcy, de manière similaire aux zones de grains équiaxes bloquées) et les grains équiaxes comme libres.

Dès que la fraction d'enveloppes colonnaires dans le volume total $g_{col} \cdot g_{env}^{col}$ dépasse une valeur limite g_{free} , les grains équiaxes sont supposés alors complètement immobiles et l'ensemble du VER devient une zone poreuse. La valeur choisie par les auteurs ($g_{env}^{free} = 0,2$) n'est cependant pas justifiée et devient un paramètre du modèle.

Dans le cadre de notre modèle on va faire une hypothèse plus simple, à savoir que l'on va considérer la vitesse du solide comme nulle dans tout le volume mixte. Donc dans ces VER, les structures colonnaires et équiaxes ne bougent pas. Par conséquent, on suppose :

$$\langle \overline{v_s^{col}} \rangle^s = \langle \overline{v_s^{eqx}} \rangle^s = \vec{0} \quad (3.2)$$

Cette hypothèse est bien sûr vérifiée pour les structures colonnaires (en coulée statique). Afin de simplifier le traitement du transport dans le cadre de notre modèle, on va donc supposer que l'ensemble du VER contenant le front, y compris les grains équiaxes, forme une zone poreuse (comme une zone de grains équiaxes bloqués).

Par ailleurs, on suppose également que la vitesse du liquide dans les zones équiaxe et colonnaire du VER sont identiques. On vérifie donc :

$$\langle \overline{v_l^{col}} \rangle^l = \langle \overline{v_l^{eqx}} \rangle^l = \langle \overline{v_l} \rangle^l \quad (3.3)$$

De cette façon, on ne modifie pas la modélisation de la quantité de mouvement dans les volumes du front.

En considérant ces hypothèses, on peut désormais écrire les équations de conservation de la masse :

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \frac{\partial(\rho_s g_{col} g_s^{col})}{\partial t} = g_{col} \Gamma_s^{col} + \Phi_s^{col} + \frac{\partial(\rho_s g_{col})}{\partial t} g_s^{eqx} \\
 \frac{\partial(\rho_l g_{col} g_l^{col})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l g_{col} g_l^{col} \langle \vec{v}_l \rangle^l) = -g_{col} \Gamma_s^{col} - \Phi_s^{col} + \frac{\partial(\rho_l g_{col})}{\partial t} g_l^{eqx} \\
 \frac{\partial(\rho_s g_{eqx} g_s^{eqx})}{\partial t} = g_{eqx} \Gamma_s^{eqx} + \Phi_s^{eqx} - \frac{\partial(\rho_s g_{col})}{\partial t} g_s^{eqx} \\
 \frac{\partial(\rho_l g_{eqx} g_l^{eqx})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l g_{eqx} g_l^{eqx} \langle \vec{v}_l \rangle^l) = -g_{eqx} \Gamma_s^{eqx} - \Phi_s^{eqx} - \frac{\partial(\rho_l g_{col})}{\partial t} g_l^{eqx}
 \end{array} \right. \quad (3.4)$$

Les équations de conservation du soluté dans le cas d'un alliage binaire (pour un alliage multiconstitué on résout ces équations pour chaque élément i) :

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \frac{\partial(\rho_s g_{col} g_s^{col} \langle C_s^{col} \rangle^s)}{\partial t} = g_{col} \Gamma_s^{col} C_s^{*,col} + \rho_s S_v^{s,col} D_s g_{col} \frac{k C_l^{*,col} - \langle C_s^{col} \rangle^s}{\delta_s^{col}} \\
 \quad + \Phi_s^{col} k \langle C_l^{col} \rangle^l + \frac{\partial(\rho_s g_{col})}{\partial t} g_s^{eqx} \langle C_s^{eqx} \rangle^s \\
 \frac{\partial(\rho_l g_{col} g_l^{col} \langle C_l^{col} \rangle^l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l g_{col} g_l^{col} \langle C_l^{col} \rangle^l \langle \vec{v}_l \rangle^l) = -g_{col} \Gamma_s^{col} C_s^{*,col} - \Phi_s^{col} k \langle C_l^{col} \rangle^l \\
 \quad + \rho_l S_v^{env,col} D_l \frac{g_l^{col}}{g_e^{col}} g_{col} \frac{C_l^{*,col} - \langle C_l^{col} \rangle^l}{\delta_l^{env,col}} + \frac{\partial(\rho_l g_{col})}{\partial t} g_l^{eqx} \langle C_l^{eqx} \rangle^l \\
 \frac{\partial(\rho_s g_{eqx} g_s^{eqx} \langle C_s^{eqx} \rangle^s)}{\partial t} = g_{eqx} \Gamma_s^{eqx} C_s^{*,eqx} + \rho_s S_v^{s,eqx} D_s g_{eqx} \frac{k C_l^{*,eqx} - \langle C_s^{eqx} \rangle^s}{\delta_s^{eqx}} \\
 \quad + \Phi_s^{eqx} k \langle C_l^{eqx} \rangle^l - \frac{\partial(\rho_s g_{col})}{\partial t} g_s^{eqx} \langle C_s^{eqx} \rangle^s \\
 \frac{\partial(\rho_l g_{eqx} g_l^{eqx} \langle C_l^{eqx} \rangle^l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l g_{eqx} g_l^{eqx} \langle C_l^{eqx} \rangle^l \langle \vec{v}_l \rangle^l) = -g_{eqx} \Gamma_s^{eqx} C_s^{*,eqx} - \Phi_s^{eqx} k \langle C_l^{eqx} \rangle^l \\
 \quad + \rho_l S_v^{env,eqx} D_l \frac{g_l^{eqx}}{g_e^{eqx}} g_{eqx} \frac{C_l^{*,eqx} - \langle C_l^{eqx} \rangle^l}{\delta_l^{env,eqx}} - \frac{\partial(\rho_l g_{col})}{\partial t} g_l^{eqx} \langle C_l^{eqx} \rangle^l
 \end{array} \right. \quad (3.5)$$

Comme dans le chapitre II.3, les termes en bleu correspondent aux variations dues au transport, en marron correspondent à la croissance et à la germination et en vert correspondent à la redistribution des grandeurs dans chaque zone à la suite de l'avancée du front.

Γ_s^k est défini par l'équation (2.49), Φ_s^{col} est définie en (2.50) et Φ_s^{eqx} est calculé en multipliant l'équation 2.10 par la fraction de zone équiaxe g_{eqx} .

L'avancée du front et le calcul de g_{col} se fait par la relation 2.48 où pour calculer V_{front} on utilise $\Delta T_{front} = T_f + m_l \langle C_l^{eqx} \rangle^l - T$.

On doit également résoudre le bilan microscopique à l'interface solide/liquide dans les zones colonnaire et équiaxe, c'est-à-dire :

$$\Gamma_s^k (C_l^{*,k} - C_s^{*,k}) = \frac{\rho_s S_v^{s,k} D_s}{\delta_s} (C_s^{*,k} - \langle C_s^k \rangle^s) + \frac{\rho_l S_v^{env,k} D_l}{\delta_l^{env,k}} \frac{g_l^k}{g_e^k} (C_l^{*,k} - \langle C_l^k \rangle^l) \quad k \in [col, eqx] \quad (3.6)$$

Considérant l'hypothèse (3.2) et (3.3) et le fait que l'on ne considère pas de pénétration dans les zones poreuses, on s'est assuré que le transport du solide dans le système n'a pas d'influence dans les VER mixtes. Ainsi, la situation est identique au chapitre II.3 et seul le transport du soluté doit être considéré dans les zones équiaxes et colonnaires $\langle C_l^{col} \rangle^l$ et $\langle C_l^{eqx} \rangle^l$.

Afin de déterminer le transport de ces deux solutés, on réitère donc les hypothèses et le raisonnement développé au chapitre II.3 et on va supposer :

$$\left[\frac{\partial (\rho_l^{col} \langle C_l^{col} \rangle^l)}{\partial t} \right]_{tr} = \left[\frac{\partial (\rho_l^{eqx} \langle C_l^{eqx} \rangle^l)}{\partial t} \right]_{tr} \quad (3.7)$$

Par ailleurs, la conservation du soluté dans le liquide avant et après transport donne :

$$g_l^{tot} \langle C_l^{tot} \rangle^l = g_l^{col} g_{col} \langle C_l^{col} \rangle^l + g_l^{eqx} (1 - g_{col}) \langle C_l^{eqx} \rangle^l \quad (3.8)$$

Les relations (3.7) et (3.8) permettent alors de fermer notre modélisation des volumes mixtes.

En notant $\rho_m h_m^k = \rho_s g_s^k h_s + \rho_l g_l^k h_l$, on peut réécrire l'équation de la chaleur 2.55 comme suit :

$$\frac{\partial (\rho_m f_{col} h_m^{col} + \rho_m f_{eqx} h_m^{eqx})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l (f_{col} f_l^{col} + f_{eqx} f_l^{eqx}) h_l \langle \vec{v}_l \rangle) = \nabla \cdot (\lambda_m \vec{\nabla}(T)) \quad (3.9)$$

On définit ainsi les enthalpies de mélange h_m^k dans les zones colonnaire et équiaxe, dont la définition est copiée sur celle de l'enthalpie de mélange totale et on vérifie que :

$$h_m^{tot} = f_{col} \cdot h_m^{col} + f_{eqx} \cdot h_m^{eqx}$$

L'égalité des températures $T_{col} = T_{eqx} = T$ dans le VER entraîne l'égalité des concentrations à l'équilibre $C_l^{*,k}$ dans le cas d'un alliage binaire mais dans le cas général d'un alliage multiconstitué, on doit alors écrire :

$$\sum_{1 \leq j \leq N_{ele}} m_j^i C_l^{i,*,col} = \sum_{1 \leq j \leq N_{ele}} m_j^i C_l^{i,*,eqx} \quad (3.10)$$

Les équations de conservation de la densité de sous-structures colonnaires ou des grains équiaxes s'écrivent :

$$\begin{cases} \frac{\partial (g_{col} n_{col})}{\partial t} = \frac{\Phi_s^{col}}{V_{germ}} + n_{eqx} \frac{\partial g_{col}}{\partial t} \\ \frac{\partial (g_{eqx} n_{eqx})}{\partial t} = \frac{\Phi_s^{eqx}}{V_{germ}} - n_{eqx} \frac{\partial g_{col}}{\partial t} \end{cases} \quad (3.11)$$

Enfin, l'équation de conservation des fractions d'enveloppes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial (g_{col} g_{env}^{col})}{\partial t} = g_{col} \Gamma_{env}^{col} + \Phi_s^{col} + g_{env}^{eqx} \frac{\partial g_{col}}{\partial t} \\ \frac{\partial (g_{eqx} g_{env}^{eqx})}{\partial t} = g_{eqx} \Gamma_{env}^{eqx} + \Phi_s^{eqx} - g_{env}^{eqx} \frac{\partial g_{col}}{\partial t} \end{array} \right. \quad (3.12)$$

Où $\Gamma_{env}^k = S_v^{env,k} \frac{v_{tip}^k}{\sqrt{3}}$, le calcul de v_{tip}^k étant basé sur la concentration $\langle C_l^k \rangle^e$.

Les équations (2.58) et (3.12) illustrent notre hypothèse que les grains équiaxes sont mélangés à la zone colonnaire derrière le front. La croissance de ces grains (en bleu et en transparence sur la Figure III.1-1.a) est donc considérée comme faisant partie du colonnaire et les grains intégrés à la zone colonnaire sont donc traités par la suite comme de nouvelles sous-structures colonnaires. Par la suite, dans les volumes situés derrière le front et comme dans le chapitre II.3, on ne distingue plus deux zones colonnaire et équiaxe puisque l'ensemble du VER peut être considéré comme une seule zone colonnaire. Le VER n'est donc plus considéré comme « mixte » et peut être décrit par le modèle de croissance du chapitre II.2

Les densités de liquides et les fractions massiques de phases et de zone sont toujours calculées par les relations 2.60 à 2.62.

III.1.2 Modélisation des transitions de structures et de la fragmentation

La première transition de structures que l'on modélise est la TCE. Le premier mécanisme de blocage du front dont on a parlé précédemment (cf. Chapitre II.3.3.a) est le blocage solutal. Ce mécanisme est pris en compte de manière intrinsèque dans notre modèle lors du rejet de soluté dans le liquide extragranulaire par les grains équiaxes devant le front (B. C. Martorano M.A 2003).

On prend en compte également le blocage mécanique du front (tel qu'initialement proposée par Hunt (Hunt J.D 1984)). Dès que la fraction de grains équiaxes g_{env}^{eqx} est supérieure à une fraction limite appelée ici g_{Hunt} (choisie à $g_{Hunt} = 0,5$) on va bloquer le front et donc fixer V_{front} à 0. g_{env}^{eqx} correspond à la fraction d'enveloppe dans la zone équiaxe.

Une fois que le front est bloqué, il n'y a plus vraiment lieu de distinguer les structures mixtes car on est sûr que le front ne pourra plus traverser le VER. En conséquence, après le blocage mécanique du front dans le VER on va considérer le volume comme une zone poreuse qui n'est plus mixte, similairement aux volumes situés derrière le front ou aux zones de grains équiaxes bloqués, quand $g_{env} > g_{env}^{bloc}$. Ici g_{env}^{bloc} correspond à la fraction locale limite de grains équiaxes au-delà de laquelle, on considère les grains comme bloqués et on décrit alors l'écoulement par un modèle de Darcy (cf. Annexe A).

Dans les lingots d'acier industriels, on observe parfois une transition inverse depuis une zone de dendrites sans orientation particulière vers une zone clairement orientée, particulièrement vers

les parties hautes des lingots (D. J. Kumar A. 2012). On parle alors de Transition Equiaxe-Colonnaire (TEC). L'origine de cette transition n'a pas été encore clairement établie mais un mécanisme possible est que ces structures orientées proviennent de la croissance de bras dendritiques depuis une zone de grains équiaxes bloqués. Ces bras croissent et s'orientent dans la direction du gradient thermique dans un liquide où la présence de grains et de germes équiaxes est négligeable, c'est-à-dire dans une zone où les mécanismes comme la germination hétérogène et la fragmentation ne sont pas opérants (K. A. Combeau H. 2012). En conséquence ce phénomène peut être appelé Transition Equiaxe-Colonnaire (TEC) mais est différent de la compétition initiale de structures que l'on trouve dans la zone de peau des coulées.

Un exemple qui pourrait indiquer la présence de la TEC que l'on cherche à modéliser se trouve en Figure III.1-2.a qui représente une coupe macrographique en haut d'un lingot d'acier de 6,2 tonnes. On peut voir qu'il y a d'abord vers le moule une zone de structures sans orientation particulière (en rouge). Depuis cette zone, on voit partir assez brutalement une zone clairement orientée donc colonnaire (en bleu).

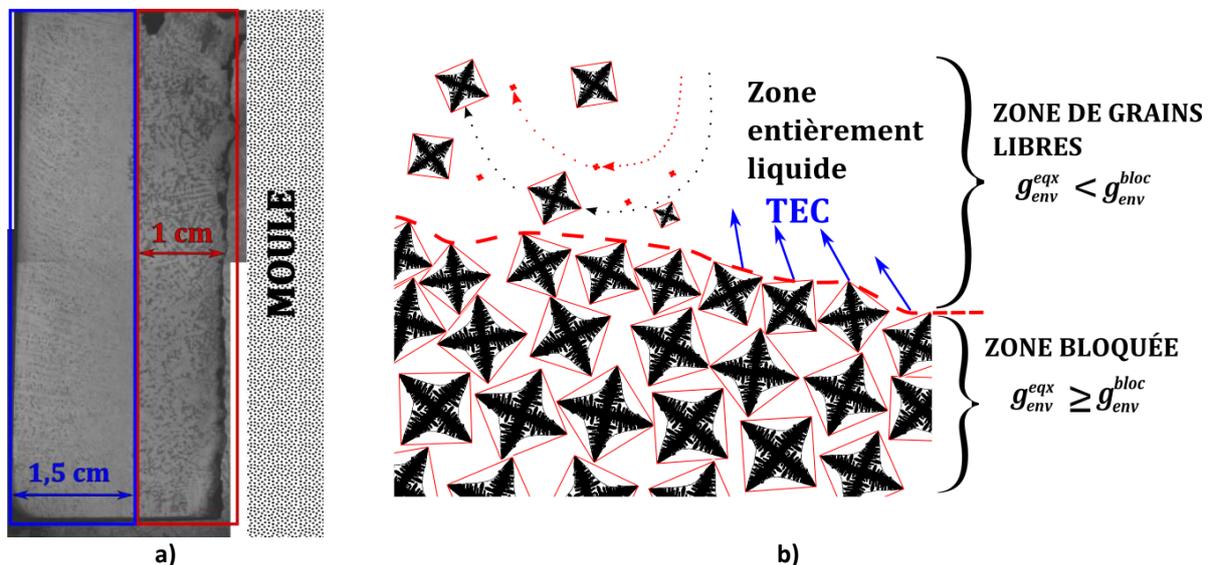


Figure III.1-2 a) Macrographie montrant une Transition Equiaxe-Colonnaire dans un lingot d'acier 100C6 de 6,2 tonnes avec masselotte isothermique, coulé par Ascométal. Cette zone se trouve tout en haut du lingot de 2,67m de haut et au contact du moule b) Modélisation de la TEC : le départ des nouvelles structures colonnaires a lieu si la zone est entièrement liquide et vide de germes.

Cette transition brusque de l'orientation des structures semble indiquer une TEC telle qu'on l'a définie. Il n'est par contre pas clair si la zone en rouge était dès le départ une zone équiaxe sans orientation particulière ou s'il s'agissait initialement d'une zone colonnaire qui, après refusion du tissu dendritique, est devenue désorientée à ce moment.

Dans tous les cas, ces observations nous ont amenées à proposer une modèle simplifié de prise en compte de la TEC qui est résumé sur la Figure III.1-2.b. On considère alors la TEC possible depuis une zone de grains équiaxes bloqués (donc où $g_{env}^{eqx} \geq g_{env}^{bloc}$). On vérifie alors si l'on peut trouver à côté de cette zone de grains fixes une zone entièrement liquide où il n'y a ni structures colonnaires, ni grains, ni germes équiaxes.

Si c'est le cas, comme à droite de la Figure III.1-2.b, alors on fait repartir des structures colonnaires depuis la zone de grains bloqués dans la zone entièrement liquide. On modélise alors les nouvelles

structures colonnaires exactement de la même manière que celles que l'on fait apparaître initialement au contact du moule.

Pour finir la présentation de notre modèle, on va présenter la modélisation de la fragmentation, qui conditionne l'apparition de nouveaux grains équiaxes à la présence de structures colonnaires, contrairement au mécanisme de germination hétérogène.

On a vu dans la partie bibliographique que la fragmentation du tissu dendritique colonnaire est un phénomène complexe et encore mal compris mais qui pourtant semble une source importante de grains dans les coulées industrielles, particulièrement si elles ne sont pas inoculées.

On choisit donc là encore une façon simplifiée de représenter ce phénomène, illustré en Figure III.1-3. En rouge et en transparence, on a schématisé les fragments qui se forment dans la zone pâteuse colonnaire et qui sont par la suite éventuellement entraînés par la convection dans le liquide devant les pointes colonnaires. On ne considère pas cette dynamique dans le cadre de notre modèle et on choisit simplement d'imposer un flux surfacique de grains équiaxes qui sera injecté dans le liquide devant le front. Ce flux surfacique ϕ_{frag} [grains.m⁻².s⁻¹] ne sera pas considéré dans le volume mixte lui-même car l'hypothèse (3.2) impliquerait que ces nouveaux grains seraient automatiquement bloqués. On va plutôt choisir de considérer cette nouvelle source de grains dans les volumes voisins du front où il n'y a pas de structures colonnaires et où les grains équiaxes sont encore libres. On a ainsi défini le calcul des flux ϕ_{frag}^i dans la relation 2.8 et on peut ainsi compléter le bilan de population de grains équiaxes de l'équation 2.6.

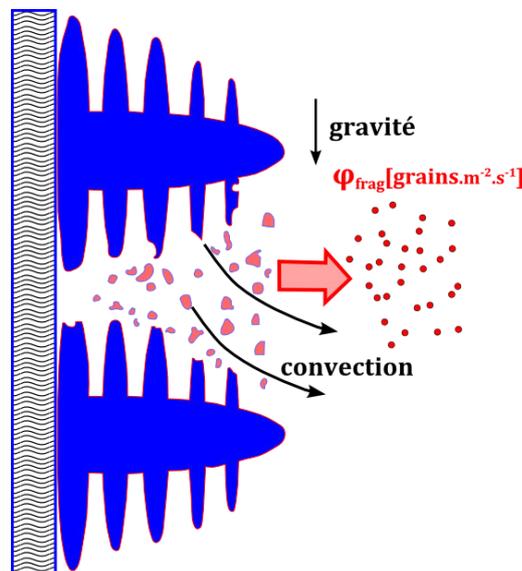


Figure III.1-3 Modélisation de la fragmentation dans la zone pâteuse colonnaire comme un flux surfacique de grains, injectés dans le liquide devant le front.

Comme la quantification du nombre de fragments créés dépend de nombreux paramètres et n'a pas fait l'objet dans la littérature de quantification dans des coulées industrielles, on imposera généralement ϕ_{frag} constant.

Concernant la taille initiale des fragments, on fait également l'hypothèse que leur taille initiale est celle d'un germe équiaxe soit $V_{germ} = \frac{4}{3}\pi R_{germ}^3$ où $R_{germ} = 1 \mu m$. En réalité, la taille des

fragments est a priori dispersée (et largement inconnue dans les cas de coulées des aciers). On peut estimer cependant que leur taille initiale dans d'autres alliages est le plus souvent d'un ou deux ordres de grandeur supérieure à $1 \mu m$ (Mathisen R.H 2006). On maintient cependant notre hypothèse précédente car sinon la quantité de solide que représente les fragments n'est plus négligeable devant celle présente dans la zone colonnaire des VER contenant le front. En effet, on ne soustrait pas dans notre modèle le solide correspondant aux fragments créés aux structures colonnaires, comme on devrait normalement le faire afin d'assurer la conservation de la masse. Ceci permet de simplifier le modèle de fragmentation proposé. On peut vérifier que l'erreur réalisée sur la conservation de la masse de solide est faible en estimant la fraction de solide créée dans un VER par les fragments :

$$\Delta g_s^{frag} = \frac{\varphi_{frag} \cdot S \cdot V_{germ} \cdot t_{front}}{V_{VER}} \quad (3.13)$$

On prend $\varphi = 10^4 \text{ grains} \cdot m^{-2} s^{-1}$ comme borne supérieure du flux de fragmentation (cf. partie suivante) et $t_{front} \approx 100 \text{ s}$ comme on l'a vu précédemment. En considérant un VER cubique de

5 mm de côté, on trouve : $\Delta g_s^{frag} \approx 8 \cdot 10^{-10}$ ce qui est effectivement négligeable. On vérifie tout de même, comme condition nécessaire à l'injection surfacique, que la fraction de solide moyenne dans la zone pâteuse colonnaire \bar{g}_s^{col} est supérieure à la quantité de solide produite par les fragments, c'est-à-dire pendant un temps Δt $\bar{g}_s^{col} > \frac{\varphi_{frag} \cdot S \cdot V_{germ}}{V_{VER}} \cdot \Delta t$. On vérifie également que $\bar{g}_s^{col} < (1 - g_l^{frag})$ où g_l^{frag} est une fraction minimale de liquide dans la zone pâteuse colonnaire pour la fragmentation. Dans notre modèle, on choisit $g_l^{frag} = 0,3$.

Ce mécanisme d'apparition des grains équiaxes s'apparente donc plutôt à une injection surfacique de grains équiaxes dans le liquide devant le front plutôt qu'une véritable modélisation de la fragmentation et donc on utilisera le terme d'injection surfacique dans le cadre de notre modèle.

III.1.3 Implémentation numérique du modèle

On rappelle ici les variables d'intérêt nécessaires à la description des zones colonnaire et équiaxe et du volume total d'une maille mixte. Il est nécessaire de définir :

- Les masses volumiques : $\rho_l^{col}, \rho_l^{eqx}, \rho_l^{tot}$
- Les densités de grains « équiaxes et de sous-structures colonnaires : $n_{col}, n_{eqx}, n_{tot}$
- Les fractions volumiques (massiques) de liquide : $g_l^{col}(f_l^{col}), g_l^{eqx}(f_l^{eqx}), g_l^{tot}(f_l^{tot})$
- Les fractions volumiques (massiques) de solide : $g_s^{col}(f_s^{col}), g_s^{eqx}(f_s^{eqx}), g_s^{tot}(f_s^{tot})$
- Les fractions d'enveloppes : $g_{env}^{col}, g_{env}^{eqx}, g_{env}^{tot}$
- Les concentrations moyennes de la phase liquide : $\langle C_l^{i,col} \rangle^l, \langle C_l^{i,eqx} \rangle^l, \langle C_l^{i,tot} \rangle^l$
- Les concentrations moyennes de la phase solide : $\langle C_s^{i,col} \rangle^s, \langle C_s^{i,eqx} \rangle^s, \langle C_s^{i,tot} \rangle^s$
- Les concentrations d'équilibre à l'interface solide/liquide : $C_l^{i*,col}, C_l^{i*,eqx}, C_l^{i*,tot}$
- Les enthalpies massiques de mélange : $h_m^{col}, h_m^{eqx}, h_m^{tot}$

- Les fractions volumiques (massiques) de zone : $g_{col}(f_{col}), g_{eqx}(f_{eqx})$

En parallèle de la description du modèle qui va suivre, l'algorithme général du modèle est présenté Figure III.1-4 et l'algorithme plus détaillé du modèle de croissance des mailles mixtes en Figure III.1-5.

Comme dans la partie précédente on va reprendre étape par étape l'implémentation du modèle dans les mailles où le front colonnaire n'est pas bloqué. Les étapes de transport, l'avancée du front colonnaire, la germination et la croissance sont schématisées sur les Figure III.1-6.a-f.

On part donc de l'étape avant transport. Comme on l'a vu précédemment et puisqu'on suppose l'absence de pénétration du solide dans les zones poreuses de grains bloqués, la situation à l'étape de transport pour une variable ϕ reste la même qu'à t_0 sauf l'enthalpie de mélange totale h_m^{tot} , donnée par l'équation (3.9) et les concentrations de soluté $\langle C_i^k \rangle^l$.

De manière identique au chapitre II.3, on peut écrire d'après l'hypothèse (3.7) :

$$\rho_i^{col} \left(\langle C_i^{col} \rangle^{l,tr} - \langle C_i^{col} \rangle^{l,0} \right) = \rho_i^{eqx} \left(\langle C_i^{eqx} \rangle^{l,tr} - \langle C_i^{eqx} \rangle^{l,0} \right) \quad (3.14)$$

Et si l'on peut supposer $\rho_i^{col} \approx \rho_i^{eqx}$ on a simplement :

$$\left(\langle C_i^{col} \rangle^{l,tr} - \langle C_i^{col} \rangle^{l,0} \right) = \left(\langle C_i^{eqx} \rangle^{l,tr} - \langle C_i^{eqx} \rangle^{l,0} \right) = \left(\langle C_i^{tot} \rangle^{l,tr} - \langle C_i^{tot} \rangle^{l,0} \right) \quad (3.15)$$

L'équation (3.15) et la conservation du soluté total permettent alors de déterminer $\langle C_i^{col} \rangle^{l,tr}$ et $\langle C_i^{eqx} \rangle^{l,tr}$ comme indiqué sur la Figure III.1-6.a et la Figure III.1-6.b.

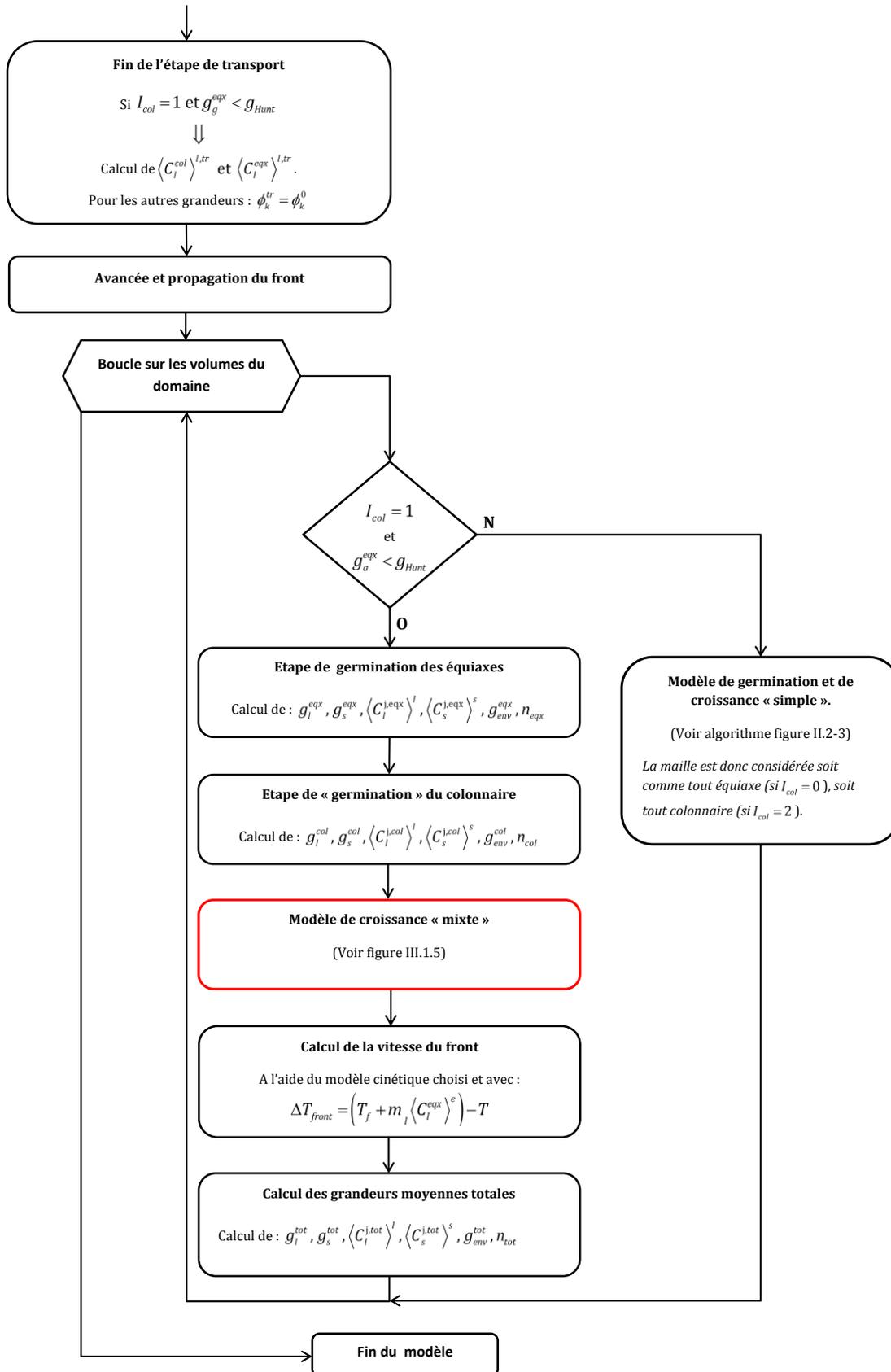


Figure III.1-4 : Algorithme du modèle complet qui inclut le transport, l'avancée et la propagation dans les volumes du front ainsi que la « germination » et la croissance. Le modèle de croissance couplée colonnaire-équiaxe (encadré en rouge) est détaillé en Figure III.1-5

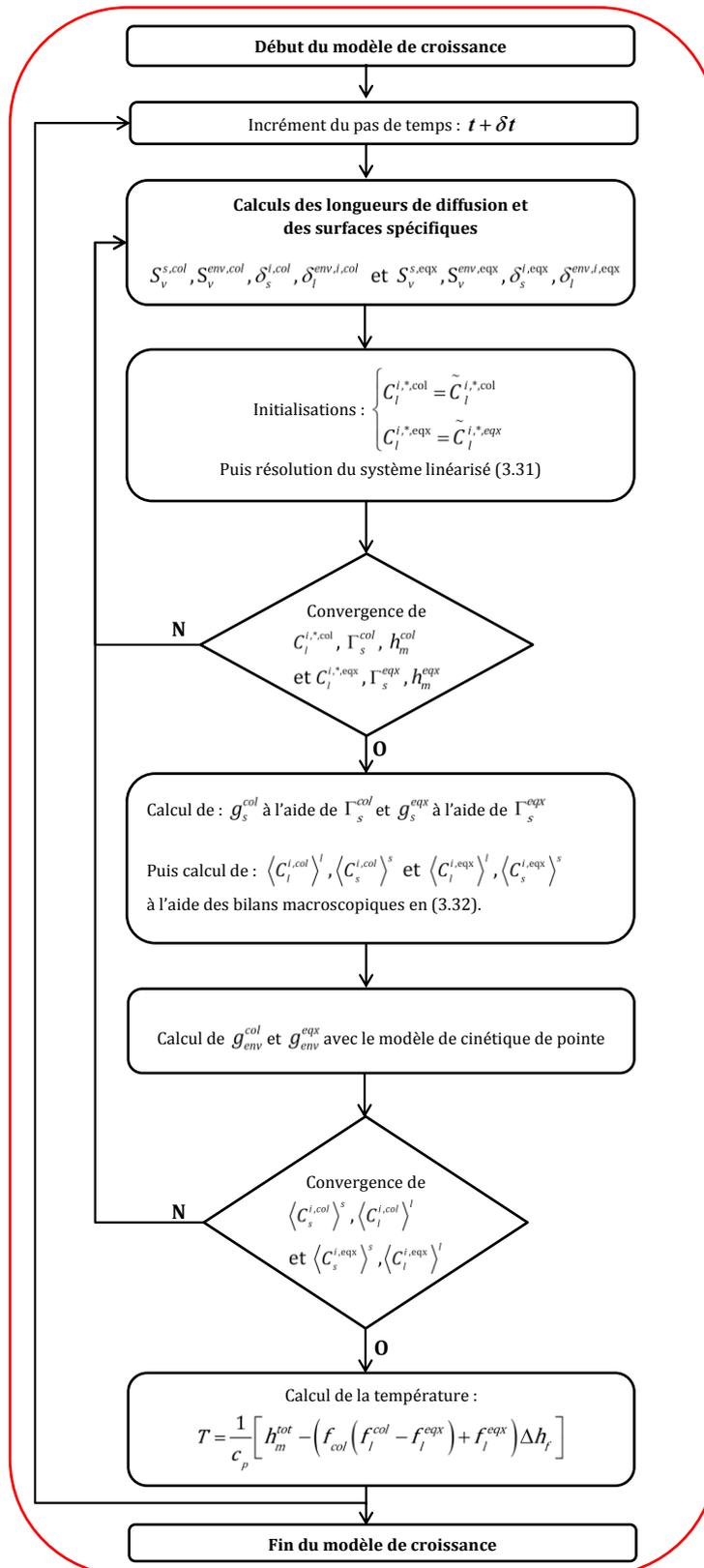
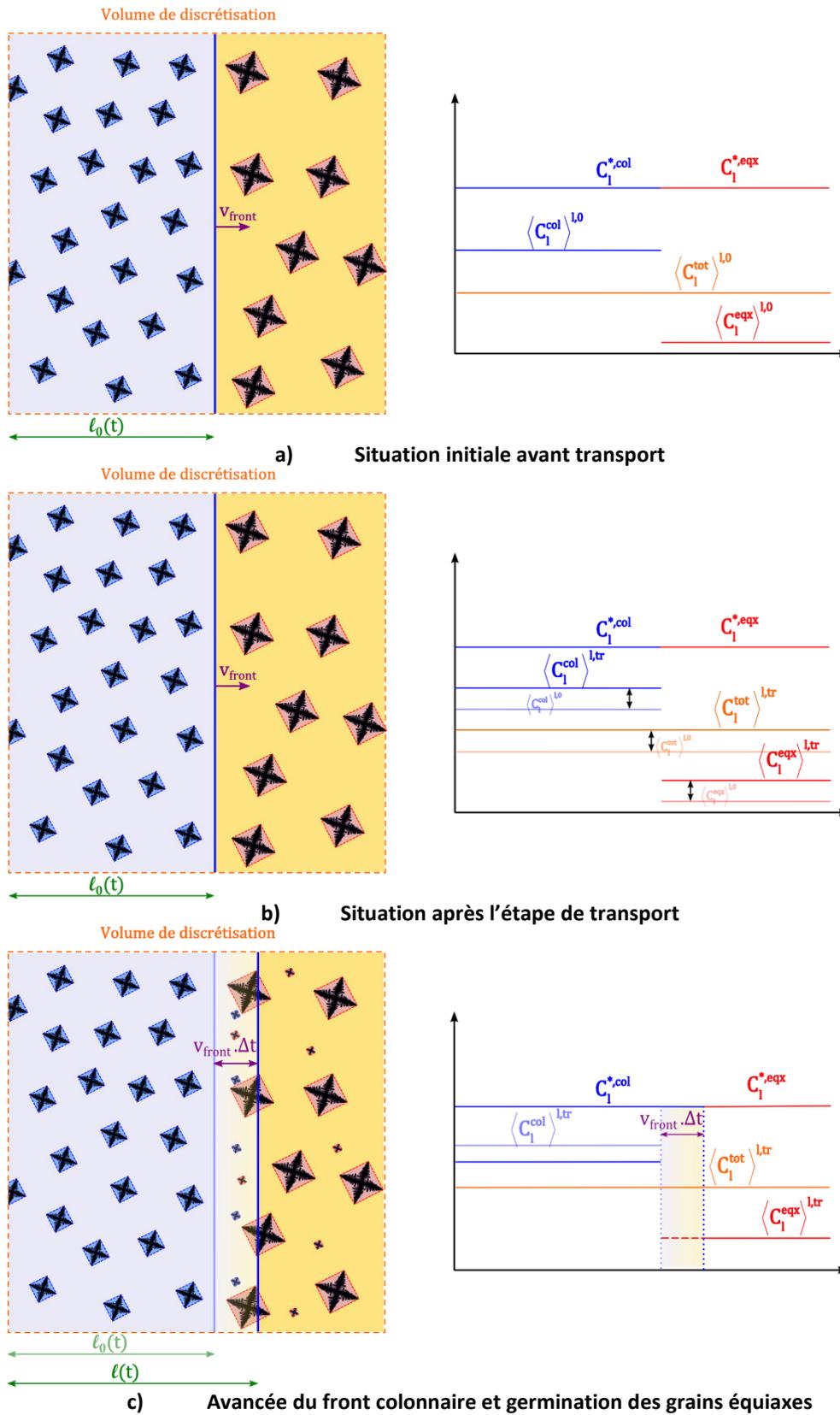


Figure III.1-5 : Algorithme pour le modèle de croissance microscopique dans le cas de la croissance couplée colonnaire-équiaxe



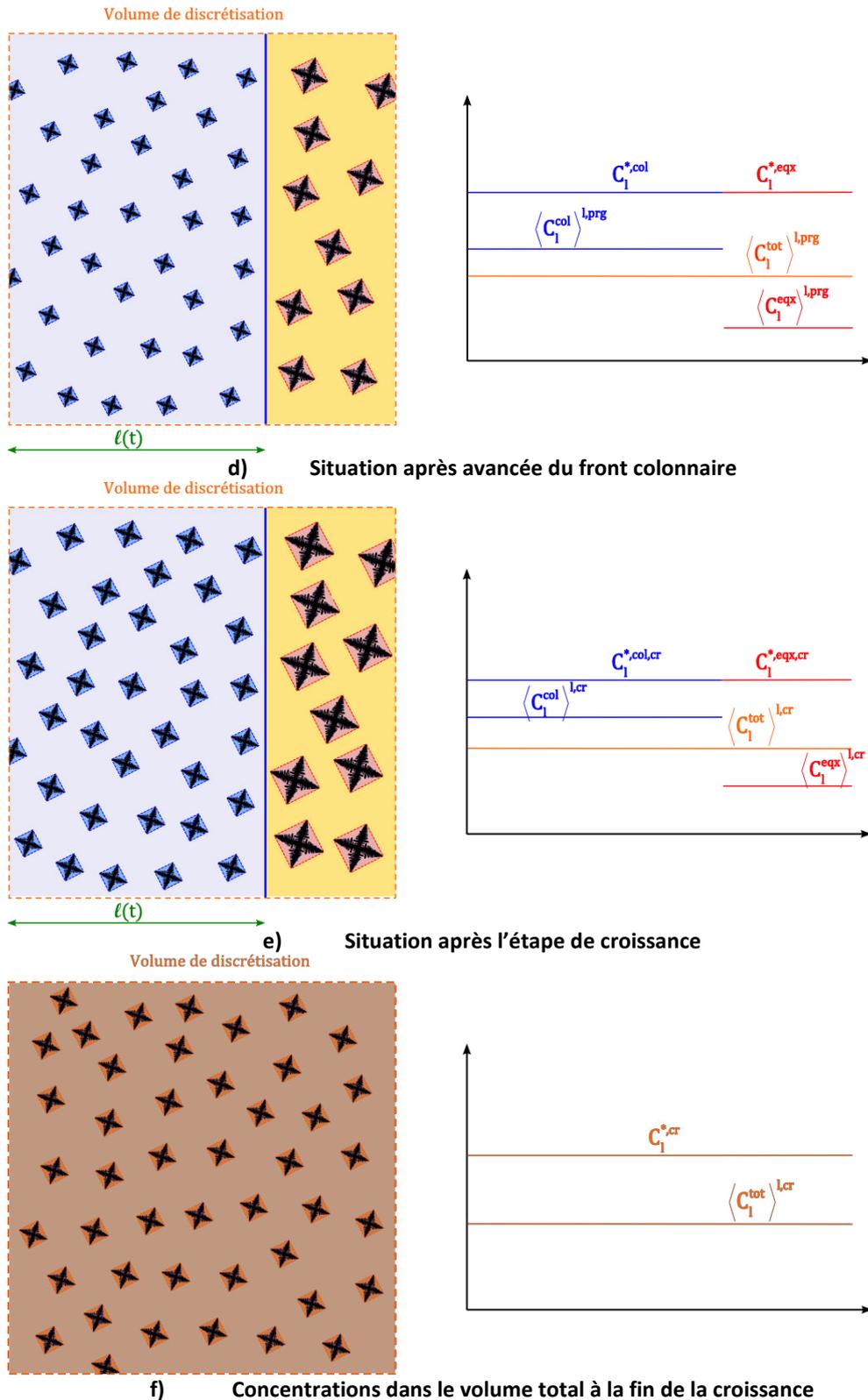


Figure III.1-6 : Schémas des principales étapes de modélisation d'un volume du front. A gauche, les schémas du volume de discrétisation avec une population de grains moyens et la position du front symbolisée par une ligne bleue. A droite, les profils des concentrations moyennes dans les différentes zones du volume.

a) Situation initiale avant transport b) Situation après l'étape de transport. c) Le déroulement (simultané ici) de l'avancée du front, l'apparition des sous-structures colonnaires et la germination des grains équiaxes. Les germes équiaxes sont en rouges d) Situation après propagation du front et germination. e) Situation après croissance, les grandeurs sont alors indicées par «cr». f) Calcul des grandeurs moyennes totales finales.

A l'exemple de la partie précédente, on commence par déterminer l'avancée et la propagation du front colonnaire. Le calcul de $\ell(t)$, I_{col} , g_{col} et g_{eqx} se fait suivant les relations 2.68, 2.28, 2.34 et 2.35.

Cette étape de propagation a également deux conséquences : une partie de la zone équiaxe de longueur $v_{front} \cdot dt$ sera intégrée à la zone colonnaire de la maille. De plus, l'apparition de nouvelles sous-structures colonnaires se fait suivant l'équation 2.58. A cela s'ajoute la germination de nouveaux grains équiaxes. Ces étapes sont schématisées sur la Figure III.1-6.c.

Comme dans le chapitre II.3, l'avancée du front se fait avant la croissance. De plus, l'avancée du front proprement dite et l'apparition des nouvelles sous-structures sont réalisées successivement. Lors de la première étape d'avancée du front, les grandeurs intensives de la zone équiaxe ne sont alors pas modifiées. On note « *tr* » les valeurs après transport et « *pr* » les valeurs après cette étape.

Pour la fraction de liquide :

$$g_l^{col,pr} = g_l^{col,tr} \frac{g_{col}^0}{g_{col}} + \frac{\rho_l^{eqx}}{\rho_l^{col}} \left(1 - \frac{g_{col}^0}{g_{col}} \right) g_l^{eqx,tr} \quad (3.16)$$

Pour la concentration moyenne de soluté dans le liquide :

$$\langle C_l^{col} \rangle^{l,pr} = \frac{1}{g_l^{col,pr}} \left[g_l^{col,tr} \frac{g_{col}^0}{g_{col}} \langle C_l^{col} \rangle^{l,tr} + \frac{\rho_l^{eqx}}{\rho_l^{col}} \left(1 - \frac{g_{col}^0}{g_{col}} \right) g_l^{eqx,tr} \langle C_l^{eqx} \rangle^{l,tr} \right] \quad (3.17)$$

Pour la concentration moyenne de soluté du solide:

$$\langle C_s^{col} \rangle^{s,pr} = \frac{1}{g_s^{col,pr}} \left[g_s^{col,tr} \frac{g_{col}^0}{g_{col}} \langle C_s^{col} \rangle^{s,tr} + g_s^{eqx,tr} \left(1 - \frac{g_{col}^0}{g_{col}} \right) \langle C_s^{eqx} \rangle^{s,tr} \right] \quad (3.18)$$

Pour la fraction d'enveloppe :

$$g_{env}^{col,pr} = g_{env}^{col,tr} \frac{g_{col}^0}{g_{col}} + g_{env}^{eqx,tr} \left(1 - \frac{g_{col}^0}{g_{col}} \right) \quad (3.19)$$

Après cette étape (voir l'algorithme sur la Figure III.1-4) vient l'apparition des nouvelles sous-structures colonnaires mais aussi la germination de grains équiaxes. Comme on l'a vu dans le chapitre II.3, on ne considère pas la contribution de la fragmentation dans une maille qui est déjà mixte. Par contre, la germination hétérogène des grains équiaxes est toujours possible dans la zone équiaxe.

On choisit de traiter en premier la germination des grains équiaxes puis l'apparition des sous-structures colonnaires, séquentiellement. Là encore, il faudrait normalement coupler ces deux étapes avec l'avancée du front.

Cependant, comme on l'a vu, les faibles quantités de solide en jeu lors de la germination font que cette hypothèse n'impacte pas sensiblement les résultats.

Connaissant les flux de germination par l'équation 2.7 on a donc la nouvelle valeur de la densité de grains équiaxes après germination n_{eqx}^{prg} . Il s'agit d'une étape identique à ce qui se déroule lors de la

germination dans un volume qui ne contient pas le front. On notera « *prg* » les valeurs après la germination.

On a donc pour la fraction liquide :

$$g_l^{eqx,prg} = g_l^{eqx,pr} - V_{germ} (n_{eqx}^{prg} - n_{eqx}^{tr}) \quad (3.20)$$

Pour la concentration moyenne du liquide :

$$\langle C_l^{eqx} \rangle^{l,prg} = \frac{\langle C_l^{eqx} \rangle^{l,tr}}{g_l^{eqx,prg}} \left[g_l^{eqx,tr} - V_{germ} (n_{eqx}^{prg} - n_{eqx}^{tr}) k \right] \quad (3.21)$$

Pour la concentration moyenne du solide :

$$\langle C_s^{eqx} \rangle^{s,prg} = \frac{1}{g_s^{eqx,prg}} \left[g_s^{eqx,tr} \langle C_s^{eqx} \rangle^{s,tr} + V_{germ} (n_{eqx}^{prg} - n_{eqx}^{tr}) k \langle C_l^{eqx} \rangle^{l,tr} \right] \quad (3.22)$$

Pour la fraction d'enveloppe :

$$g_{env}^{eqx,prg} = g_{env}^{eqx,pr} + V_{germ} (n_{eqx}^{prg} - n_{eqx}^{tr}) \quad (3.23)$$

On va maintenant traiter l'apparition des sous-structures colonnaires. On notera également « *prg* » les valeurs après propagation du front. Sachant que les grains équiaxes qui se retrouvent dans la zone colonnaire sont intégrés en tant que sous-structures, on aura dans le cas général $n_{col}^{prg} \neq n_{col}^{final}$.

Ainsi, on obtient (puisque la germination équiaxe a déjà eu lieu) :

$$n_{col}^{prg} = n_{col}^0 \frac{g_{col}^0}{g_{col}} + (n_{col}^{final} + n_{eqx}^{prg}) \left(1 - \frac{g_{col}^0}{g_{col}} \right) \quad (3.24)$$

Pour la fraction liquide :

$$g_l^{col,prg} = g_l^{col,pr} - V_{germ} \left(1 - \frac{g_{col}^0}{g_{col}} \right) \left[n_{col}^{final} + (n_{eqx}^{prg} - n_{eqx}^{tr}) \right] \quad (3.25)$$

Pour la concentration moyenne du liquide (on suppose $\rho_l^{col} = \rho_l^{eqx}$) :

$$\langle C_l^{col} \rangle^{l,prg} = \frac{1}{g_l^{col,prg}} \left[g_l^{col,pr} \langle C_l^{col} \rangle^{l,pr} - V_{germ} \left(1 - \frac{g_{col}^0}{g_{col}} \right) k \left((n_{eqx}^{prg} - n_{eqx}^{tr}) \langle C_l^{eqx} \rangle^{l,tr} + n_{col}^{final} \langle C_l^{col} \rangle^{l,pr} \right) \right] \quad (3.26)$$

Pour la concentration moyenne du solide :

$$\langle C_s^{col} \rangle^{s,prg} = \frac{1}{g_s^{col,prg}} \left[g_s^{col,pr} \langle C_s^{col} \rangle^{s,pr} + V_{germ} \left(1 - \frac{g_{col}^0}{g_{col}} \right) k \left(n_{col}^{final} \langle C_l^{col} \rangle^{l,pr} + (n_{eqx}^{prg} - n_{eqx}^{tr}) \langle C_l^{eqx} \rangle^{l,tr} \right) \right] \quad (3.27)$$

Pour la fraction d'enveloppe :

$$g_{env}^{col,prg} = g_{env}^{col,pr} + V_{germ} \left(1 - \frac{g_{col}^0}{g_{col}} \right) \left[n_{col}^{final} + (n_{eqx}^{prg} - n_{eqx}^{tr}) \right] \quad (3.28)$$

Un schéma des étapes d'avancée et de germination se trouve en Figure III.1-6.c. Le résultat final avant croissance est représenté en Figure III.1-6.d.

Comme on l'a déjà remarqué, les grains équiaxes qui sont intégrés dans la zone colonnaire deviennent des sous-structures et donc ils ne sont plus comptés en tant que grains et enveloppes équiaxes. On ne considère pas non plus la germination équiaxe dans la zone colonnaire des mailles mixtes.

Pendant, si on ne traite pas dans notre modèle les structures véritablement mixtes, on peut avoir une idée du type de structure présente dans une zone colonnaire une fois que le front est passé (quand $I_{col} = 2$). On peut pour cela calculer la fraction de grains équiaxes qui a été intégrés dans la zone colonnaire au cours de la traversée de la maille par le front.

On peut alors écrire :

$$g_{eqx}^{tot} = g_{env}^{eqx} g_{eqx} + \int_{t_{col,0}}^t g_{env}^{eqx}(t) d(g_{col}(t)) \quad (3.29)$$

$t_{col,0}$ correspond au dernier instant où le front colonnaire a pénétré dans la maille (I_{col} passe de 0 à 1).

On peut encore écrire :

$$g_{eqx}^{tot} = g_{env}^{eqx} g_{eqx} + \int_{t_{col,0}}^t g_{env}^{eqx}(t) \frac{v_{front}(t)}{d_{lim}} dt \quad (3.30)$$

La grandeur g_{eqx}^{tot} caractérise ainsi la présence de structures équiaxes dans tout le volume, y compris derrière le front colonnaire.

La modélisation de la croissance du solide est par la suite résolue.

Dans les volumes contenant uniquement des équiaxes ou ceux situés derrière le front (où $I_{col} = 2$), la croissance de structures « simples » donnée par la relation 1.15 est résolue.

Dans les mailles mixtes, la croissance couplée des structures colonnaires et équiaxes doit être résolue (voir algorithme général en Figure III.1-5).

En parallèle aux équations 2.79, on peut définir le système à résoudre

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \Gamma_s^{col} \tilde{C}_l^{i,*col} (1 - k_i) = \rho_l^{col} S_v^{env,col} D_l^i \frac{g_l^{0,col} C_l^{i,*col} - \langle C_l^{i,col} \rangle^l}{g_e^{0,col} \delta_l^{i,env,col}} \\
 \quad + \rho_s S_v^{s,col} D_s^i \frac{g_l^{0,col} k_i C_l^{i,*col} - \langle C_s^{i,col} \rangle^s}{g_e^{0,col} \delta_s^{i,col}} \quad 1 \leq i \leq N_{ele} \quad a) \\
 \\
 \Gamma_s^{eqx} \tilde{C}_l^{i,*eqx} (1 - k_i) = \rho_l^{eqx} S_v^{env,eqx} D_l^i \frac{g_l^{0,eqx} C_l^{i,*eqx} - \langle C_l^{i,eqx} \rangle^l}{g_e^{0,eqx} \delta_l^{i,env,eqx}} \\
 \quad + \rho_s S_v^{s,eqx} D_s^i \frac{g_l^{0,eqx} k_i C_l^{i,*eqx} - \langle C_s^{i,eqx} \rangle^s}{g_e^{0,eqx} \delta_s^{i,eqx}} \quad 1 \leq i \leq N_{ele} \quad b) \\
 \\
 \delta h_m^{col} = c_p \left(T_f + \sum_{1 \leq i \leq N_{ele}} m_l^i C_l^{i,*col} - T^0 \right) - \Delta h_f \left(\frac{\Gamma_s^{col}}{\rho_s} \delta t \right) \quad c) \\
 \\
 \delta h_m^{eqx} = c_p \left(T_f + \sum_{1 \leq i \leq N_{ele}} m_l^i C_l^{i,*eqx} - T^0 \right) - \Delta h_f \left(\frac{\Gamma_s^{eqx}}{\rho_s} \delta t + \cancel{df_s^{eqx,tr}} \right) \quad d) \\
 \\
 \sum_i m_l^i C_l^{i,*col} = \sum_i m_l^i C_l^{i,*eqx} \quad e) \\
 \\
 \delta h_m^{tot} = f_{col} \delta h_m^{col} + (1 - f_{col}) \delta h_m^{eqx} + \delta f_{col} (h_m^{col,0} - h_m^{eqx,0}) \quad f)
 \end{array} \right. \quad (3.31)$$

Les équations a) et b) sont les bilans de soluté à l'interface solide/liquide pour l'espèce i , dans la zone colonnaire et équiaxe respectivement.

Les équations c), d) lient le taux de solidification dans chaque zone à la variation d'enthalpie de mélange dans la zone correspondante. L'équation f) permet de déterminer dh_m^k à partir de dh_m^{tot} par conservation de l'énergie dans le volume total.

Enfin, l'équation e) traduit l'égalité des températures dans chaque zone.

De la même manière que dans le chapitre précédent, on a linéarisé les deux premières équations en utilisant dans les termes de gauche la concentration d'équilibre à l'itération précédente $\tilde{C}_l^{i,*k}$.

D'après notre hypothèse (3.2) sur les mailles mixtes, il n'y a pas de contribution du transport à la fraction solide équiaxe donc $df_s^{eqx,tr} = 0$.

Le détail des calculs des longueurs de diffusion et des surfaces spécifiques dans chaque zone ($S_v^{s,k}$, $S_v^{env,k}$, $\delta_s^{i,k}$, $\delta_{env}^{i,env,k}$) peut être trouvé ailleurs (Bedel M. 2014).

On teste la convergence du système sur toutes les inconnues : Γ_s^{eqx} , Γ_s^{col} , dh_m^{col} , dh_m^{eqx} , $C_l^{i,*col}$ et $C_l^{i,*eqx}$.

On résout par la suite les bilans macroscopiques de soluté et de fraction solide. Dans les volumes mixtes, il faut les résoudre pour chaque zone k :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial g_s^k}{\partial t} = \frac{\Gamma_s^k}{\rho_s} \\ \frac{\partial (\rho_s g_s^k \langle C_s^{i,k} \rangle^s)}{\partial t} = \Gamma_s^k k C_l^{i*,k} + \frac{\rho_s S_v^{s,k} D_s^i}{\delta_s^{i,k}} (k C_l^{i*,k} - \langle C_s^{i,k} \rangle^s) \\ \frac{\partial (\rho_l^k g_l^k \langle C_l^{i,k} \rangle^l)}{\partial t} = -\Gamma_s^k C_l^{i*,k} + \frac{\rho_l S_v^{env,k} D_l^i}{\delta_l^{i,env,k}} \frac{g_l^k}{g_e^k} (C_l^{i*,k} - \langle C_l^{i,k} \rangle^l) \end{array} \right. \quad k = \{eqx; col\} \quad (3.32)$$

On teste la convergence de la solution sur $\langle C_l^{i,col} \rangle^l$, $\langle C_s^{i,col} \rangle^s$, $\langle C_l^{i,eqx} \rangle^l$ et $\langle C_s^{i,eqx} \rangle^s$.

Le résultat après l'étape de croissance est schématisé sur la Figure III.1-6.d.

Comme dans la partie précédente, le calcul des densités du liquide ρ_l^k se fait après le modèle de croissance selon l'équation 2.60.

A la fin de l'étape de croissance, sachant que $f_l^{tot} = f_{col} f_l^{col} + (1 - f_{col}) f_l^{eqx}$, on peut désormais calculer la température :

$$T = \frac{1}{c_p} \left[h_m^{tot} - (f_{col} (f_l^{col} - f_l^{eqx}) + f_l^{eqx}) \Delta h_f \right] \quad (3.33)$$

On peut remarquer qu'il est possible qu'on atteigne la température eutectique T_{eut} dans les volumes mixtes sans que le front soit encore sorti du volume ou soit bloqué mécaniquement. Typiquement, cette situation advient lors de l'enrichissement jusqu'à l'équilibre du liquide devant le front ce qui va, de fait, le bloquer solutalement.

Dans le cas où $T = T_{eut}$ dans un volume mixte, on va considérer le front comme bloqué et on repasse alors en croissance « simple » dans le volume, la vitesse du front étant imposée à 0.

On a traité également dans la partie précédente de la refusion totale de la zone colonnaire. Avec la disparition complète des structures colonnaires, on va alors considérer que le front n'est plus dans le volume. Donc I_{col} , g_{col} ainsi que la longueur du front sont fixés à 0. La maille n'est donc plus mixte et les grandeurs qui étaient précédemment rattachées à la zone colonnaire sont réintégrées dans le volume total, de manière similaire à l'étape de calcul des grandeurs moyennes totales détaillé ci-après.

Après avoir calculé la nouvelle vitesse du front (en utilisant la surfusion $\Delta T = T_f + \sum_i m_i^i \langle C_l^{i,eqx} \rangle^e - T$), on termine l'implémentation du modèle par le calcul des propriétés moyenne totales des mailles mixtes. On utilisera bien sûr les valeurs de chaque zone k après croissance.

Pour la fraction de liquide :

$$g_l^{tot} = \frac{1}{\rho_l^{tot}} \left(\rho_l^{col} g_l^{col} g_{col} + \rho_l^{eqx} g_l^{eqx} (1 - g_{col}) \right) \quad (3.34)$$

Pour la concentration moyenne du liquide :

$$\langle C_l^{tot} \rangle^l = \frac{1}{\rho_l^{tot} g_l^{tot}} \left(\rho_l^{col} g_l^{col} g_{col} \langle C_l^{col} \rangle^l + \rho_l^{eqx} g_l^{eqx} (1 - g_{col}) \langle C_l^{eqx} \rangle^l \right) \quad (3.35)$$

Pour la concentration moyenne du solide :

$$\langle C_s^{tot} \rangle^s = \frac{1}{g_s^{tot}} \left(g_s^{col} g_{col} \langle C_s^{col} \rangle^s + g_s^{eqx} (1 - g_{col}) \langle C_s^{eqx} \rangle^s \right) \quad (3.36)$$

Pour la fraction d'enveloppe :

$$g_{env}^{tot} = g_{env}^{col} g_{col} + g_{env}^{eqx} (1 - g_{col}) \quad (3.37)$$

Pour la densité de grains :

$$n_{tot} = n_{col} g_{col} + n_{eqx} (1 - g_{col}) \quad (3.38)$$

Le résultat final pour la morphologie et la taille des grains sera un « mélange » de ceux de la zone colonnaire et équiaxe comme la Figure III.1-6.f le montre pour les concentrations dans le liquide.

III.2. Validation du modèle par comparaison avec les résultats expérimentaux de la littérature

III.2.1 Présentation du cas choisi

Dans la littérature, il existe assez peu d'expériences de TCE de solidification unidirectionnelle dans des conditions de solidification non-stationnaires et dont les résultats aient été comparés quantitativement avec des modèles numériques.

Une exception concerne les expériences de Gandin qui a réalisé la solidification directionnelle de trois lingots d'Aluminium-Silicium et d'un lingot d'Aluminium pur (Gandin Ch.-A 2000). Pour ces expériences, les conditions aux limites thermiques ont été bien établies, ainsi que les propriétés thermo-physiques des alliages utilisés. Cela limite donc fortement le nombre de paramètres du calcul. Par ailleurs, des comparaisons quantitatives avec des modèles de TCE ont déjà été effectuées, notamment par Beckermann (B. C. Martorano M.A 2003) ainsi que Gandin à l'aide du modèle de front-tracking évoqué dans le chapitre II.3.4. On choisit ici plus particulièrement le lingot d'Al-7%pd Si car il a récemment été simulé en 3D par le modèle CAFE (Carazonni T. 2012).

Le cas étudié du lingot Al-7%pds Si de 17cm de long et 7cm de diamètre est donc présenté en Figure III.2-7.a.

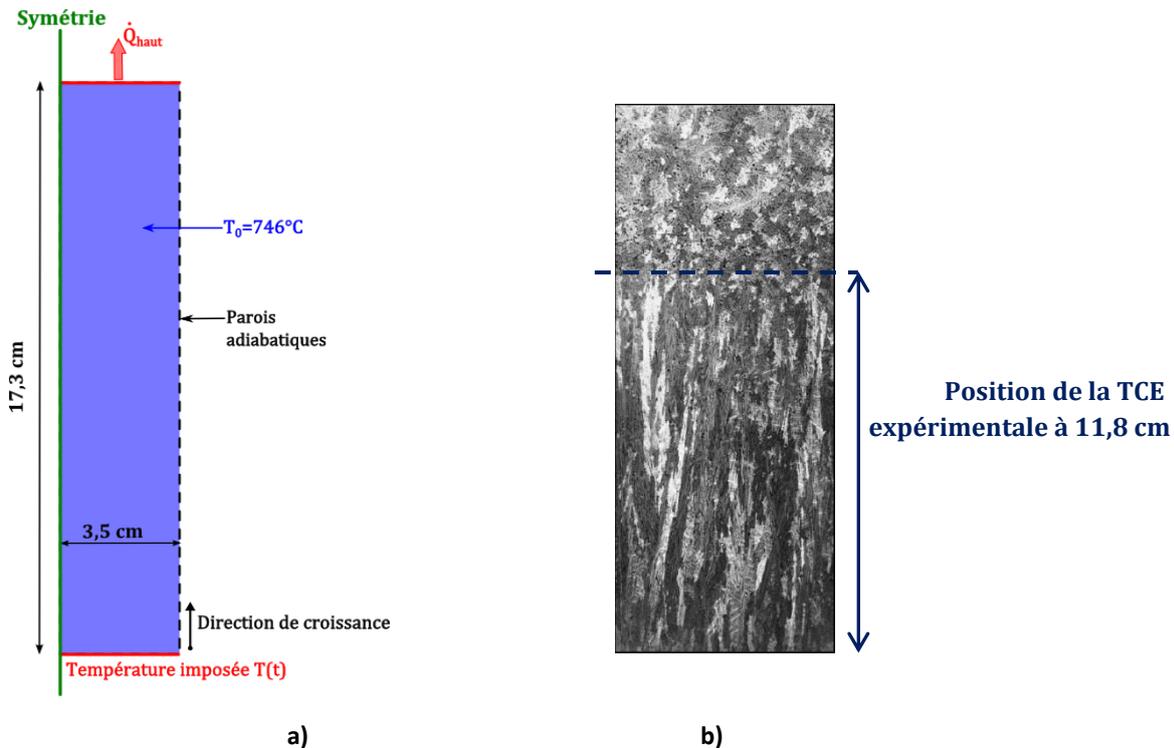


Figure III.2-7 : Schéma du lingot Al-7%Si simulé. a) Géométrie et conditions limites thermiques choisies pour le calcul. b) Structure finale des grains pour l'expérience sur le lingot Al-7%Si (Gandin Ch.-A 2000).

On prend avantage de la symétrie de la géométrie et du caractère essentiellement unidirectionnel de la solidification on ne modélise donc qu'une moitié du lingot. On remarque que le domaine numérique est légèrement plus long que l'expérience (17 cm). Cette géométrie a été déterminée par les auteurs du modèle CAFE et permet de retrouver les températures expérimentales en dépit du fait qu'on ne simule pas ici le phénomène de retrait, qui est par contre modélisé dans (Gandin Ch.-A 2000).

Les propriétés de l'alliage sont reportées en Annexe 0. Par rapport aux valeurs établies dans les calculs de front-tracking (Gandin Ch.-A 2000), certaines propriétés ont été moyennées sur la gamme de température ce qui peut entraîner une imprécision dans les comparaisons quantitatives présentées plus loin. Notamment la chaleur spécifique c_p doit pour l'instant être prise constante et égale pour le solide et le liquide dans notre modèle.

Le Tableau 8 résume les principaux paramètres et les conditions limites thermiques imposées. Pour les conditions limites thermiques, on a repris celles établies par Gandin et coll. (Carazonni T. 2012). On ne va pas modéliser ici la déstabilisation et la fragmentation du front. On suppose donc que l'apparition des grains équiaxes est uniquement due à la germination. La distribution est donnée par une loi normale. Afin de retrouver la position expérimentale de la TCE dans le cadre de notre modèle nous avons cependant pris $n_{max} = 4.10^8 \text{ grains.m}^{-3}$ au lieu de $n_{max} = 10^9 \text{ grains.m}^{-3}$ dans le modèle CAFE. On s'attend donc à trouver des tailles finales de grains supérieures au modèle CAFE.

Tableau 8 Conditions aux limites et paramètres numériques pour la simulation du lingot Al-7%pds Si présenté en Figure III.2-7.a

Conditions limites	Haut	Bas	
	$\dot{Q}_{haut} = \begin{cases} 3000 \text{ W.m}^{-2} & \text{si } t \leq 900 \text{ s} \\ 0 \text{ W.m}^{-2} & \text{si } t > 900 \text{ s} \end{cases}$	Température imposée, extrapolée à partir des mesures expérimentales (Carazonni T. 2012)	
Paramètres	Symbole		
Espacement entre bras	λ_1	5.10^{-4} m	
Fraction de blocage	g_{Hunt}	0,5	
Apparition des structures colonnaires	ΔT_{col}^{moule}	Interface moule/métal (bas)	0 °C
		Interface air/métal (haut)	$\begin{cases} \text{Si } t \leq 900 \text{ s} : \infty \text{ °C} \\ \text{Si } t > 900 \text{ s} : 0 \text{ °C} \end{cases}$
Germination des grains équiaxes	n_{max}	$4.10^8 \text{ grains.m}^{-3}$	
	ΔT_N	5,19 °C	
	ΔT_σ	0,5 °C	

On peut noter que puisqu'il y a un échange thermique dans la partie haute du lingot, il est possible *a priori* qu'un deuxième front colonnaire croisse à partir de l'interface air/métal. Néanmoins, les grains formés à cet endroit auraient plutôt tendance à sédimenter et il n'est pas évident qu'une structure orientée puisse s'y former. D'un autre côté, Ch.-A. Gandin propose dans les expériences originales de considérer le haut du lingot comme adiabatique dès que $t > 900 \text{ s}$, cette isolation thermique étant liée à l'apparition de dendrites à l'interface air/métal à ce moment. On décide donc d'autoriser l'apparition d'un deuxième front colonnaire à partir de cet instant.

III.2.2 Résultats et comparaison avec l'expérience

Le calcul numérique de référence que l'on a choisi utilise des tailles de maille de $1\text{mm} \times 1\text{mm}$. Avec un pas de temps $\Delta t = 5.10^{-3}\text{s}$ et $N_{micro} = 5$, le temps de calcul est de 4 heures avec environ 6000 mailles de calcul et un temps réel de solidification de 20 minutes.

On trouve alors la position de la TCE à 10,7 cm un peu avant la position expérimentale et très proche des résultats CAFE. Comme on s'y attendait, on trouve également une zone colonnaire d'environ 1,2 cm de long en haut du lingot.

Afin de vérifier l'indépendance de la position de la TCE par rapport au maillage, une étude paramétrique est reportée sur le Tableau 9.

On voit que pour la taille de 1 mm utilisée comme référence, les résultats ne sont pas encore complètement indépendants du maillage et on a tendance à converger vers 12 cm, valeur proche de la TCE expérimentale. Ceci étant, l'erreur sur la position (de l'ordre de 1 cm) reste faible. Pour des maillages plus grossiers, on retrouve une bonne prédiction de la position de la TCE, même si on peut remarquer que la dépendance n'est pas monotone, l'erreur la plus importante se trouvant pour des mailles de 2 mm. La raison de cette non-monotonie semble provenir de la surestimation de la température devant le front lorsque la taille de la maille augmente. Cette surestimation a deux effets antagonistes : la vitesse du front v_{front} est sous-estimée d'une part. D'autre part, la croissance des grains équiaxes juste devant le front est également sous-estimée. Il apparaît qu'à partir d'une certaine taille de maille, c'est l'effet sur v_{front} qui est le plus important, pour Δx entre 2 mm et 5 mm pour la distribution de germes utilisée.

Par ailleurs, il est important de noter que l'écart-type ΔT_σ de la distribution de germes est de seulement 0,5 °C. Donc d'un simple point de vue de la résolution en température, une erreur sur T de l'ordre de ΔT_σ a un impact important sur la densité de grains équiaxes qui vont germer devant le front colonnaire. Ceci explique en partie les écarts observés sur la position de la TCE lorsque l'on fait varier la taille de maille.

Tableau 9 Position de la TCE en fonction de la taille de maille utilisée

Taille de maille	0,25 mm	0,5 mm	1 mm	2 mm	5 mm
Position de la TCE	11,9 cm	11,6 cm	10,7 cm	10 cm	10,9 cm

Les résultats sur l'évolution de la température au cours du temps sont également comparés avec les mesures expérimentales (Gandin Ch.-A 2000) qui ont été effectuées entre 20 mm et 140 mm, tous les 2 cm.

La Figure III.2-8.a montre les résultats sur l'ensemble des thermocouples où on peut constater un accord satisfaisant de notre modèle avec les mesures, quelle que soit la position considérée. Une vue précise autour de la position de la TCE se trouve en Figure III.2-8.b. On peut constater que les erreurs restent faibles à cette échelle. En particulier, les dernières courbes qui se trouvent dans la zone équiaxe après la TCE (120 mm et 140 mm) présentent des écarts inférieurs à 1°C. La recalescence sur la courbe à 140 mm pour $t \approx 900$ s et qui accompagne la TCE est très bien prédite.

Les écarts les plus importants sont visibles sur la courbe 80 mm où on constate des erreurs de l'ordre de 2 °C par rapport aux mesures. Ces erreurs peuvent être attribuées aux imprécisions évoquées ci-dessus sur les propriétés de l'alliage ainsi qu'à l'absence dans notre modèle de la croissance de structures eutectiques (problème déjà soulevé dans la partie précédente sur le modèle colonnaire).

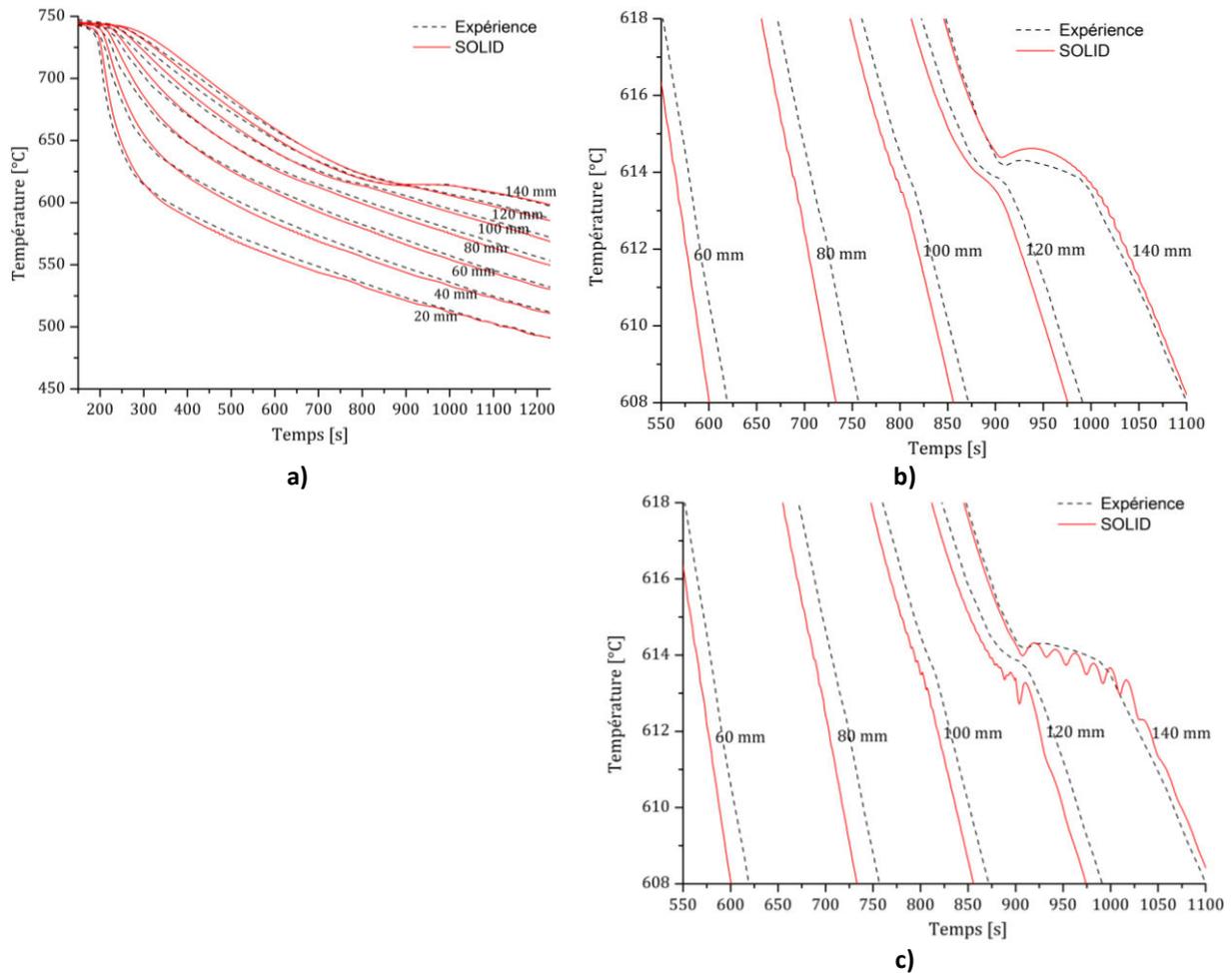


Figure III-2-8 Evolutions de la température au cours du temps. Les courbes en pointillée noir sont les mesures expérimentales des thermocouples, extraites de (Gandin Ch.-A 2000) , les courbes rouges sont les résultats du modèle. a) Résultats sur l'ensemble des thermocouples. b) Autour d'une zone plus précise centrée à 613 °C qui correspond à la température approximative de passage du front. c) Même résultats qu'en b) mais avec une loi de germination totale et totale avec $n_{max} = 4,8 \cdot 10^7 \text{ grains} \cdot \text{m}^{-3}$ et $\Delta T_N = 4,8 \text{ }^\circ\text{C}$.

Pour la distribution gaussienne de germes, on trouve un rayon final moyen des grains équiaxes dans la partie centrale du lingot d'environ 7 mm (pour des grains octaédriques) ce qui est supérieur à ce que l'on peut constater sur la macrographie Figure III.2-7.b. Le choix de $\lambda_1 = 0,5 \text{ mm}$ peut également ne pas correspondre aux valeurs expérimentales tout en gardant à l'esprit que la position de la TCE n'est quasiment pas sensible à ce paramètre tant que λ_1 est suffisamment faible par rapport à la taille de maille. Le Tableau 10 confirme que la position de la TCE n'est sensiblement modifiée que lorsque $\lambda_1 > \Delta x = 1 \text{ mm}$.

Tableau 10 Position de la TCE en fonction de l'espacement dendritique primaire entre bras colonnaires.

Espacement entre bras λ_1	$5 \cdot 10^{-5} \text{ m}$	10^{-4} m	$5 \cdot 10^{-4} \text{ m}$	10^{-3} m	$5 \cdot 10^{-3} \text{ m}$
Position de la TCE	10,5 cm	10,5 cm	10,7 cm	10,7 cm	11,6 cm

En effet, si l'espacement λ_1 est trop grand par rapport à la taille des volumes de discrétisation, l'analyse réalisée au chapitre II.3.3.a indique qu'on ne peut plus considérer le retour rapide à l'équilibre du liquide derrière le front à l'échelle du volume de discrétisation, ce qui était une des observations qui nous ont amené à proposer notre modèle avec deux liquides extragranulaires.

Rappelons que la diffusion du soluté derrière le front peut être caractérisée par le nombre de Fourier solutal $Fo_l^y = \frac{D_l \Delta x}{v_{front} \left(\frac{\lambda_1}{2}\right)^2}$.

Afin de retrouver une taille finale plus juste pour la zone centrale équiaxe, on peut choisir une loi de germination totale c'est-à-dire où tous les grains germent pour une seule surfusion de nucléation ΔT_N (distribution en Dirac des germes). Par exemple, le rayon final de 1,5 mm proposé par Beckermann *et coll.* (B. C. Martorano M.A 2003), correspond une densité de grains équiaxes $n_{eqx} \approx 4,8 \cdot 10^7 \text{ grains} \cdot \text{m}^{-3}$. La surfusion de germination est alors choisie un peu inférieure au maximum de la surfusion devant le front colonnaire (ici $\Delta T_N \approx 4,8 \text{ }^\circ\text{C}$) de sorte à faire apparaître les grains juste avant la TCE (quand la vitesse du front est maximale).

En effectuant les mêmes calculs que précédemment avec cette distribution de germes, on trouve la TCE à 11,8 cm pour le calcul de référence. De plus, comme on l'a déjà indiqué, les résultats montrent une meilleure indépendance à la taille de maille par rapport à la distribution gaussienne. Pour les maillages choisis dans le Tableau 9, on obtient ainsi une différence maximale entre les calculs de 6 mm sur la position de la TCE. Les résultats de la dépendance au maillage sont indiqués sur le Tableau 11.

Tableau 11 Position de la TCE en fonction de la taille de maille utilisée pour une distribution en Dirac des germes

Taille de maille	0,25 mm	0,5 mm	1 mm	2 mm	5 mm
Position de la TCE	12,4 cm	12,1 cm	11,8 cm	11,9 cm	12,3 cm

Par contre, comme l'ont déjà remarqué Beckermann *et coll.*, on observe alors des oscillations en température, dues à l'apparition instantanée de la densité finale de grains. Ces oscillations, d'une amplitude d'environ 1°C , sont visibles sur la Figure III.2-8.c où l'on a tracé les mêmes résultats que la Figure III.2-8.b pour la nouvelle distribution de germes.

Un autre aspect important du cas étudié concerne l'histoire thermique du front colonnaire reliée au mécanisme de TCE proposé par Gandin (Gandin Ch.-A 2000) (voir aussi la partie bibliographie pour une présentation plus détaillée).

En utilisant le modèle de front-tracking en 1D (donc uniquement une description des structures colonnaires) Gandin a pu constater qu'un maximum de la vitesse de croissance du front se situe juste avant la position de la TCE. A cette position est également associé un minimum du gradient thermique dans le liquide devant le front. Ce gradient devient alors nul, voire légèrement négatif en l'absence de grains équiaxes.

On reprend dans un premier temps cette analyse pour le calcul de référence précédent, donc en présence de structures équiaxes. Sur la Figure III.2-9.a, on a représenté en fonction de sa position

la vitesse moyenne du front ainsi que la composante verticale du gradient thermique moyen au front.

La vitesse moyenne correspond à la vitesse de passage du front dans les mailles. Puisque notre modèle considère une température uniforme dans le volume du front, on ne peut pas calculer exactement le gradient thermique devant le front. Le gradient thermique au front est alors interpolé entre la position du front et les plus proches voisins (trois points donc pour chaque composante). Pour éviter des erreurs trop importantes, on prend la valeur de ce gradient au moment de l'arrivée du front dans le volume. Avec un maillage de 1 mm on peut néanmoins s'attendre à des erreurs relativement faibles au vu de l'ordre de grandeur des gradients. Les valeurs trouvées devraient alors être légèrement supérieures car on inclut ici une partie du gradient dans la zone pâteuse.

On voit sur la Figure III.2-9.a que l'on retrouve bien les mêmes tendances que le modèle de front-tracking, même en présence de grains équiaxes. Notamment un maximum bien marqué de la vitesse de croissance du front a lieu seulement 7 mm avant la position de la TCE indiquée en bleu. Comme prévu, un minimum du gradient thermique a lieu tout de suite après et coïncide quasiment avec la TCE. Comme ici la zone de grains équiaxes est déjà bien développée en amont du front au moment de la TCE, le gradient au front reste de l'ordre de $300 \text{ K} \cdot \text{m}^{-1}$ sans s'annuler. Après la position du front et toujours au moment de la TCE, le gradient thermique dans la zone équiaxe diminue progressivement jusqu'à s'annuler effectivement à environ 15 cm du bas de lingot, dans la zone encore entièrement liquide.

Afin de vérifier que les grandeurs utilisées correspondent bien à celles du modèle de front-tracking cité ici, on a effectué le même calcul de référence mais avec la version purement colonnaire de notre modèle (voir chapitre II.3.4). La géométrie est pour l'instant gardée identique et donc on ne considère pas le retrait. Les résultats sont reportés en Figure III.2-9.b et sont comparés à ceux du modèle de front-tracking (Gandin Ch.-A 2000).

On voit que notre modèle permet de prédire correctement les mêmes tendances. Le premier maximum de vitesse observé par la méthode front-tracking a lieu pour nous plus tôt et est plus intense. L'origine de cette différence n'est pas certaine mais peut provenir du choix des conditions aux limites différentes entre les deux modèles. Le calcul du front-tracking utilise comme conditions aux limites thermiques une température imposée à 2 cm et donc ne modélise pas la partie du lingot de 0 à 2 cm. Le calcul commence alors avec un profil de température déjà établi dans le liquide, déduit des températures mesurées à $t = 250 \text{ s}$. Pour nos calculs, nous avons choisi d'utiliser les conditions aux limites de Carazonni et coll. (Carazonni T. 2012) où la température imposée à 0 cm est extrapolée à partir des mesures et le calcul commence avec la température initiale mesurée imposée dans tout le liquide.

Après quoi, les variations de la vitesse sont bien prédites et en particulier les maximums globaux des deux modèles coïncident. Par la suite, la diminution plus abrupte de la vitesse dans le cadre de notre modèle est liée à notre choix de laisser se former le second front colonnaire en haut du lingot. La position où les deux fronts se rejoignent est marquée par la ligne pointillée bleue.

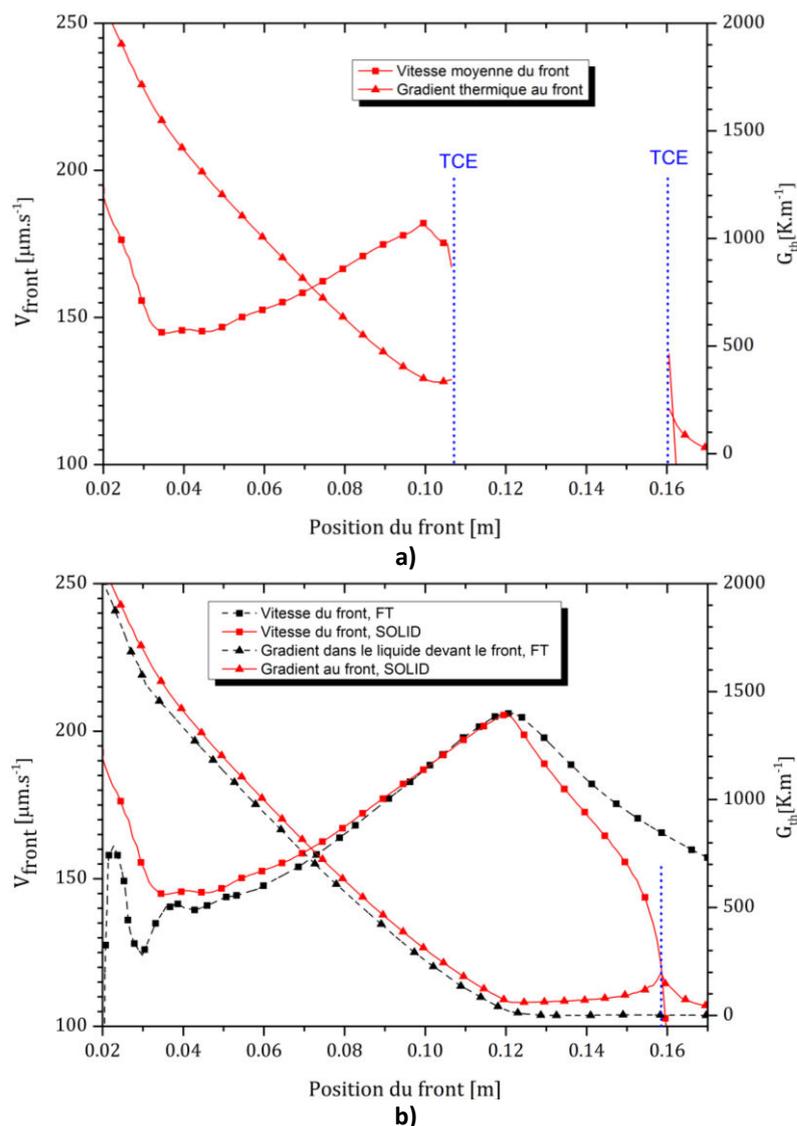


Figure III.2-9 : Vitesse de croissance et gradient thermique au front en fonction de sa position dans le lingot pour le calcul de référence avec une distribution normale des germes.

a) : Cas de notre calcul de référence avec une première TCE à 10,7 cm. Les positions des deux TCE (y compris celle en haut du lingot) sont indiquées par les lignes pointillées bleues. b) : Cas d'un calcul purement colonnaire. Les résultats du modèle SOLID (en rouge) sont comparés à ceux du modèle FT (en noir, tiré de (Gandin Ch.-A 2000)). La position marquée par le trait pointillé bleu correspond dans notre modèle à l'endroit où les deux fronts colonnaires se rencontrent.

Concernant le gradient thermique au front (comparé ici au vrai gradient devant le front pour le modèle FT), on voit que son évolution est correctement calculée par notre modèle avec des écarts faibles qui restent quasiment constants. Pour les raisons évoquées ci-dessus le gradient thermique au front reste légèrement positif, même après le maximum de la vitesse de croissance. Après quoi, la valeur du gradient est perturbée par la présence du second front colonnaire. Ceci dit, même en l'absence d'une structure colonnaire en haut du lingot, notre modèle prédit des gradients thermiques faibles mais non nuls dans le liquide au moment de la TCE.

Pour finir, nous allons discuter l'influence du mouvement du liquide, des grains et des germes sur les résultats précédents.

Expérimentalement, nous avons déjà souligné dans la bibliographie l'importance du mouvement du solide sur les transitions morphologiques entre structures équiaxes et colonnaires (Camel D. 2001), (Mirihanage W.U. 2012) . Même si toutes les expériences comparées avec et sans gravité emploient des alliages inoculés (ce qui n'est pas le cas ici) le consensus qui se dégage des expériences en solidification directionnelle est que le mouvement des particules solides favorise les structures colonnaires car il y a sédimentation des germes les plus gros et des grains équiaxes encore petits entre les structures colonnaires, ce qui inhibe leur croissance ultérieure. Le mouvement des grains et des germes auront donc tendance à inhiber la TCE.

Le même calcul de référence a donc été lancé en prenant cette fois en compte la sédimentation des grains. Comme aucune valeur des coefficients d'expansions thermique β_T et solutal β_C n'est disponible pour cet alliage, on suppose alors que la différence de densité entre solide et liquide, $\frac{\Delta\rho}{\rho_s} = 0,065$, est le seul moteur du mouvement du solide (et donc par entraînement du liquide et des germes). La loi de répartition normale des germes est discrétisée en 20 classes, pour des surfusions de germination ΔT_N^j régulièrement réparties.

La position de la TCE n'est alors quasiment pas modifiée à 10,8 cm. Les résultats en température sont globalement plus éloignés des mesures expérimentales. L'effet le plus sensible concerne la taille finale de grains. En effet, la convection du liquide dans la zone centrale équiaxe après la TCE entraîne une germination plus efficace. On trouve un rayon moyen final des grains d'environ 1,8 mm, plus proche des valeurs expérimentales. On constate également des macroségrégations chimiques dans la zone équiaxe, mais pas dans la zone colonnaire. Ces deux résultats sont montrés sur la Figure III.2-10.

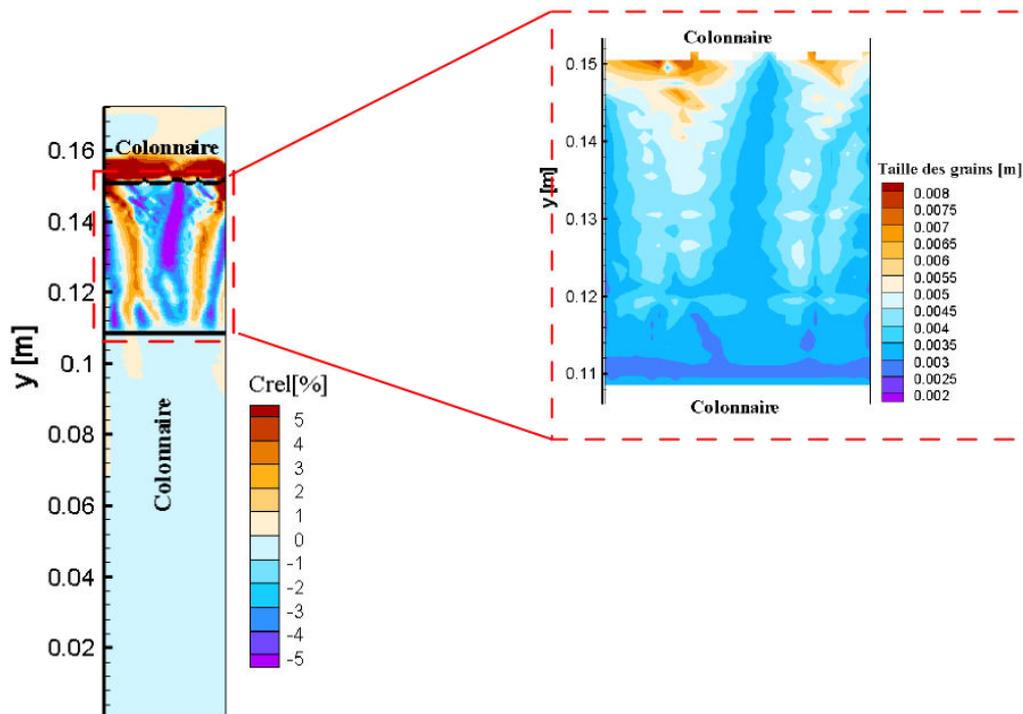


Figure III.2-10 Résultats pour le lingot Al-7%Pds Si en prenant en compte le mouvement des grains équiaxes et des germes. A gauche, la macroségrégation relative $C_{rel} = \frac{(C_m) - C_0}{C_0} \times 100$. Les lignes horizontales noires indiquent la TCE en bas et en haut du lingot. A droite, le diamètre final des grains (supposés octaédriques) dans la zone équiaxe.

Ces résultats semblent indiquer que la prise en compte du mouvement du solide ne suffit pas à expliquer les écarts qui existent encore entre le modèle et l'expérience. Notamment, on peut expliquer le fait que la position de la TCE n'est pas modifiée par le fait que la convection agit de manière significative dans la zone équiaxe seulement une fois que le front est bloqué. Avant la TCE, l'étendue et les valeurs des surfusions devant le front ne permettent pas à un nombre suffisant de grains de sédimenter pour amorcer une convection détectable. Nous sommes alors limités par notre modélisation de la déstabilisation du front par la germination hétérogène de grains, suivie du blocage mécanique « classique » du front.

Par ailleurs des calculs en prenant en compte la retassure donnent également des résultats plus éloignés des valeurs expérimentales.

Ce qui précède permet de conclure que simplement prendre en compte le mouvement du solide n'est pas suffisant pour améliorer les prédictions du modèle. Il faudrait plutôt considérer une description plus physique de la source de grains équiaxes. Comme indiqué par Gandin (Gandin Ch.-A. 2000), un critère de déstabilisation et de fragmentation brusque du front (par exemple basé sur un maximum de vitesse) permettrait, couplé au mouvement du solide, de se rapprocher des véritables phénomènes qui provoquent la transition de structure.

IV. Application à la coulée de lingots d’acier. Influence des scénarios de formation des grains équiaxes sur la TCE, la TEC et les ségrégations

Dans les chapitres précédents, nous avons détaillé le modèle de solidification mixte équiaxe-colonnaire développé dans le cadre de ce travail. Nous avons également choisi plusieurs autres modèles de la littérature ainsi qu’une expérience en laboratoire afin de valider nos résultats. Toutefois, l’objectif final de notre modèle reste l’application à la prédiction des structures et des hétérogénéités dans les systèmes de taille industrielle. Notamment, en utilisant le modèle complet, nous verrons l’impact du mouvement des grains sur la TCE, un aspect que nous n’avons pratiquement pas étudié dans les chapitres précédents.

Parmi les lingots d’acier pour lesquels nous disposons de mesures expérimentales, nous avons choisi ici de concentrer notre étude sur deux cas en particulier.

Nous étudierons en premier un lingot de 6,2 tonnes coulé par Ascométal avec une nuance 100C6. Ce lingot a été étudié expérimentalement par Thierry Mazet au cours de sa thèse (Mazet T. 1995). Par ailleurs, des résultats numériques avec l’ancien modèle SOLID ont également été présentés, où les structures colonnaires étaient simplement modélisées par une zone de grains fixes près du moule. L’objectif n’était alors pas de prédire la TCE mais plutôt la taille finale des grains équiaxes et la macroségrégation.

On a pu constater lors de notre étude bibliographique qu’aucun modèle numérique appliqué aux systèmes industriels ne considère la fragmentation comme source potentielle de grains équiaxes, mais uniquement la germination hétérogène. Or, c’est précisément dans les coulées de grande taille et non-inoculées que ce mécanisme de formation des grains est le plus probable. On va donc concentrer notre étude sur l’influence des différents scénarios : la germination hétérogène et l’injection surfacique (présentée au chapitre III.1.2).

On effectuera par la suite une analyse similaire sur un autre système de géométrie et de nuance différente : un lingot de 3,3 tonnes coulé par Aubert&Duval. Pour ce lingot, des mesures expérimentales ainsi que des résultats avec l’ancien modèle SOLID sont également disponibles (Z. M. Combeau H. 2009). Nous pourrions ainsi vérifier si les conclusions faites sur le lingot de 6,2 tonnes coulé par Ascométal sont valables dans le cas plus général de la coulée en lingot d’acier.

IV.1. Application au lingot d’acier d’Ascométal de 6,2 tonnes

IV.1.1 Présentation du cas étudié

Le premier lingot que nous allons étudier est un lingot de 6,2 tonnes et de nuance 100C6, coulé en source par Ascométal. La composition exacte de cet acier, constitué notamment de 1,01 %pds de Carbone est reportée en Annexe B. La géométrie exacte de la lingotière est donnée en Figure IV.1-2.a. On peut y voir que le lingot (qui a une section carrée) a une forme légèrement tronconique.

On choisit de simplifier quelque peu les dimensions du lingot, en accord avec les études numériques précédentes (K. A. Zaloznik M. 2010). La géométrie simplifiée est schématisée en Figure II.1-2.b où on considère une géométrie axisymétrique en 2D, et on ne modélise par symétrie qu’une moitié du domaine à étudier. La géométrie simplifiée a été déterminée afin de conserver la masse (et donc le volume) d’acier dans la lingotière. Ainsi, pour la géométrie réelle et en considérant le lingot comme une pyramide tronquée (et en négligeant le volume de réfractaire), on a $V = (0,636^2 + 0,636 \times 0,518 + 0,518^2) \times 2,67 \text{ m}^3$. Pour la géométrie simplifiée, $V = \pi \times \left(\frac{0,65^2}{2}\right) \times 2,67 \text{ m}^3$. Dans les deux cas, on obtient un volume de $0,886 \text{ m}^3$.

Sur la Figure II.1-2.b, on a également schématisé les conditions aux limites thermiques utilisées pour ce lingot. Le détail des conditions limites est reporté en Annexe D ainsi que les propriétés des matériaux constituant le moule et le réfractaire. Au niveau du réfractaire (zone appelée masselotte du lingot), il peut y avoir apport d’une poudre exothermique servant à ralentir voire empêcher pendant un certain temps la solidification en haut du lingot. On parlera de masselotte exothermique dans ce cas et de masselotte isothermique dans le cas de l’emploi d’un simple isolant.

Par défaut, on étudiera le cas d’une masselotte exothermique, ce qui est la pratique la plus courante pour ce lingot.

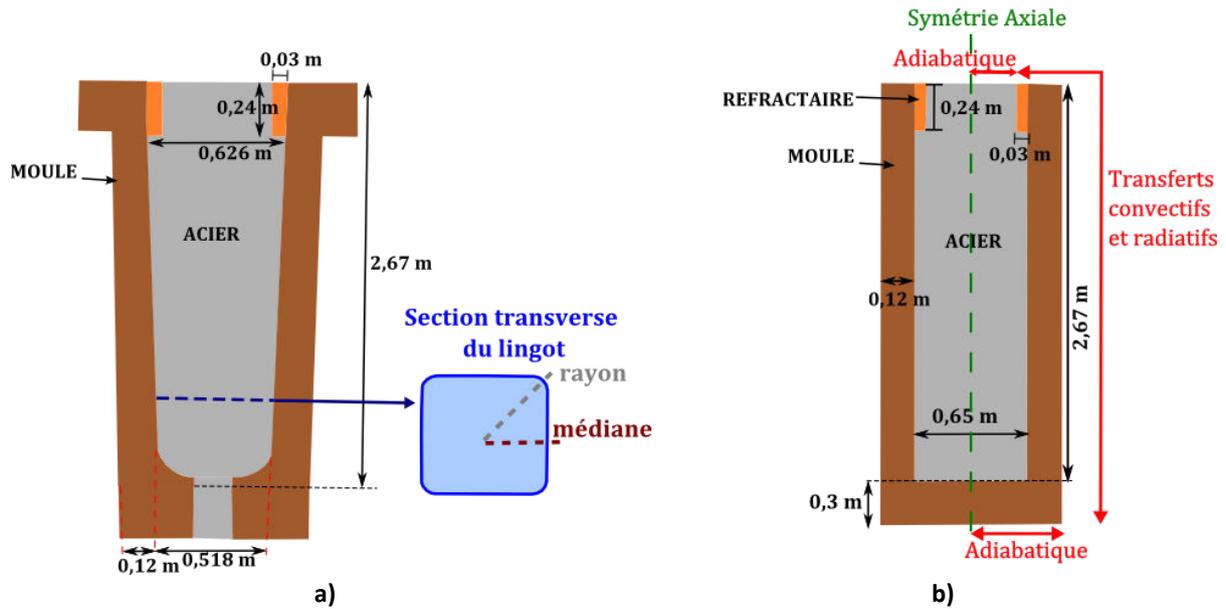


Figure IV.1-1 a) Schéma et dimensions de la lingotière réelle utilisée pour couler en source le lingot de 6,2 tonnes (remplissage par le bas). b) Schéma des dimensions simplifiées utilisées pour nos calculs. On ne modélise qu’une moitié du lingot (symétrie axiale du système) et on néglige ici l’étape de remplissage.

Sauf mention du contraire, on va également supposer que la nuance 100C6 est un alliage binaire Fe-1,01%*pds* C. La composition exacte de l’acier multiconstitué est reportée en Annexe B ainsi que les données complémentaires propres à chaque élément (pente de liquidus, coefficient de partage et coefficients de diffusion).

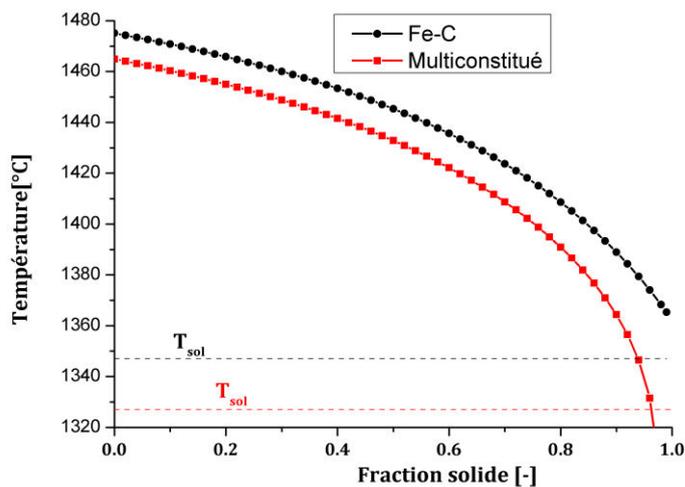


Figure IV.1-2 Comparaison des chemins de solidification et des températures de solidus entre l’alliage 100C6 multiconstitué avec l’approximation d’un alliage binaire Fe-1,01 %*pds* C.

Pour estimer, l’impact de cette hypothèse, la Figure IV.1-2 montre la comparaison entre les chemins de solidification pour l’alliage binaire et pour l’alliage multiconstitué complet. On a fait l’hypothèse que la solidification de l’alliage Fe-C suit la loi des bras de levier tandis que les autres éléments dans l’acier solidifient suivent la relation de Scheil. Le chemin de solidification de l’alliage multiconstitué est alors calculé en faisant la somme des contributions des différents éléments. On

voit que l'hypothèse entraîne une erreur qui reste faible mais cependant non-négligeable sur la majeure partie de l'intervalle de solidification. L'erreur faite sur la température de liquidus est d'environ 10 °C alors que d'après la loi des leviers, on a déjà 20 % de solide. Le calcul des températures de fin de solidification utilisées pour les aciers (C. H. Vannier I. 1993) indique des différences d'environ 20 °C (en pointillés sur la Figure IV.1-2).

Le lingot est coulé en source et est donc rempli par le bas de la lingotière. L'acier est coulé avec une surchauffe importante (entre 30°C et 70 °C) et le temps de remplissage total du lingot est de l'ordre de 10 minutes. Dans le cadre de notre modèle, on va cependant négliger la dynamique de remplissage et on va supposer que l'on part d'une situation initiale où le lingot est entièrement rempli avec un acier complètement liquide et au repos. La surchauffe initiale sera alors choisie comme étant négligeable.

Pour le lingot coulé avec une masselotte exothermique, deux études expérimentales réalisées à près de 15 ans d'intervalle ont été réalisées. Une première étude par Thierry Mazet lors de sa thèse (Mazet T. 1995) a permis d'établir, à partir de coupes macrographiques, la carte de morphologies des structures reportée en Figure IV.1-3. On peut y distinguer une zone colonnaire près du moule dont l'épaisseur d'environ 10 cm est relativement constante le long du lingot. Toutefois, cette zone disparaît au niveau du joint avec la zone de masselotte.

Dans la partie centrale et en bas du lingot, le cône de sédimentation est formé de grains équiaxes ayant une morphologie dite globulaire alors qu'en haut du lingot la partie centrale est formée de grains équiaxes ayant des morphologies plus dendritiques. La transition entre ces deux types de morphologies est plutôt brusque mais il faut bien distinguer ici ce qu'on appelle morphologie globulaire.

Sur la Figure IV.1-4, on a mis deux exemples de macrographies obtenues par le CREAS (Centre REcherche AScometal, Hagondange, France) lors de leur étude sur le même type de lingot. Ces deux coupes, situées à des hauteurs correspondant l'une à la zone globulaire et l'autre à la zone dendritique, montrent que même si la taille de grains semble plus petite et un peu plus uniforme dans le cône de sédimentation, leur morphologie reste sensiblement dendritique.

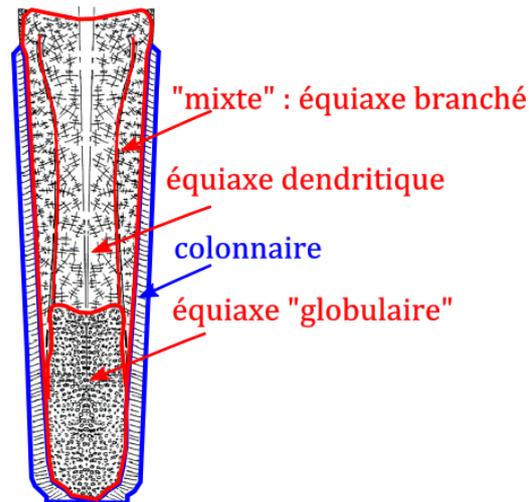


Figure IV.1-3 Schéma des structures obtenu à partir des coupes macrographiques réalisées par Thierry Mazet sur le lingot 6,2 tonnes avec masselotte exothermique. D’après (Mazet T. 1995).

On observe également une dernière zone de grains équiaxes grossiers dits « branchés », indiquée sur la Figure IV.1-3, qui est caractéristique d’une zone de transition mixte entre structures colonnaires et équiaxes (H. M. Fredriksson H. 1972). En accord avec les observations reportées dans le chapitre bibliographique, l’épaisseur de cette zone augmente de bas en haut du lingot. Néanmoins au niveau et directement en-dessous de la masselotte, cette zone semble se rétrécir voire disparaître en tête de lingot.

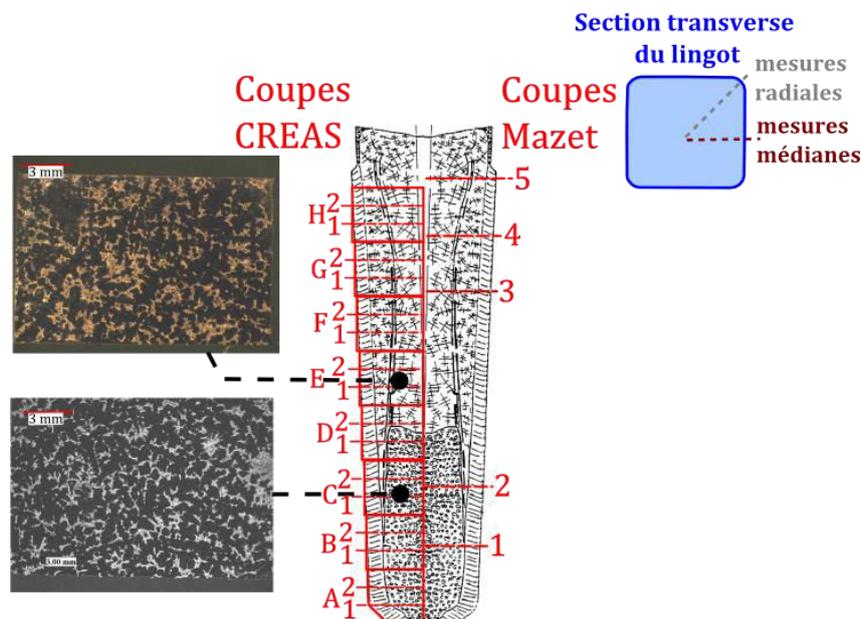


Figure IV.1-4 Positions des mesures de ségrégation dans le rayon du lingot Ascométal. A gauche, les mesures effectuées par le CREAS (Forestier R. 2008) ainsi que deux exemples de macrographie : dans le cône de sédimentation et dans la zone équiaxe dendritique. A droite, les mesures de Thierry Mazet (Mazet T. 1995) réalisées dans la largeur diagonale et médiane du lingot.

L’étude de Thierry Mazet a été notamment complétée par des mesures de compositions chimiques en carbone, chrome et soufre à l’aide d’une microsonde le long de coupes dont les positions sont schématisées sur la Figure IV.1-4 (numéros de coupes de 1 à 5). Pour chaque coupe,

deux séries de mesures sont disponibles le long de la diagonale (rayon) et le long de la médiane du lingot. La ségrégation le long de l’axe de symétrie du lingot a aussi été mesurée par Thierry Mazet.

L’étude ultérieure réalisée par le CREAS (Forestier R. 2008) sur un lingot coulé dans des conditions similaires (ainsi qu’un autre lingot coulé avec une masselotte isolante, sans réaction exothermique) a également donné lieu à une analyse macrographique et des mesures de compositions chimiques dans le lingot.

Les positions des coupes réalisées sont reportées en Figure IV.1-4. Pour chaque plaque de A à H deux séries de mesures en bas et en haut de la plaque ont été effectuées, dans la largeur médiane. On dispose ainsi d’un nombre plus conséquent de séries de mesures même si chaque série n’est constituée que de 4 à 5 points expérimentaux. La ségrégation axiale a également été mesurée.

On a placé l’ensemble des mesures de ségrégations chimiques sur des cartes dans la Figure IV.1-5. On a indiqué les positions des mesures dans le lingot et avec les valeurs correspondantes, une carte de macroségrégation en 2D a été établie.

Cependant, les valeurs ont été interpolées par triangulation et ces cartes ne sont reportées qu’à titre indicatif. Dans les chapitres suivants, on comparera donc plutôt directement les profils axiaux et radiaux.

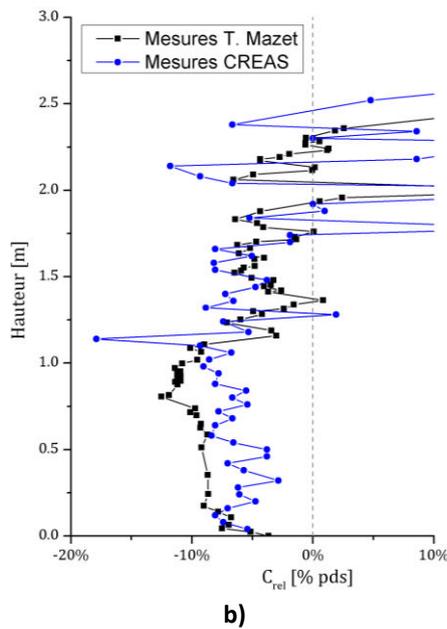
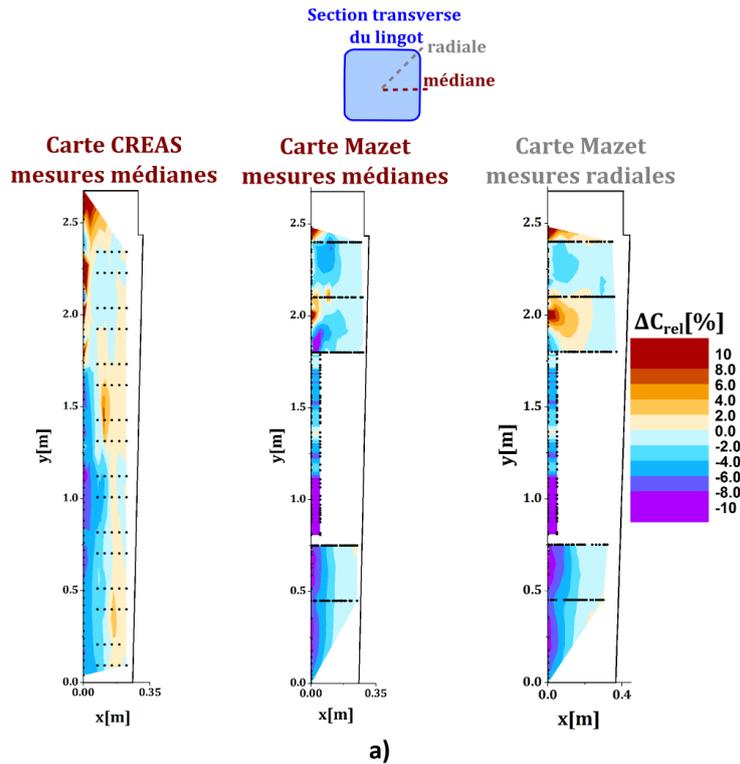


Figure IV.1-5 a) En points noirs, les positions des mesures de composition chimique en Carbone pour les trois ensembles de mesures disponibles (converties ici en composition relatives par rapport à la teneur initiale du lingot C_0). Les valeurs sont par la suite interpolées afin d’obtenir des cartes 2D de macroségrégation relative avec $\Delta C_{rel} = 100 \times \frac{C_m - C_0}{C_0} [\%]$. En b), les profils axiaux mesurés lors des deux travaux.

On remarque sur ces cartes une macroségrégation relative négative jusqu’à un peu plus des deux tiers de la hauteur du lingot. Par la suite, on trouve sur l’axe plusieurs inversions de ségrégations jusqu’à la tête du lingot où la ségrégation est fortement positive. On peut noter enfin, d’après la Figure IV.1-5.b, que les profils axiaux résultants de ces deux séries de mesures sont très proches, mis à part des « accidents » ponctuels sur le profil récemment mesuré par le CREAS.

La Figure IV.1-6.a montre l’épaisseur de la zone colonnaire mesurée en fonction de la hauteur dans le lingot pour l’étude réalisée par le CREAS (sur les masselottes exo- et isothermique). Pour la masselotte exothermique, on voit une tendance qui rejoint la carte de structure de la Figure IV.1-3 avec une zone d’épaisseur quasiment constante de 9-10 cm sur les deux tiers du lingot puis une zone d’épaisseur progressivement plus fine (jusqu’ à 7 cm) dans la zone en-dessous de la masselotte, jusqu’à disparaître vers le joint de masselotte.

L’étude du CREAS a également permis de mesurer des tailles de structures par la méthode des intercepts dans la zone équiaxe le long du lingot. Sur la Figure IV.1-6.b, on peut ainsi remarquer une variation assez faible des dimensions mesurées. On constate également des tailles de structures équiaxes plus faibles en haut du lingot en présence d’une masselotte exothermique, ce qui est contraire à la conclusion d’un argument purement thermique. Cette constatation a été reliée à la refusion du tissu dendritique sous l’effet de la poudre exothermique, qui cause le ralentissement du front de solidification tout en augmentant le nombre de germes équiaxes via le mécanisme de fragmentation (Z. M. Kumar A. 2012).

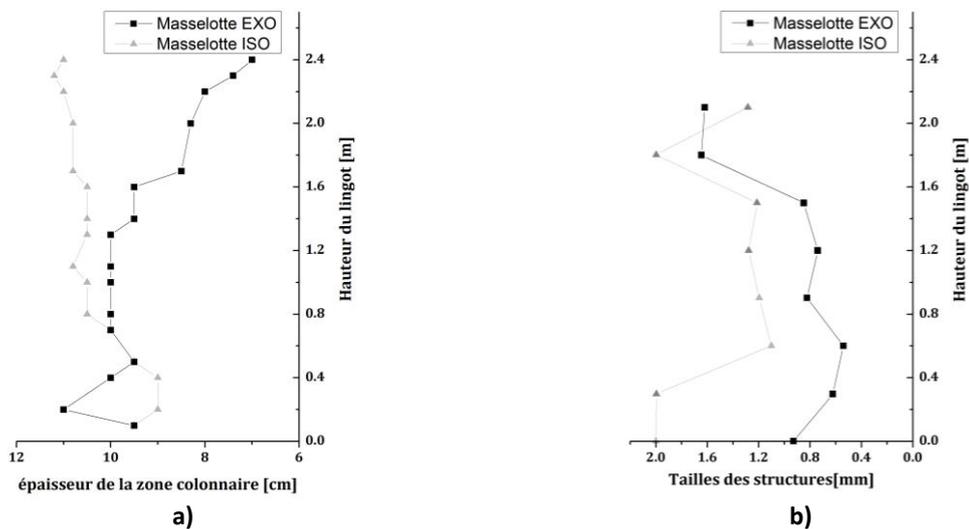


Figure IV.1-6 a) Mesure de l’épaisseur de la zone colonnaire en fonction de la hauteur pour les lingots avec et sans poudre exothermique. b) Pour les mêmes lingots, mesures des tailles de structures austénitiques dans la zone équiaxe centrale. Mesures effectuées par Ascométal CREAS (Forestier R. 2008).

Il faut cependant faire attention à ce que les tailles mesurées signifient par rapport au diamètre effectif des grains équiaxes. Dans le cône de sédimentation, où la morphologie est plus globulaire, les dimensions reportées peuvent correspondre au diamètre moyen des grains. En revanche, dans la zone de grains équiaxes dendritiques, les mesures ont plus de chance de caractériser les espacements dendritiques entre les bras secondaires des grains (Mazet T. 1995). A titre de comparaison, Thierry Mazet reporte des longueurs d’axes primaires des grains équiaxes qui atteignent entre 10 et 20 mm dans la zone équiaxe dendritique.

IV.1.2 Influence de la germination hétérogène des grains équiaxes

Dans une première partie, on va considérer que le phénomène responsable de l’apparition des grains équiaxes est uniquement la germination hétérogène dite « Big-Bang ».

Par conséquent, dans notre modèle, on va utiliser une loi d’injection volumique des grains, basée sur

des densités locales de germes et les surfusions de germination correspondantes. On va donc négliger le phénomène de fragmentation et notre modèle d’injection surfacique des germes (voir chapitre III.1.2) ne sera donc pas utilisé ici.

Les valeurs de références des grandeurs thermophysiques utilisées pour les calculs qui vont suivre sont reportées en Annexe B. Notamment, la fraction de blocage des grains équiaxes est fixée à $g_{env}^{bloc} = 0,4$. Au-dessus de cette fraction d’enveloppe limite, les grains équiaxes sont considérés comme immobiles et ils forment une zone poreuse de solide fixe, en-dessous on est dans zone libre des grains équiaxes et leur mouvement est possible. La taille caractéristique des structures pour calculer la perméabilité dans le terme de Darcy est de $500 \mu\text{m}$. L’espaceur dendritique primaire λ_1 des structures colonnaires est fixé à 10^{-3} m. Ceci est en accord avec la valeur moyenne de 1,3 mm estimée sur ce lingot au chapitre II.3.3 (cf. Figure II.3-9).

La fraction limite de grains équiaxes pour le blocage du front colonnaire (afin de déterminer si la TCE a lieu selon le mécanisme de Hunt (Hunt J.D 1984)) est fixée à $g_{Hunt} = 0,5$.

Comme on l’a déjà dit, on néglige l’étape de remplissage et on part à l’instant initial d’un lingot entièrement rempli d’acier de température uniforme. On va alors supposer que la surchauffe dans le liquide est totalement évacuée et on prend comme température initiale le liquidus de l’alliage Fe-1,01%pds C, $T_{liq}^0 = 1475 \text{ }^\circ\text{C}$. La température initiale du moule est fixée à $T_0 = 25 \text{ }^\circ\text{C}$. Au cours des coulées successives le moule s’échauffe et on peut avoir $T_0 \approx 100 \text{ }^\circ\text{C}$, mais des calculs réalisés sur ce lingot avec $T_0 = 105 \text{ }^\circ\text{C}$, ont montré un impact négligeable sur la position de la TCE et les ségrégations carbone prédites dont par la suite on conserve la valeur de $25 \text{ }^\circ\text{C}$.

Au niveau du maillage numérique, le domaine modélisé est constitué d’environ 8600 mailles de tailles irrégulières pour une taille moyenne de 1 cm. Les mailles sont plus fines dans l’acier que dans le moule et leur taille est encore réduite dans les zones de contact entre le moule et l’acier où elles mesurent 5 mm de côté. Le pas de temps varie au cours du calcul entre $\Delta t = 10^{-3}$ s en début de solidification et $\Delta t = 0,1$ s aux instants finaux. On utilise un pas de temps microscopique cinq fois plus petit que Δt (pas de temps macroscopique). Le temps de calcul moyen est alors d’environ 65 heures pour 3 heures de temps simulé.

La difficulté est maintenant de déterminer le type de loi de germination et les paramètres correspondants pour les coulées non-inoculées que l’on traite ici. Les mesures des tailles de grains sont peu nombreuses et les tailles des structures observées dans la partie centrale du lingot sont très diverses. En conséquence, il n’est pas non plus possible de se baser sur des analyses post-mortem afin de remonter à une distribution initiale de germes.

On va alors choisir dans un premier temps une loi d’injection volumique la plus simple possible. On ne considère qu’une seule classe de germes n_0 et on néglige la surfusion de nucléation, donc on a $\Delta T_n = 0$, en accord avec le phénomène de création de grains pendant le remplissage. En effet, ce type de distribution de germes (où tous les grains apparaissent au liquidus) caractérise vraisemblablement le phénomène de « Big-bang » (Chalmers B. 1963) pour lequel tous les grains sont formés durant l’étape de remplissage du lingot et ne peuvent croître que lorsque la surchauffe dans le bain liquide est évacuée. On a vu dans le chapitre I.3.2.b que dans les lingots industriels ce phénomène était considéré comme une origine potentielle du cône de sédimentation, rapidement

après le début de la solidification. Dans la suite, on va étudier si ce type de loi d’injection des grains permet de prédire la position expérimentale de la TCE et quelle est la sensibilité des résultats à la quantité initiale de germes n_0 .

La Figure IV.1-7 montre les résultats des fractions finales de grains équiaxes pour des densités initiales de germes croissantes. Le moule n’est pas représenté dans les résultats. Afin d’illustrer l’impact du mouvement des grains équiaxes sur la répartition des structures, les cartes de gauche représentent les résultats quand on suppose l’ensemble du solide ainsi que les germes fixes mais en considérant le mouvement du liquide tandis que les cartes de droite représentent les résultats avec le mouvement des structures équiaxes et des germes. Les lignes noires symbolisent la position finale de la TCE. Les structures colonnaires qui ont pour origine une TEC ont été hachurées et bordées de lignes blanches. La fraction de grains équiaxes g_{eqx}^{tot} est logiquement égale à 1 dans la partie équiaxe centrale des lingots (zones en rouge sur la figure). Dans les parties mixtes colonnaire/équiaxe, la fraction g_{eqx}^{tot} est calculée par la relation 3.30.

En l’absence de mouvement du solide, l’étendue de la zone colonnaire devient négligeable lorsque n_0 devient supérieure à $10^7 \text{ nucl. m}^{-3}$ et par conséquent l’ensemble du lingot a une structure équiaxe. Pour des densités de germes plus faibles, l’épaisseur de la zone colonnaire est globalement uniforme. On remarque une forte influence du paramètre n_0 sur la TCE. Des études paramétriques récentes sur un autre lingot d’acier indiquent également un effet de n_0 mais pas aussi marqué que les résultats de la Figure IV.1-7 (W. M. Li J. 2014). Pour $n_0 = 10^5 \text{ nucl. m}^{-3}$, l’épaisseur moyenne de la zone colonnaire est d’une dizaine de centimètres. Ceci correspond à peu près à la valeur expérimentalement mesurée mais la taille moyenne des grains équiaxes est alors de 4 cm dans tout le lingot, ce qui est très éloigné des mesures notamment dans le cône de sédimentation (cf. Figure IV.1-6 où le diamètre des structures peut être inférieur au millimètre). De plus, la morphologie des grains équiaxes est uniforme et fortement dendritique (cf. Figure IV.1-8), contrairement au lingot expérimental. Dans le lingot expérimental (cf. Figure IV.1-3) on a clairement une transition globulaire équiaxe à environ 1/3 du pied du lingot. En fait, en l’absence de mouvement des grains équiaxes, leur morphologie (qui est calculée comme la fraction interne de solide lorsque la fraction locale d’enveloppe atteint g_{env}^{bloc}) suit les isothermes dans le lingot, comme on le remarque sur la Figure IV.1-8 à partir de $n_0 = 10^6 \text{ grains. m}^{-3}$. La morphologie calculée des grains équiaxes est de plus en plus globulaire depuis le moule vers la partie centrale du lingot.

L’épaisseur de la zone colonnaire est légèrement plus faible en bas du lingot. Ceci s’explique par les mouvements de convection du liquide. Dès le début de la solidification, le liquide plus froid et plus lourd se retrouve en pied du lingot. La température du liquide dans cette zone étant abaissée, la surfusion y est plus importante et la croissance des grains équiaxes est alors favorisée. Par la suite, le front est bloqué progressivement de bas en haut du lingot. Autour de la zone du joint de la masselotte, on remarque également une forme en bosse du front. Ceci s’explique par les conditions thermiques complexes qui existent dans la masselotte du lingot. A cet endroit, du liquide plus froid et enrichi rejeté lors de l’avancée du front se retrouve en contact avec le liquide plus chaud et moins enrichi provenant du cœur du lingot. En conséquence, des gradients thermiques plus importants se mettent en place et la croissance colonnaire est localement favorisée. Enfin, on note qu’aucune TEC n’est observée sans mouvement du solide, car la distribution en densité de grains reste constante après leur germination.

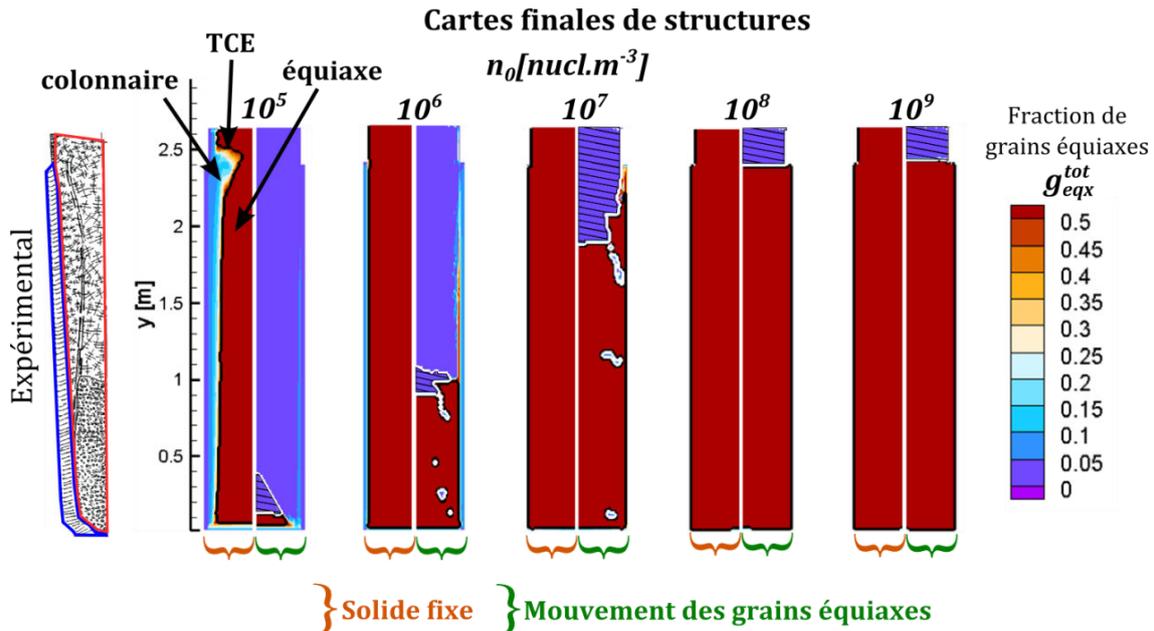


Figure IV.1-7 Cartes finales de fraction de grains équiaxes. Les moitiés gauches sont les résultats où l'ensemble du solide et les germes ont fixes, les moitiés droites en prenant en compte le mouvement des grains équiaxes et des germes. Les densités utilisées correspondent, par ordre croissant à des diamètres finaux des grains équiaxes de 4cm, 2cm, 8 mm, 4mm et 2 mm.

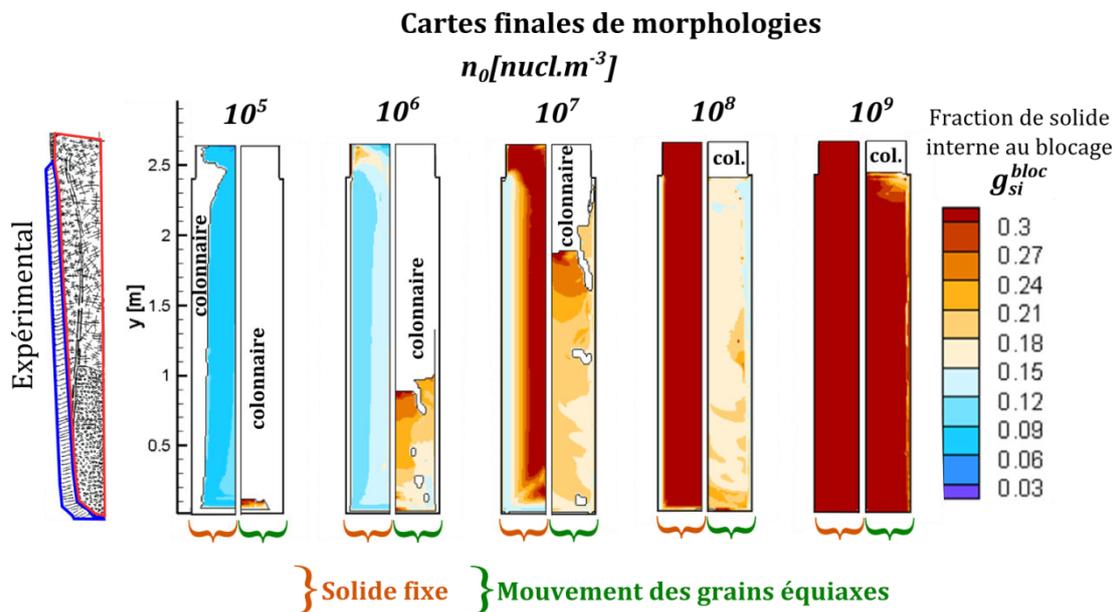


Figure IV.1-8 Cartes finales de morphologies, représentées par la fraction de solide interne au moment du blocage. La partie colonnaire n'est pas représenté, car sa morphologie calculée et toujours fortement cellulaire.

La répartition des structures avec *mouvement des grains équiaxes* est très différente. Pour $n_0 = 10^5 \text{ nucl.m}^{-3}$, le lingot est presque entièrement colonnaire, tous les grains ayant sédimenté dans une zone d'étendue très réduite en bas du lingot. Pour des densités initiales de germes plus importantes, on s'aperçoit que la partie inférieure du lingot devient progressivement entièrement équiaxe tandis que le haut du lingot est quasiment vide de grains équiaxes et les structures sont entièrement colonnaires. On a ainsi une TCE verticale qui sépare un pied de lingot entièrement

équiaxe et une partie supérieure entièrement colonnaire. Lorsque n_0 augmente encore, la zone entièrement équiaxe devient plus importante mais le haut du lingot reste toujours colonnaire. Cette séparation très nette verticale des structures colonnaires et équiaxes ne correspond pas à ce qui est observé expérimentalement où la zone colonnaire se rapproche plus des résultats obtenus sans mouvement des grains équiaxes et son épaisseur est presque constante sur la majeure partie du lingot. En On remarque également que les structures colonnaires dans la partie haute proviennent principalement d’une TEC quand n_0 atteint $10^7 \text{ grains.m}^{-3}$. Ceci semble indiquer que l’ensemble des grains présents dans tout le liquide sédimentent rapidement et forment une zone de grains fixes dans le bas du lingot, laissant une zone entièrement liquide et vide de germes au-dessus. On peut noter qu’il est possible que notre modèle exagère la sédimentation des grains équiaxes car on néglige l’interaction des grains entre eux lors de leur mouvement. Par ailleurs, la production de grains par refusion (notamment dans la masselotte) n’est également pas prise en compte car il s’agit alors d’une production de grains par fragmentation après le remplissage, ce qui n’est pas considéré dans le cadre du modèle d’injection volumique.

La Figure IV.1-8 représente les cartes correspondantes de morphologies. Dans le cadre de notre modèle, la morphologie finale des grains équiaxe est estimée en prenant la valeur de la fraction interne de solide g_{si} au moment du blocage des grains (ou lorsque $g_{env}^{eqx} \geq g_{env}^{bloc}$). Les morphologies des structures colonnaires ne sont pas indiquées car il nous a semblé que notre modèle de représentation des colonnaires ne permet pas de donner une idée assez fiable des morphologies finales des bras primaires colonnaires. Avec la valeur choisie de $\lambda_1 = 1 \text{ mm}$, ce qui correspond à une densité de sous-structures $n_{col}^{final} \approx 10^9 \text{ grains.m}^{-3}$, on trouve alors une morphologie presque totalement cellulaire (les sous-structures sont globulaires).

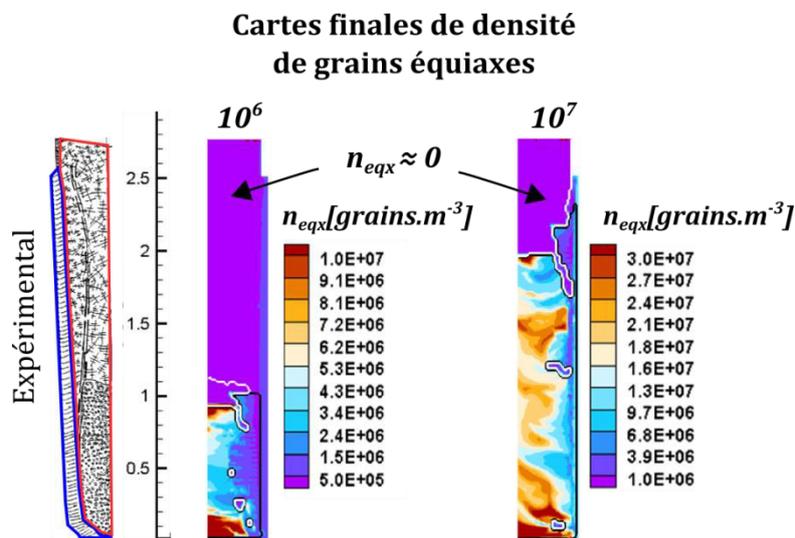


Figure IV.1-9 Cartes finales de densités de grains équiaxes pour deux densités initiales de germes $n_0 [\text{nucl.m}^{-3}]$.

Tout d’abord, on remarque une forte influence du mouvement des grains sur leur morphologie. Pour $n_0 \leq 10^6 \text{ nucl.m}^{-3}$, les grains équiaxes sont plus globulaires avec mouvement du solide, alors que cette tendance s’inverse pour $n_0 > 10^6 \text{ nucl.m}^{-3}$. Pour $n_0 = 10^9 \text{ nucl.m}^{-3}$, l’ensemble des grains du lingot possèdent une morphologie globulaire avec ou sans mouvement du solide. Avec mouvement des grains équiaxes, les calculs prédisent une transition de morphologie dans la zone équiaxe, mais celle-ci semble inversée par rapport à l’expérience. Ainsi, les grains les

plus globulaires sont en haut de la zone de sédimentation alors que, les grains sont relativement plus dendritiques en bas du lingot. Ceci peut être corrélé à une zone de plus forte densité de grains qui sédimentent en dernier en haut du lingot, comme on peut le constater sur la Figure IV.1-8. Ainsi, juste en-dessous de la zone où la Transition Equiaxe Colonnaire a eu lieu, la densité finale de grains équiaxes est localement élevée. Cette accumulation de grains est accompagnée d’une inversion de la ségrégation chimique comme on peut le voir sur le profil de ségrégation axiale en carbone pour $n_0 = 10^7 \text{nucl. m}^{-3}$ sur la Figure IV.1-10.a.

Les résultats *en solide fixe* montrent des morphologies très éloignées de la réalité avec des fractions de solide interne de plus en plus importante du moule vers le cœur, le long de lignes qui suivent globalement la forme des isothermes dans le lingot.

La Figure IV.1-10.a montre les résultats de la ségrégation axiale pour les plus fortes valeurs de n_0 (avec mouvement des grains). Les structures correspondantes sont alors majoritairement équiaxes, sauf en haut du lingot. A titre de comparaison, on a mis en pointillées les résultats pour un calcul en équiaxe pur (sans structures colonnaires).

Sur plus de la moitié inférieure du lingot, tous les calculs prédisent des résultats très similaires avec une ségrégation négative mais globalement moins intense que celle mesurée. Dans la partie supérieure, on remarque une ou plusieurs inversions de la ségrégation et des différences entre les calculs. Ces différences peuvent s’expliquer par la mise en place de la structures colonnaire dans la partie supérieure qui modifie la thermique près de la masselotte ainsi que la mise en place des grains équiaxes.

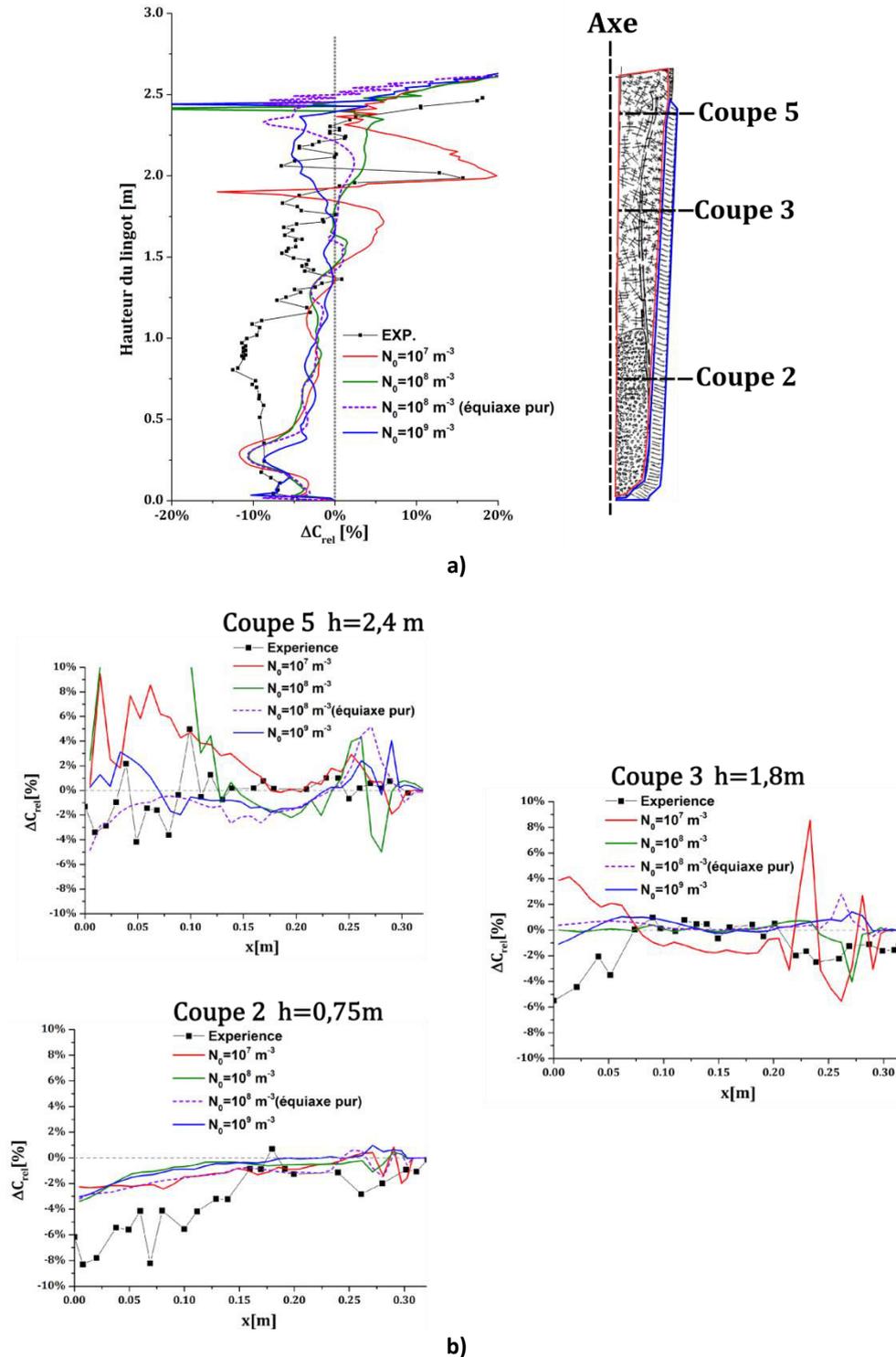


Figure IV.1-10 a) Résultats de ségrégation axiale pour les plus fortes valeurs de n_0 [nucl. m^{-3}]. L'expérience (EXP.) correspond aux mesures de Thierry Mazet (Mazet T. 1995). b) Résultats de ségrégation radiales pour les trois coupes schématisées sur la figure a). Les mesures sont celles le long de la diagonale du lingot.

Pour $n_0 = 10^9 grains.m^{-3}$, on remarque une inversion vers une ségrégation négative à partir de $h \approx 2 m$. Cette ségrégation négative peut s'expliquer par l'existence d'un « point chaud » à cette hauteur, phénomène qui a déjà été observé lors de la modélisation d'autres lingots d'acier (K. A. Combeau H. 2009). On se retrouve dans une situation où la direction de l'écoulement (qui au centre du lingot présenté ici est vers le bas au centre du lingot) va se retrouver localement opposée à celle

du gradient thermique. Ceci entraîne alors une ségrégation négative à cette position, en accord avec le modèle proposé par Flemings (N. G. Flemings M.C 1967) (voir chapitre bibliographique) car on peut écrire, quand le solide est fixe et en négligeant le retrait : $\frac{\partial C_m}{\partial t} = -\frac{1}{m_l} g_l \cdot \vec{v}_l \cdot \vec{\nabla} T$. Pour les autres valeurs de n_0 , l’écoulement est à cet endroit dans le même sens que le gradient thermique et donc la ségrégation résultante est positive. Pour $n_0 = 10^7 \text{nucl. m}^{-3}$, le passage par une ségrégation négative puis positive est reliée à la sédimentation en haut de la zone équiaxe de grains plus globulaire, ce qui est visible sur la Figure IV.1-8.

Les tendances évoquées ci-dessus se retrouvent également dans le volume du lingot. En Figure IV.1-10.b, on a reporté les profils radiaux de macroségrégation pour trois coupes situées le long des structures caractéristiques du lingot. On peut y voir qu’en haut du lingot (coupe 5) les résultats possèdent les différences les plus importantes et les calculs donnent des profils quasiment semblables dans le cône de sédimentation (coupe 2), tout en sous-estimant l’intensité de la ségrégation négative mesurée. Il est intéressant de noter que même pour la quantité de germes la plus élevée ($n_0 = 10^9 \text{[nucl. m}^{-3}\text{]})$ pour laquelle le lingot est entièrement équiaxe et de morphologie globulaire, on ne parvient pas à retrouver une ségrégation suffisamment négative au bas du lingot. Cet effet a été analysé par Combeau et coll. (K. A. Combeau H. 2009). Il provient du fait que pour des grains globulaires et nombreux, la vitesse relative entre solide et liquide devient négligeable. Par conséquent, la ségrégation en bas du lingot n’est plus contrôlée par la sédimentation des grains mais par le mouvement du liquide extragranulaire.

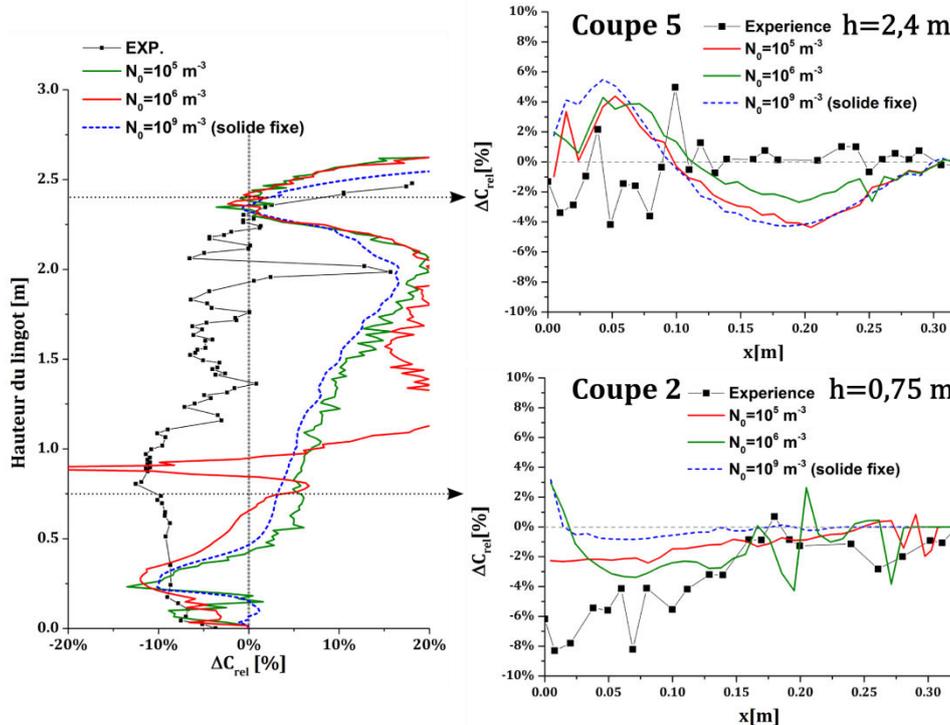


Figure IV.1-11 Résultats de ségrégation axiale et radiales pour les plus faibles valeurs de n_0 et pour un cas où le solide est fixe. L’expérience (EXP.) correspond aux mesures de Thierry Mazet (Mazet T. 1995).

Dans le cas où le lingot est majoritairement colonnaire, on a représenté en Figure IV.1-11 les mêmes profils de ségrégation, en se limitant cette fois à deux coupes radiales en bas et en haut du

lingot. On peut constater pour $n_0 = 10^6 \text{ nucl.m}^{-3}$ une inversion de ségrégation similaire à la précédente pour $n_0 = 10^7 \text{ nucl.m}^{-3}$ due à l’accumulation de grains plus globulaires en haut de la zone équiaxe. Sur le reste du domaine, les calculs donnent des résultats similaires à un calcul en solide fixe pour $n_0 = 10^9 \text{ nucl.m}^{-3}$ pour lequel le lingot a une structure entièrement équiaxe. Notamment, on remarque des résultats très similaires entre le calcul où le lingot peut être considéré comme entièrement colonnaire ($n_0 = 10^5 \text{ nucl.m}^{-3}$) et le calcul en solide fixe équiaxe. Ce résultat avait déjà été remarqué par Vannier sur le même lingot (Vannier I. 1995).

L’écart entre les ségrégations mesurées et prédites peut être résumé sur la Figure IV.1-12 qui compare les cartes de ségrégation en carbone pour deux des cartes expérimentales de la Figure IV.1-5 et pour deux densités initiales de germes différentes.

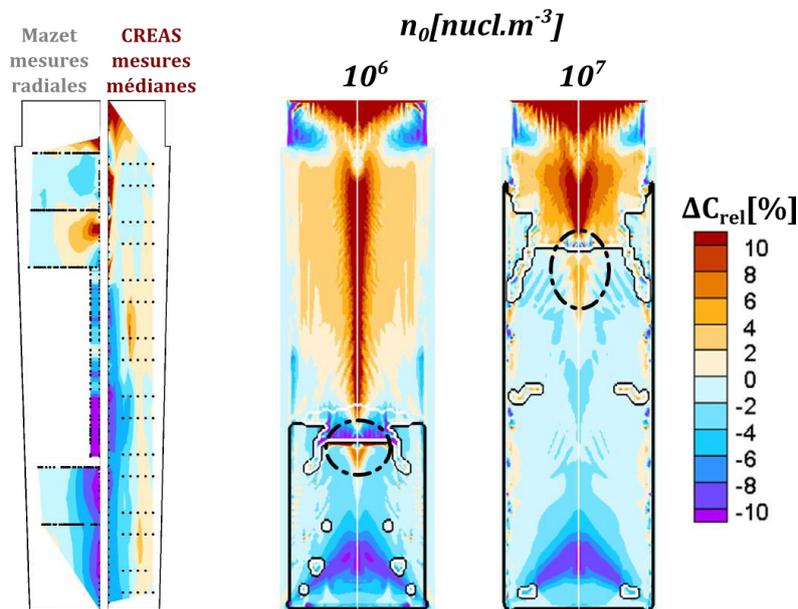


Figure IV.1-12 Cartes expérimentales de ségrégation en carbone (à gauche) et résultats des calculs pour $n_0 = 10^5$ et 10^6 $[\text{nucl.m}^{-3}]$. On a entouré sur les résultats l’inversion de ségrégation en haut de la zone de sédimentation.

On remarque sur cette figure l’inversion de ségrégation qui a lieu pour les calculs en haut de la zone de sédimentation des grains équiaxes, cette zone est entourée en pointillés. Dans la zone colonnaire, la ségrégation prédite est largement positive, ce qui ne correspond pas à l’expérience où les deux tiers du lingot montrent une ségrégation globalement négative. La ségrégation négative dans les calculs est également plus intense en pied de lingot mais son intensité diminue rapidement et elle est plus faible que l’expérience dans le reste du cône de sédimentation.

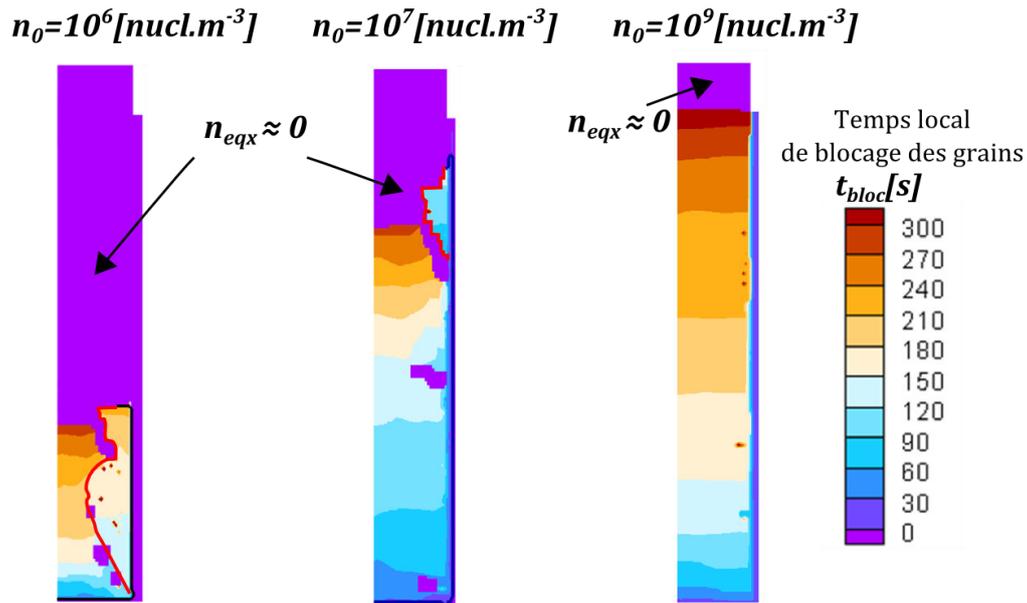


Figure IV.1-13 Temps de blocage des grains dans la zone équiaxe (lorsque localement $g_{\text{env}}^{\text{eqx}} \geq g_{\text{env}}^{\text{bloc}}$) pour $n_0 = 10^6$ et $n_0 = 10^7 \text{ grains.m}^{-3}$.

Afin de mieux comprendre la mise en place des structures dans le cas de la germination volumique, la Figure IV.1-13 montre le temps de blocage local des grains équiaxes pour $n_0 = 10^6 \text{ grains.m}^{-3}$ et 10^7 nucl.m^{-3} . Le temps de blocage signifie ici le temps après le début de la solidification où localement la fraction de grains équiaxes dépasse $g_{\text{env}}^{\text{bloc}}$ et on considère donc qu'ils deviennent immobiles, voir la Figure III.1-2. Ce temps est fixé à 0 dans les zones colonnaires car on suppose qu'elles sont déjà fixes.

On peut voir que les grains équiaxes croissent et sédimentent pour former rapidement une zone de grains bloquée tandis que le reste du lingot est pratiquement vide de grains. Ainsi, quel que soit la valeur de n_0 choisie, la zone de grains équiaxes fixes centrale se forme en 5 minutes ou moins après le début de la solidification.

On remarque sur la Figure IV.1-13 que la formation de la zone de grains équiaxes bloqués est plus rapide juste devant le front colonnaire par rapport à la partie plus centrale du lingot qui se remplit de grains équiaxes plus tard. Ceci est symbolisé sur la figure pour $n_0 = 10^6 \text{ grains.m}^{-3}$ par un trait rouge qui délimite la zone de sédimentation préférentielle. Ce phénomène est surtout visible pour $n_0 = 10^6 \text{ nucl.m}^{-3}$ et on a mis en évidence par une ligne rouge la séparation entre les deux zones sur la Figure IV.1-13. La raison expliquant la formation des deux zones de blocage est visible sur la Figure IV.1-14 pour le cas $n_0 = 10^6 \text{ nucl.m}^{-3}$. On peut voir à $t = 120 \text{ s}$ que la sédimentation se fait principalement le long du front colonnaire où les grains ont les vitesses les plus importantes. Une zone de grains équiaxes fixes a déjà commencé à se former au bas du lingot. Déjà, une grande partie des germes dans le liquide a germé car la plupart du liquide possède une surfusion non-négligeable. A $t = 160 \text{ s}$, le développement de la zone de grains bloqués se poursuit mais cette fois on voit nettement que la croissance de cette zone est nettement plus rapide juste devant le front colonnaire car c'est là que les grains sédimentent principalement après avoir chu le long du front colonnaire depuis le haut du lingot. Ainsi, on se retrouve à $t = 160 \text{ s}$ et $t = 240 \text{ s}$ avec une forme de « marche d'escalier » dans la zone de grains équiaxes fixes car elle a cru plus rapidement juste devant le front que vers le centre du lingot. On voit également qu'à $t = 240 \text{ s}$, le liquide dans le

lingot est entièrement vide de germes et donc il n’existe plus de sources de grains équiaxes et le reste du domaine sera donc colonnaire.

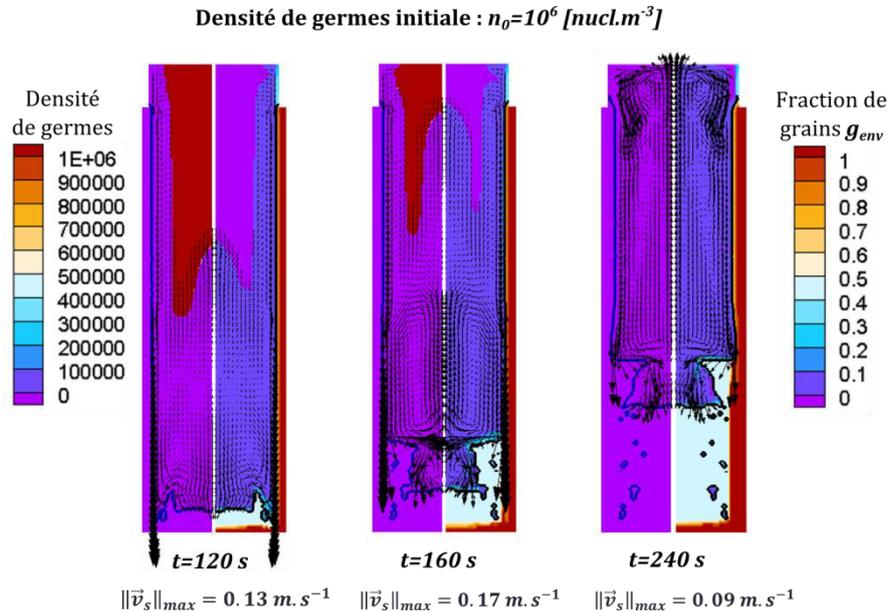


Figure IV.1-14 Les cartes de gauches indiquent les densités de germes restantes dans le liquide. Les cartes de droite indiquent la fraction totale de grains (colonnaire et équiaxe). Sur toutes les cartes, la ligne épaisse montre la position de la zone de grains bloqués et les vecteurs symbolisent la vitesse du solide.

Les valeurs maximales des vitesses des grains dans le liquide devant le front sont élevées, de l’ordre de 10 cm.s^{-1} , ce qui est probablement plus élevé que la vitesse réelle. Ceci est à relier au modèle simplifié de mouvement du solide (voir Annexe A) où la vitesse du solide est déduite explicitement de la vitesse du liquide sans tenir compte des effets d’inertie ou de la viscosité apparente de l’écoulement diphasique.

Des calculs en utilisant plusieurs classes de germes, par exemple en utilisant une fonction donnant la distribution des tailles de germes (Rappaz M. 1989), donnent qualitativement les mêmes résultats. On présente un exemple en Figure IV.1-15. Pour ce calcul on a choisi une répartition gaussienne des classes de germes avec $n_{max} = 2.10^6 \text{ nucl. m}^{-3}$, $\Delta T_N = 5 \text{ K}$ pour la normale de la distribution et $\Delta T_\sigma = 2 \text{ K}$ pour l’écart-type. La distribution obtenue a par la suite été discrétisée en dix classes discrètes réparties régulièrement en termes de surfusions de germination. Le mouvement des germes a été pris en compte.

On remarque sur la Figure IV.1-15 la même répartition très inégale des structures colonnaire avec une longueur de colonnaire d’environ 7 cm en bas du lingot et une transition brusque vers une solidification entièrement colonnaire vers $h = 1,25 \text{ m}$ à partir du pied. La carte de densité finale de grains équiaxes permet de constater que la mise en place des structures se fait de manière similaire à celle vue précédemment pour une seule classe de germe. La majeure partie des germes disponibles forme ainsi relativement rapidement (en environ 500 secondes) des grains et alimentent la zone de sédimentation en bas du lingot. Par la suite, la source de germes est quasiment épuisée. Seuls certains grains se concentrent en fin de solidification, visibles sur l’axe et en haut du lingot. Par contre, au sein de la structure colonnaire, le nombre de grains équiaxes est quasiment négligeable,

sauf près du moule.

La macroségrégation, reportée sur la carte de gauche, est également similaire aux résultats précédents. Notamment, on observe une large ségrégation positive centrale dans la zone occupée par les structures colonnaires.

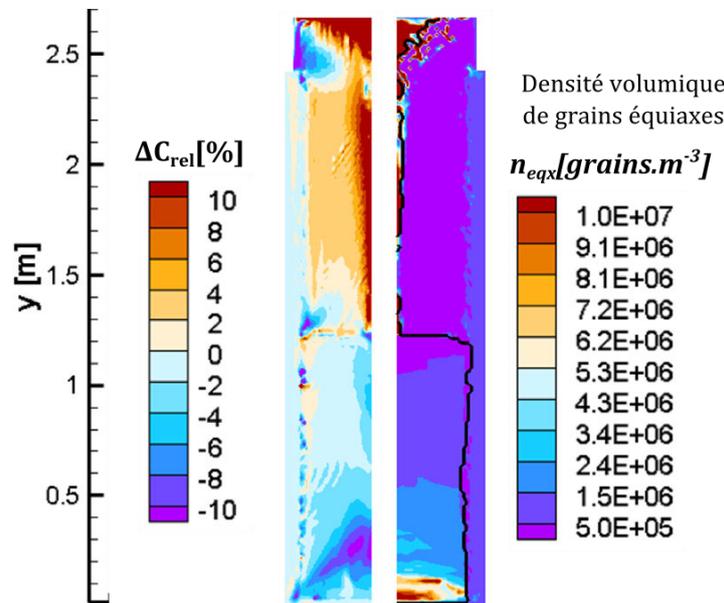


Figure IV.1-15 Résultats pour $n_{max} = 2.10^6 \text{ nucl. m}^{-3}$, $\Delta T_N = 5 \text{ K}$ et $\Delta T_\sigma = 2 \text{ K}$. A gauche, la macroségrégation finale (la TCE n’y est pas représentée). A droite, la carte de densités finales de grains équiaxes. La ligne noire représente la position finale du front (TCE).

Par ailleurs, les trois paramètres d’un tel modèle de germination sont généralement déduits des tailles finales de grains ou de la distribution mesurée des inoculants, si cette méthode est applicable. On a déjà souligné la complexité pour déterminer une taille de grains moyenne. On a également mentionné que les alliages étudiés ici sont non-inoculés. Par conséquent, modéliser la source des grains équiaxes via différentes classes de germes semble ne pas correspondre à la physique des phénomènes en jeu. Il faut de plus remarquer le coût numérique plus important nécessaire pour déterminer la valeur des trois paramètres.

En conclusion de cette première étude, on constate que dans les alliages non-inoculés tels que ceux présentés ici le phénomène de germination « Big-Bang » modélisé par la germination d’une classe de grains lorsque la surfusion est suffisante ne permet pas d’expliquer la mise en place des structures telles que constatées expérimentalement. Par conséquent, la transition de morphologie dans la zone équiaxe centrale n’est pas non plus bien décrite. En l’absence de mouvement du solide (et des germes), l’épaisseur finale de la zone colonnaire est plus uniforme sur la longueur du lingot, ce qui se rapproche plus de l’expérience. Par contre, les morphologies et les macroségrégations prédites sont éloignées de la réalité car on ne décrit pas la physique de la sédimentation des grains qui, on l’a vu, a lieu rapidement après le début de la solidification.

IV.1.3 Influence de l’injection surfacique des grains équiaxes

Dans la partie précédente, on a vu que la seule germination hétérogène ne permet pas d’expliquer la mise en place des structures dans le lingot industriel étudié. On a déjà évoqué dans la

partie bibliographique l’importance du phénomène de fragmentation comme source de grains équiaxes dans les systèmes étudiés ici. En utilisant le modèle d’injection surfacique décrit dans le chapitre III.1.2, on va donc étudier l’influence de la création des grains équiaxes à partir du tissu dendritique colonnaire sur les résultats précédents. Dans un premier temps, on va négliger toutes autres sources de grains équiaxes. En conséquence, on ne considère pas dans la suite la germination hétérogène et donc dans le cadre du modèle il n’y a aucune injection volumique de grains. On va de plus utiliser une densité de flux de fragments homogène pour tout le front colonnaire.

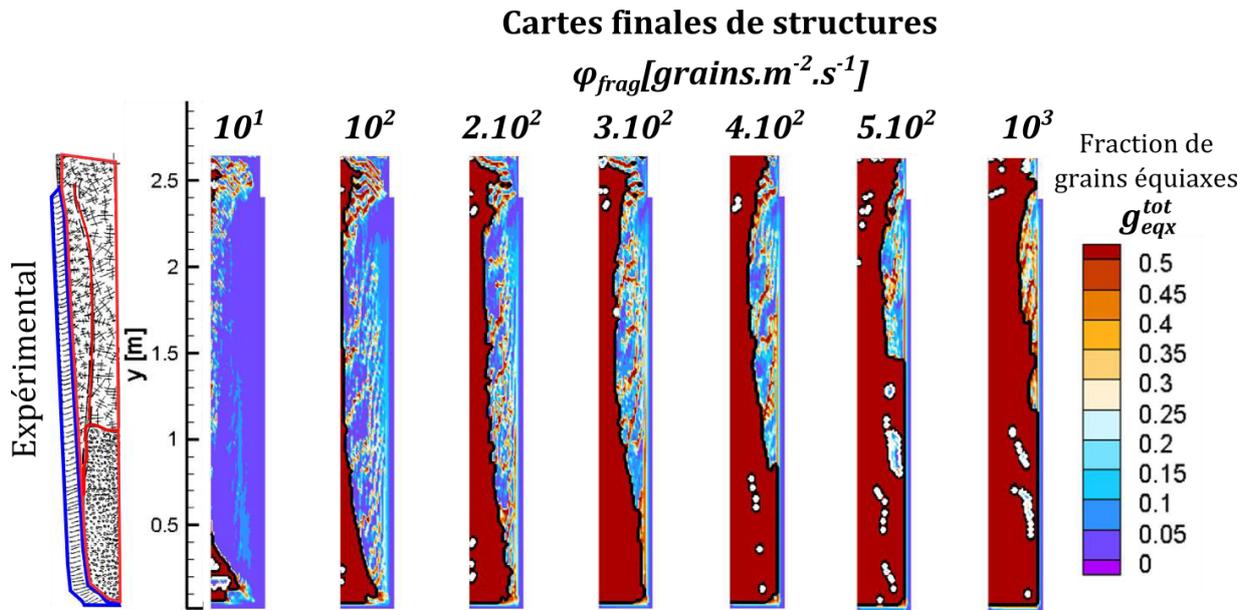


Figure IV.1-16 Cartes finales de fraction de grains équiaxes pour différents flux surfaciques d’injection des grains et en prenant en compte le mouvement des grains équiaxes.

La Figure IV.1-16 montre les résultats des fractions finales de grains équiaxes pour des flux croissants d’injection surfacique devant le front colonnaire. On remarque cette fois que la séparation des structures est différente que dans le cas d’une germination hétérogène des grains équiaxes. Notamment à partir de $\varphi_{frag} = 2.10^2 \text{ grains}.m^{-2}.s^{-1}$, le haut du lingot n’est plus entièrement occupé par les structures colonnaires. Pour des valeurs plus importantes de φ_{frag} , la zone colonnaire en haut du lingot est de moins en moins épaisse. On remarque de plus que si le front n’est pas considéré comme bloqué, les fractions de grains équiaxes dans les zones colonnaires ne sont plus négligeables, ce qui indique une structure nettement plus mixte que précédemment.

Cartes finales de structures (solide fixe)

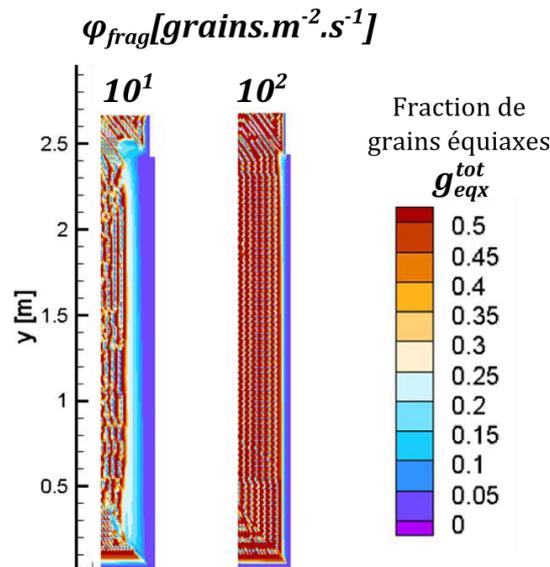


Figure IV.1-17 Cartes finales de fraction de grains équiaxes pour différents flux surfaciques d’injection des grains et en l’absence de mouvement du solide.

On peut noter qu’en l’absence de mouvement du solide (comme précédemment avec l’injection volumique de grains), le modèle d’injection surfacique fournit des résultats très éloignés des observations expérimentales. On a mis sur la Figure IV.1-17 des exemples de résultats obtenus. On y voit qu’en prenant en compte notre modèle de Transition Equiaxe-Colonnaire, on observe des alternances de bandes équiaxes et colonnaires dans le lingot qui correspondent à la prédiction de TCE et de TEC successives. Les grains équiaxes étant injectés dans le liquide devant le front colonnaire, ils croissent juste devant le front jusqu’à ce qu’ils bloquent éventuellement les structures colonnaires. Puisqu’on ne considère pas ici la fragmentation des structures équiaxes elles-mêmes, les zones plus centrales du lingot restent entièrement liquides sans présence de grains ou de germes équiaxes. A partir de là, notre modèle de TEC déclenche la formation de structures colonnaires à partir de la zone de grains équiaxes la plus centrale (au contact du liquide dans le reste du lingot). Ces phénomènes se reproduisent en succession et on obtient ainsi la carte de structures de la Figure IV.1-17. C’est pourquoi dans la suite, on prendra toujours en compte le mouvement des grains équiaxes.

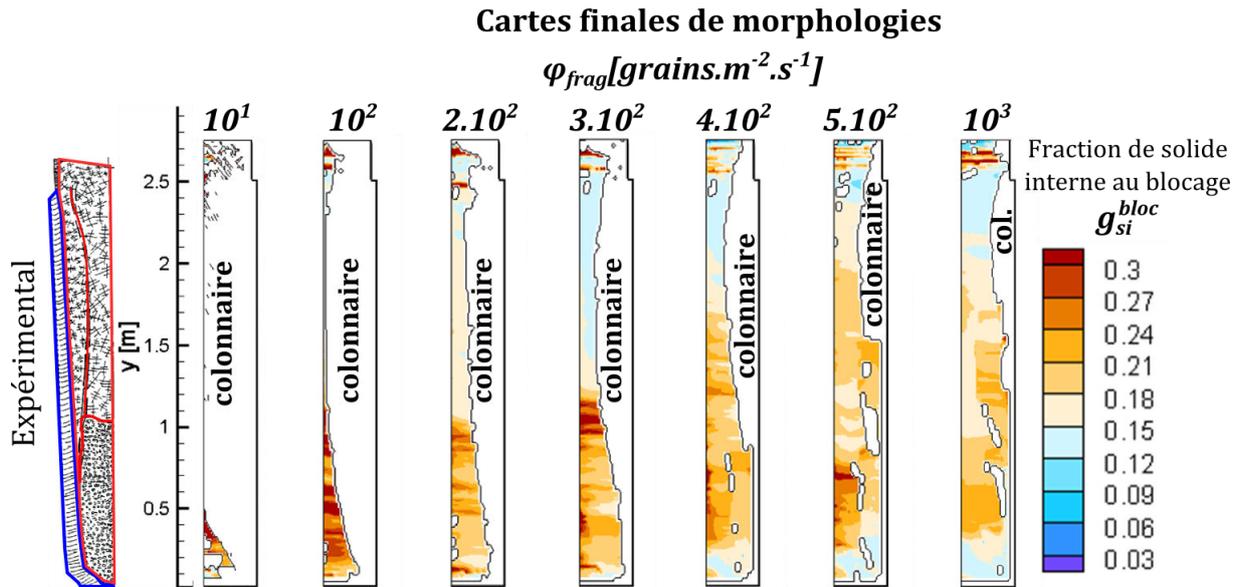


Figure IV.1-18 Cartes finales de morphologies des grains équiaxes pour différents flux surfaciques d'injection des grains.

Les structures colonnaires ayant pour origine une TEC (entourées en blanc sur la Figure IV.1-16) sont moins nombreuses et sont dispersées en îlots dans le lingot.

Enfin, on remarque que les résultats finaux sont plus sensibles à la valeur de φ_{frag} qu'à la valeur de n_0 dans la partie précédente. Ainsi on ne fait varier φ_{frag} que de deux ordres de grandeurs pour passer de structures majoritairement colonnaires à équiaxes dans le lingot. On peut se poser par ailleurs la question de la validité des flux de fragmentation utilisés, vu qu'aucune quantification expérimentale n'existe dans les systèmes industriels. Dans le cadre de notre modèle, le nombre total de fragments créés par chaque bras colonnaire peut être estimé par :

$$N_{frag}^{bras} = \varphi_{frag} \cdot (\lambda_1)^2 \cdot t_{frag} \quad (4.1)$$

Ici λ_1^2 représente la surface d'échange avec le liquide où le flux de grains équiaxes est rejeté. On a vu précédemment que l'on pouvait considérer $\lambda_1 \approx 1 \text{ mm}$. Le temps total de fragmentation est t_{frag} . On peut considérer une distance maximale d_{frag} sur laquelle le front fragmente égale à 30 cm (soit le rayon du lingot). Une borne inférieure de la vitesse du front peut être estimée par $v_{front} = 7.10^{-5} \text{ m.s}^{-1}$ (cf. chapitre II.3.3.a et Figure IV.1-24). On a donc $t_{frag} \approx \frac{d_{frag}}{v_{front}} \approx 4000 \text{ s}$. On obtient alors, d'après la relation (4.1) et prenant $\varphi_{frag} = 10^3 \text{ gr.m}^{-2}.s^{-1}$, $N_{frag}^{bras} \approx 4 \text{ grains}$. On produit donc 4 fragments par bras au maximum ce qui physiquement paraît raisonnable, voire faible. Comme remarqué dans la partie III.2, on a négligé la dispersion de taille des fragments qui peut faire qu'ils ne forment pas des grains de taille équivalente. Par ailleurs, on ne modélise pas le problème de la survie des fragments dans la zone pâteuse et on considère que chaque fragment créé forme un grain équiaxe dans le liquide devant le front colonnaire.

En conclusion, même si la répartition des structures se rapproche plus de l'expérience, l'épaisseur de la zone colonnaire en bas du lingot est trop fine (inférieure à 4 cm à partir de $\varphi_{frag} = 4.10^2 \text{ grains.m}^{-2}.s^{-1}$) et elle est trop importante vers le haut du lingot, même si les structures peuvent être qualifiées de mixtes, ce qui s'observe également sur la carte expérimentale.

La Figure IV.1-18 montre les morphologies calculées correspondantes. Là encore les résultats correspondent mieux aux macrographies.

Entre $\varphi_{frag} = 2.10^2$ et $\varphi_{frag} = 4.10^2 \text{ grains} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, on voit ainsi une transition de structure avec des morphologies plus globulaires en bas du lingot et une séparation assez brusque avec des grains plus dendritiques plus haut. Cette transition semble néanmoins se faire à une position plus haute que dans l’expérience. A partir de $\varphi_{frag} = 5.10^2 \text{ grains} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, une zone de morphologie plus dendritique apparaît en pied de lingot, là où le front est bloqué en premier.

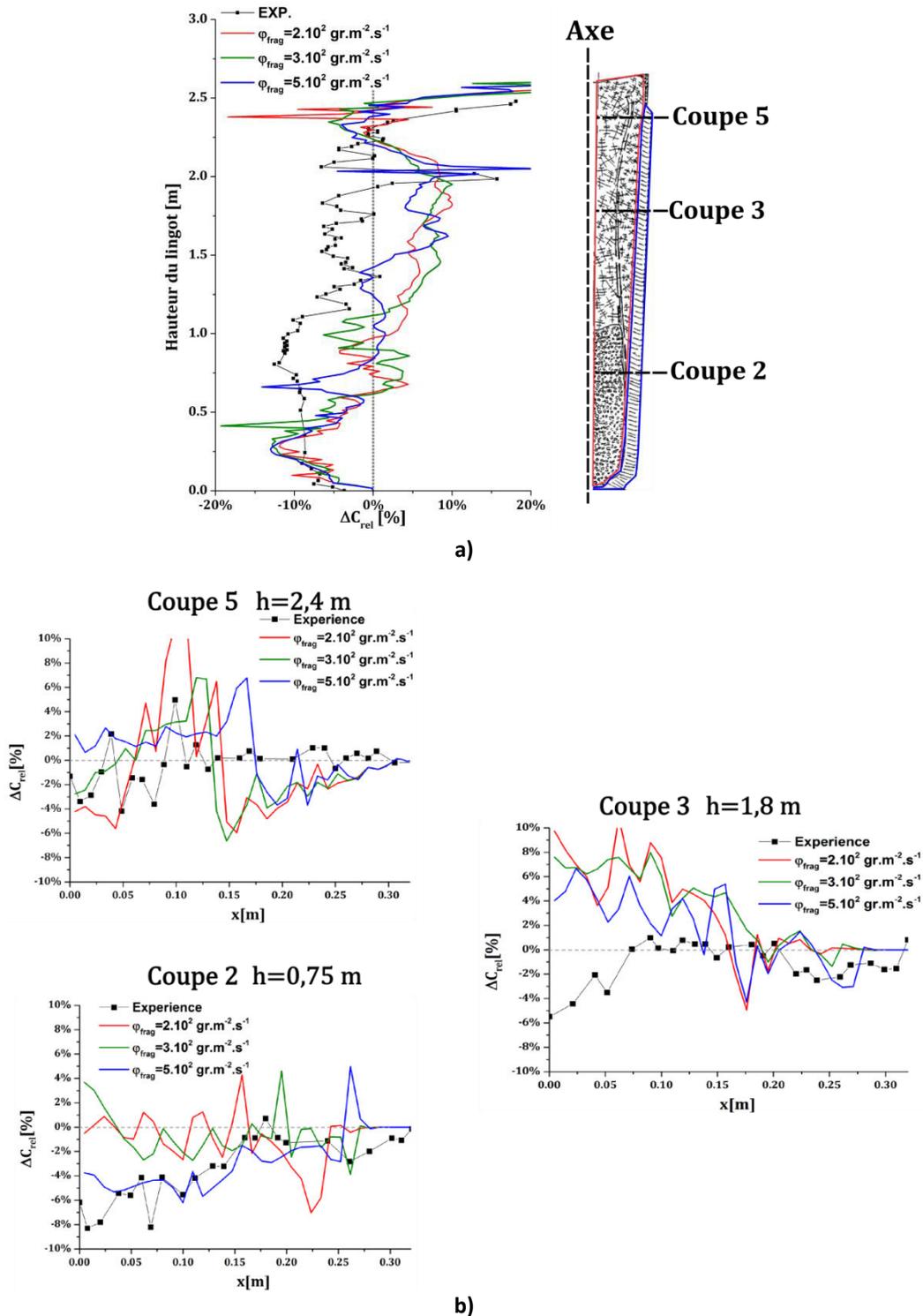


Figure IV.1-19 a) Résultats de ségrégation axiale. L'expérience (EXP.) correspond aux mesures de Thierry Mazet (Mazet T. 1995). b) Résultats de ségrégation radiales pour les trois coupes schématisées sur la figure a). Les mesures sont celles le long de la diagonale du lingot.

La Figure IV.1-19.a montre les résultats de la ségrégation axiale pour les valeurs de φ_{frag} qui donnent les structures les plus cohérentes. On voit que le modèle d'injection surfacique prédit également une ségrégation négative de moindre intensité que l'expérience vers le bas du lingot. Cette tendance se poursuit plus haut dans le lingot (dans la zone au-dessus du cône de sédimentation expérimental) où la ségrégation prédite devient positive, contrairement à

l'expérience. A partir de cette position les profils numériques, bien que plus accidentés suivent la tendance générale d'un calcul purement colonnaire (voir les résultats pour $n_0 = 10^5 \text{ nucl.m}^{-3}$ sur la Figure IV.1-11.a). Ceci peut s'expliquer par le blocage relativement rapide des grains dans la zone équiaxe centrale et les densités finales de grains équiaxes relativement faibles, même pour les plus forts flux d'injection, comme on peut le voir sur la Figure IV.1-20.

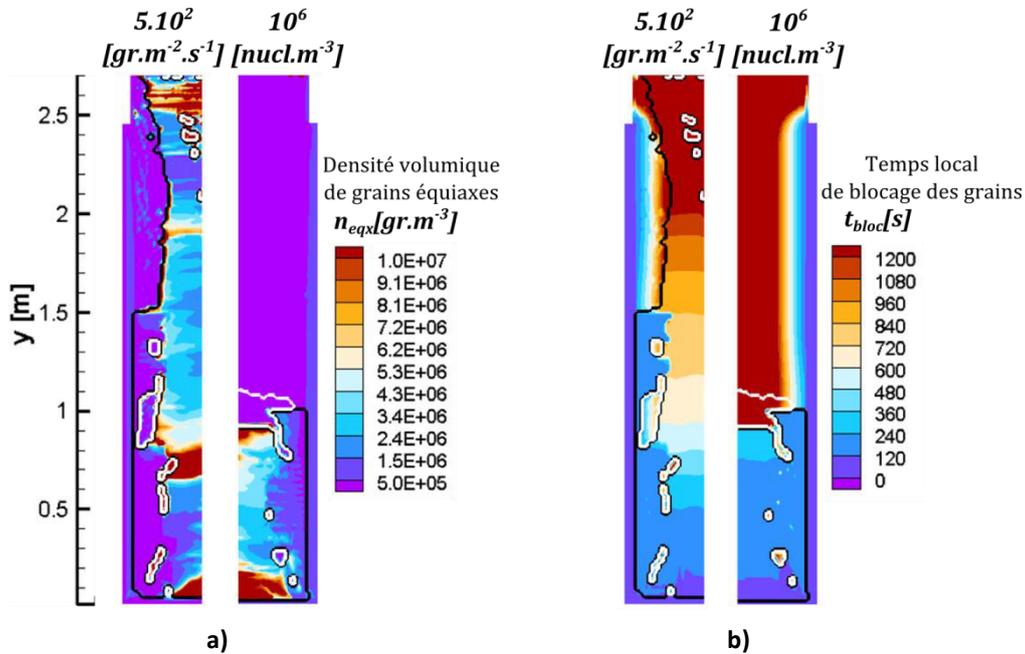


Figure IV.1-20 a) La densité finale de grains équiaxes n_{eqx} . La moitié gauche correspond au calcul avec injection surfacique et la moitié droite avec injection volumique. b) Les cartes correspondantes pour le temps local de blocage des grains. Les structures colonnaires entourées de blanc proviennent d'une TEC.

La Figure IV.1-20.a compare les résultats entre le calcul $\varphi_{frag} = 5.10^2 \text{ grains.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ (qui prédit des structures s'approchant quelque peu de l'expérience) et le calcul avec injection volumique $n_0 = 10^6 \text{ nucl.m}^{-3}$. Les deux calculs prédisent des densités de grains équiaxes similaires bien que la zone équiaxe soit plus étendue en prenant l'injection surfacique. Pour le modèle d'injection surfacique, il est difficile a priori d'estimer la quantité totale de grains équiaxes formés car elle dépend du temps de fragmentation qui lui-même dépend du blocage du front colonnaire. Néanmoins, pour $\varphi_{frag} = 5.10^2 \text{ grains.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$, on obtient une densité moyenne finale de grains équiaxes de $n_{eqx} \approx 2.10^6 \text{ grains.m}^{-3}$. Pour cela, on intègre la quantité finale de grains équiaxes dans le lingot divisée par le volume total du lingot. Donc en ordre de grandeur du nombre de grains créés, les deux calculs en Figure IV.1-20 sont comparables.

Sur la Figure IV.1-20.b, on a représenté les temps locaux de blocage des grains, y compris dans la zone colonnaire. On constate une zone verticale de grains équiaxes qui se forme pour $t < 240 \text{ s}$ et qui provoque la TCE dans la partie basse du lingot. Cette zone est formée par sédimentation devant le front colonnaire et elle est plus haute pour l'injection surfacique comparativement au cas avec injection volumique tout en apparaissant aux mêmes instants. Pour $n_0 = 10^6 \text{ nucl.m}^{-3}$, cette zone atteint une hauteur de 0,97 m à partir du pied du lingot et avec $\varphi_{frag} = 5.10^2 \text{ grains.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$, elle atteint 1,47 m. On observe expérimentalement un phénomène de blocage des grains équiaxes qui se retrouvent « attachés » au front colonnaire lors

de leur sédimentation devant le front (H. M. Fredriksson H. 1972). Il faut cependant souligner ici les limites du modèle de blocage utilisé qui laisse les grains équiaxes libres si $g_{env}^{eqx} < g_{env}^{bloc}$ et qui bloque brusquement ces grains dès que le critère est localement vérifié. Premièrement, l’interaction entre les grains est simplifiée en introduisant un coefficient de traînée des particules solides dépendant de la densité de grains et de la fraction locale d’enveloppes (K. A. Combeau H. 2009) . Afin d’améliorer cette modélisation, une viscosité apparente du milieu multiphasique est généralement employée (Ishii M. 1979). Deuxièmement, la forme des grains et le type d’écoulement existant au moment du blocage modifient les valeurs de g_{env}^{bloc} qui n’est pas une valeur constante comme on le suppose ici (Baker J. 2010). On a donc une dépendance complexe de g_{env}^{bloc} avec la forme des grains, par exemple pour des formes tétraédriques on peut bloquer localement les grains plus tard qu’en considérant des sphères. En conséquence, on peut penser que la formation brusque de la zone verticale de grains bloqués juste devant le front est surestimée.

Pour le cas avec injection surfacique, la production de grains équiaxes se poursuit, alimenté par les zones où le front colonnaire n’est pas encore bloqué. En conséquence, le centre du lingot se remplit par couches horizontales successives de grains équiaxes, comme on le voit clairement à droite de la Figure IV.1-20. Le gradient de temps de blocage s’accroît progressivement en haut du lingot car de moins en moins de grains équiaxes sont créés à mesure que le front colonnaire est progressivement bloqué. La croissance de celui-ci est par ailleurs ralentie près de la masselotte où la réaction exothermique a lieu, et on obtient une épaisseur finale de colonnaire moins importante (d’environ 8 à 9 cm) à cet endroit, ce qui est encore trop épais comparé à l’expérience.

Dans les zones colonnaires, le gradient des temps de blocage des grains est horizontal, ce qui est caractéristique de la croissance des sous-structures colonnaires qui sont intrinsèquement fixes. On voit que dans le cas d’injection surfacique, cette croissance est peu perturbée par le mouvement des grains équiaxes devant le front et le gradient de temps de blocage reste horizontal. Cela peut possiblement s’expliquer par notre hypothèse de fixer les grains équiaxes dans les volumes « mixtes » du domaine numérique.

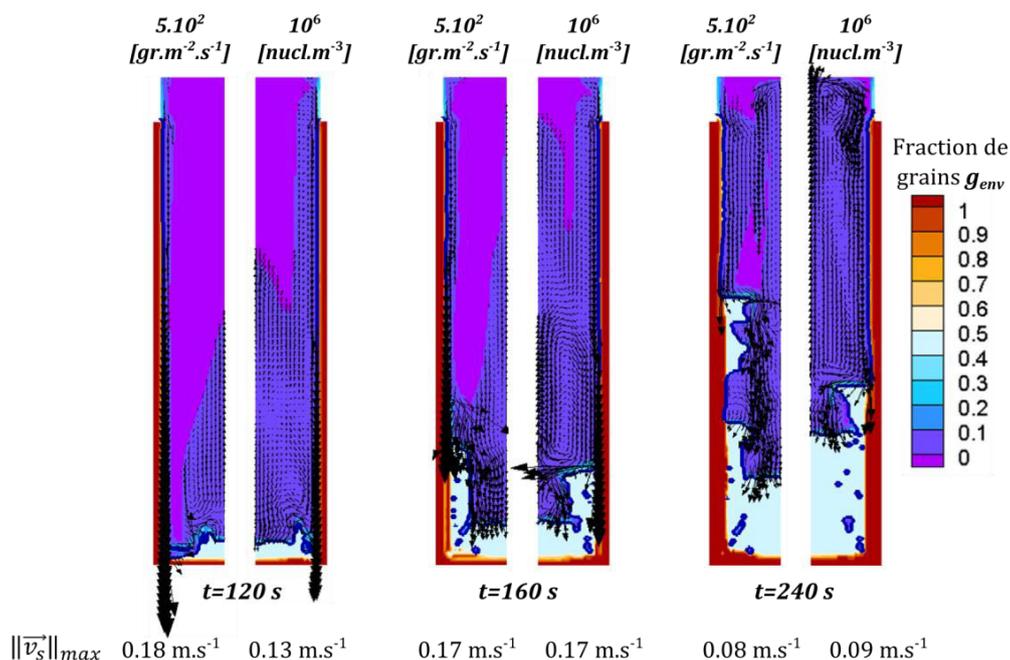


Figure IV.1-21 Cartes de fraction totale de grains. Les moitiés gauches concernent le calcul avec injection surfacique, les moitiés droites avec injection volumique. Les lignes épaisses représentent les limites de la zone de grains bloqués. Les vecteurs symbolisent la vitesse du solide.

La Figure IV.1-21 détaille l'évolution temporelle de la zone verticale de grains équiaxes fixes, qui détermine au final la position de la TCE sur plus de la moitié inférieure du lingot. On a comparé la mise en place de cette zone cohérente et la sédimentation des grains équiaxes avec le même cas d'injection volumique que précédemment (cf. Figure IV.1-14).

A $t = 120 \text{ s}$, on voit que les deux modèles d'injection des grains équiaxes se comportent similairement avec une sédimentation importante et presque exclusivement présente juste devant le front colonnaire. Ceci s'accompagne de la mise en place d'une zone de grains fixes en pied de lingot.

Par la suite, à $t = 160 \text{ s}$, la zone verticale de grains équiaxes fixes qui se met en place juste devant le front colonnaire croît plus vite dans le cas de l'injection surfacique. Ceci s'explique par le fait que la création de nouveaux grains se fait exclusivement dans le liquide juste devant le front dans ce cas et sédimente directement à cet endroit.

A $t = 240 \text{ s}$, on voit alors que la zone verticale de grains équiaxes (déterminant la position de la TCE dans la partie basse du lingot) a atteint sa taille finale dans les deux cas. Pour l'injection volumique, la source de grains est alors épuisée et le reste du lingot sera colonnaire. Avec l'injection surfacique, de nouveaux grains ont encore créés en haut du lingot où le front colonnaire n'est pas bloqué. Plusieurs « marches d'escaliers » constituées de grains bloqués se sont formées le long du front colonnaire et les nouveaux grains descendent en cascades successives jusqu'au bas du lingot.

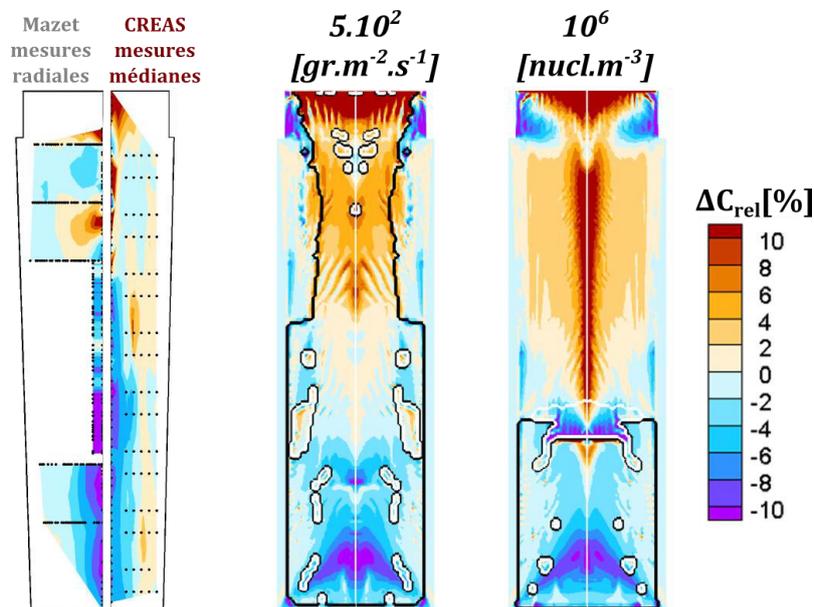


Figure IV.1-22 Cartes expérimentales de ségrégation en carbone (à gauche) et résultats des calculs pour $\phi_{\text{frag}} = 5 \cdot 10^2 \text{ gr. m}^{-2}\text{s}^{-1}$ et $n_0 = 10^6 \text{ [nucl. m}^{-3}\text{]}$.

On reporte sur la Figure IV.1-22, les cartes de ségrégations finales en carbone. Pour l'injection volumique, la ségrégation est largement positive dans la zone colonnaire sur les deux tiers supérieurs du lingot, ce qui n'est pas en accord avec les mesures. Comme montré précédemment sur la Figure IV.1-19, dans le cas de l'injection surfacique les résultats sont plus proches des mesures même si la ségrégation négative est sous-estimée et la ségrégation positive est surestimée.

On a étudié dans cette partie l’influence de l’injection surfacique seule, considérant donc que seule la fragmentation est la source des grains équiaxes. On peut ajouter à cela la nucléation « Big-bang » déjà évoquée dans le chapitre IV.1.2 où des grains peuvent se former au cours du remplissage, qui n’est pas modélisé ici. Comme dans le chapitre IV.1.2, on va considérer une seule classe de germes n_0 possédant une surfusion de germination négligeable (c’est-à-dire $\Delta T_n \approx 0 K$). On va rajouter cette source volumique de grains équiaxes à l’injection surfacique. Sur la Figure IV.1-23, on présente les résultats pour la répartition finale des structures. Tous les calculs ont été réalisés avec un flux surfacique de grains $\varphi_{frag} = 4.10^2 \text{ grains.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ injecté devant le front colonnaire. On fait uniquement varier la densité volumique de germe n_0 .

Cartes finales de structures et temps local de blocage des grains

$$\varphi_{frag} = 4.10^2 \text{ [grains.m}^{-2}.\text{s}^{-1}\text{]}$$

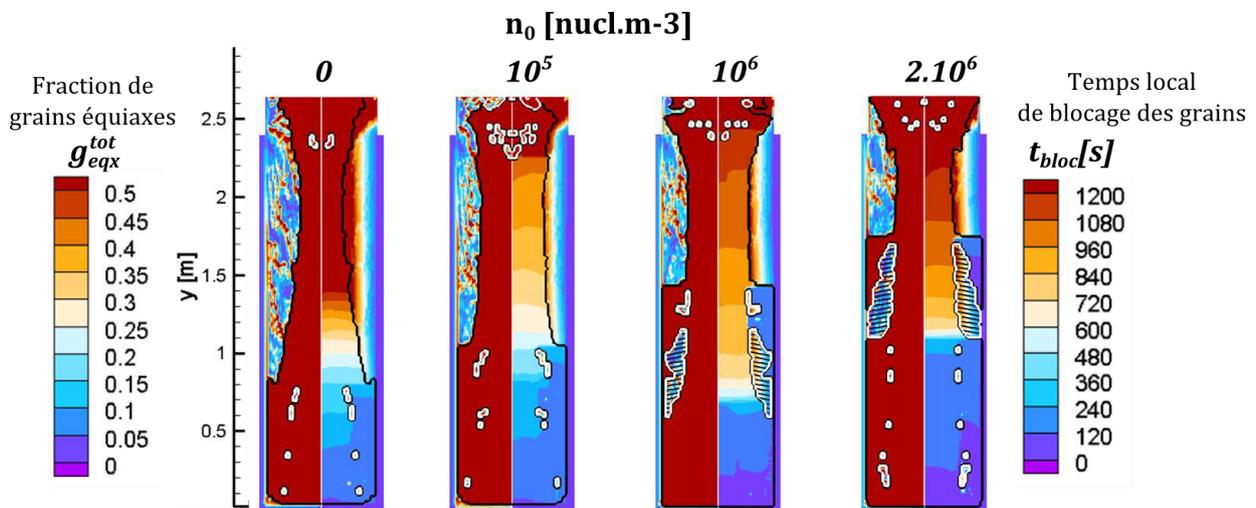


Figure IV.1-23 De gauche à droite, on augmente la densité de germes n_0 [nucl. m⁻³]. On a dans tous les cas $\Delta T_n \approx 0 K$. On considère pour tous les calculs une injection surfacique de grains équiaxes $\varphi_{frag} = 4.10^2 \text{ grains.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$. Les cartes de gauches représentent la fraction d’enveloppe équiaxe et les cartes de droite le temps de blocage des grains.

En présence d’une source volumique supplémentaire, on voit sur les cartes de structures (cartes de gauche) que la zone colonnaire possédant une épaisseur uniforme est de plus en plus haute à mesure que la valeur de n_0 augmente. On remarque cependant parfois une TEC directement après la TCE (zones entourées de blanc et hachurées). Par contre, l’épaisseur de la zone colonnaire en haut du lingot change peu.

Les cartes de temps de blocage des grains (moitiés droites) permettent d’expliquer cette influence de la source volumique de grains. On remarque en effet qu’avec l’augmentation de n_0 , la zone de grains bloqués en environ 300 s en bas du lingot est de plus en plus haute. Comme dans le chapitre IV.1.2 (et quelle que soit la densité de germes n_0) l’ensemble des germes volumiques ont été épuisés au bout d’environ 300 s et les grains résultants ont déjà sédimenté et contribué à la progression de la zone de blocage. Par la suite, le reste du lingot est rempli par des grains équiaxes provenant uniquement de l’injection surfacique. En conséquence, la répartition finale des structures est qualitativement identique aux résultats sans source volumique de grains équiaxes. Cette mise en place rapide des grains issus de la germination volumique est en tout cas cohérente avec des observations expérimentales indiquant que les germes disponibles dans le liquide en début

de solidification ne forment que le bas de la zone centrale équiaxe des lingots (H. M. Fredriksson H. 1972), le reste étant fourni par la fragmentation de la zone pâteuse.

En conclusion des études paramétriques précédentes, on constate que ni un modèle d’injection volumique (qui représente la formation rapide de germes lors du remplissage, l’effet « Big Bang ») ni un modèle d’injection surfacique, qui représente le phénomène de fragmentation, ne permettent de retrouver les épaisseurs de colonnaire mesurées, notamment en bas du lingot. Une combinaison des deux phénomènes précédents n’améliore pas non plus les résultats. Plusieurs effets peuvent expliquer cela. Tout d’abord, le fait que l’on néglige l’étape de remplissage qui dure environ 10 minutes. Il est probable que durant cette phase où le métal est coulé, les structures colonnaires se mettent en place et que la TCE ait déjà eu lieu en bas du lingot à la fin du remplissage. Par ailleurs, la surchauffe a été négligée dans tous les calculs présentés ici. Cependant, des calculs ont été réalisés avec des surchauffes allant jusqu’ à 40°C. Ceci nous a permis de conclure que la surchauffe favorisait les structures colonnaire, comme on pouvait s’y attendre mais ne modifie la répartition entre une zone colonnaire trop fine en bas du lingot et une zone épaisse de colonnaire (voire entièrement colonnaire) dans la partie haute. Un autre moyen de simuler le fait que la fragmentation n’a pas lieu tout le long du lingot immédiatement et peut-être pendant toute la durée de croissance des structures colonnaires serait de retarder l’apparition des germes ou fragments créés par les modèles précédents. Ceci est l’objet du chapitre suivant.

IV.1.4 Mise en place d’un critère pour l’injection surfacique

Jusqu’à présent, on a supposé que l’injection surfacique (modélisant le phénomène de fragmentation) avait lieu dès l’apparition des structures colonnaires et jusqu’à leur éventuel blocage (phénomène de TCE). Les seules conditions (cf. chapitre III.1.2) sur la quantité de solide et de liquide présentes dans la zone pâteuse colonnaire étaient très peu restrictives. Or, la fragmentation n’a lieu et ne donne naissance à des grains équiaxes devant le front que sous certaines conditions (L. S. Hellawell A. 1997). En premier lieu, la création de fragments dans la zone pâteuse colonnaire est largement considérée comme provenant de la refusion des bras secondaires ou tertiaires au niveau de leur attachement aux bras primaires (H. J. Jackson K.A 1966) . Cette refusion est favorisée par des variations de la vitesse de croissance des bras primaires, les fluctuations de température dans la zone pâteuse et par la convection thermo-solutale dans la zone pâteuse.

Enfin, la survie des cristaux équiaxes est contrainte par l’existence d’un liquide en surfusion devant le front, sans quoi leur survie peut être estimée à seulement quelques secondes (L. S. Hellawell A. 1997). Comme le font remarquer Hellawell et coll. (L. S. Hellawell A. 1997), la question la plus délicate reste celle de la quantification des fragments transportés devant le front. Peu d’études expérimentales existent encore à ce sujet et les modèles se limitent (comme c’est notre cas ici) à un taux de production de fragments apparaissant devant le front (Paradies C.J 1997), (Rabia B. 2004).

A l’échelle des microstructures, plusieurs critères ont été proposés dans la littérature afin de prédire le détachement individuel des fragments à partir des bras secondaires des dendrites colonnaires (Liu S. 2002), (Mathiesen R.H. 2005). Il est dans tous les cas nécessaire de connaître le rayon de courbure des bras secondaires et donc ces critères ne sont pas applicables tels quels dans notre modèle à prise de moyenne. Gandin (Gandin Ch.-A 2000) a proposé un mécanisme de TCE basé sur la déstabilisation du front colonnaire (voir chapitre I.6.2.c). Celui-ci présente l’intérêt d’être

indépendant de la géométrie du lingot et de l’alliage considéré, ce qui paraît surprenant mais nous permettra dans un premier temps de simplifier notre étude paramétrique. La TCE est provoquée par une fragmentation brusque du solide colonnaire lorsque le gradient thermique dans le liquide devant le front s’annule voire devient légèrement négatif.

On a représenté sur la Figure IV.1-24 le gradient thermique moyen devant le front colonnaire et la vitesse de passage du front calculés pour la solidification purement colonnaire d’un lingot de 6,2 tonnes tel que présenté précédemment. On montre l’évolution de ces deux grandeurs le long du rayon du lingot et à une hauteur $y = 1,65 \text{ m}$ du pied. On retrouve lors de la solidification colonnaire d’un alliage sans surchauffe, une vitesse du front régulièrement décroissante depuis le moule jusqu’au centre. Le gradient thermique passe très rapidement par un maximum à environ 2 cm du moule. Ceci est dû au fait que tout près du moule (qui est initialement à $T_{moule} = 20^\circ\text{C}$) le temps de passage est très court et un gradient thermique important n’a pas le temps de s’établir dans le liquide devant le front. Par la suite, le gradient thermique décroît également jusqu’au centre du moule.

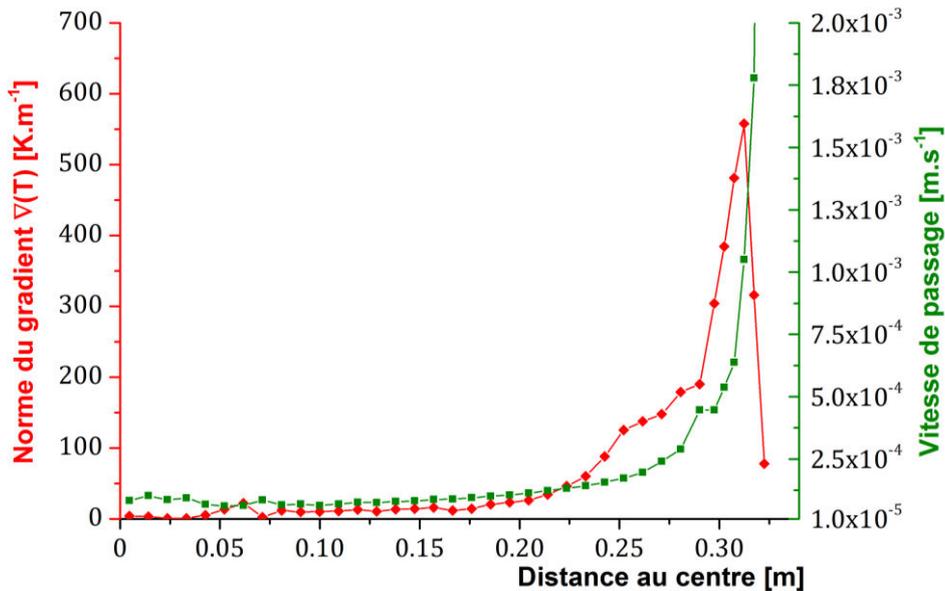


Figure IV.1-24 Norme du gradient thermique devant le front colonnaire (en rouge) et vitesse de passage du front (en vert) le long du rayon du lingot Asco de 6,2 tonnes. Les profils sont tracés pour un calcul purement colonnaire et à une hauteur $h = 1,65 \text{ m}$.

On peut noter que, le gradient calculé devant le front avec notre modèle est probablement surestimé par rapport à sa valeur réelle car il est calculé dans un volume de prise de moyenne qui contient les pointes colonnaires et donc une partie de la zone pâteuse. Par contre, on peut constater que pour des valeurs suffisamment faibles (inférieures à $100 \text{ K}\cdot\text{m}^{-1}$), le gradient a quasiment atteint un plateau et sa valeur est proche des valeurs minimales calculées (considérant les imprécisions du modèle).

En l’absence de détection dans notre modèle de fluctuations particulières de la vitesse du front ou de la température dans la zone pâteuse colonnaire, on va donc supposer que la fragmentation n’a lieu que lorsque $\|\vec{\nabla}(T)\|_{front} < G_{crit}$ où G_{crit} est une valeur limite du gradient qui devrait normalement être 0 voire légèrement négative. Dans notre cas, nous avons choisi comme référence (au vu des

résultats de la Figure IV.1-24) la valeur $G_{crit} = 100 \text{ K.m}^{-1}$. Le critère est alors atteint à environ 8 cm du moule. Une exception à cette condition concerne le fait qu'on autorise la fragmentation dès qu'il y a refusion de la structure colonnaire. On prend en effet en compte dans notre modèle de la refusion éventuelle des sous-structures colonnaires (voir chapitre II.3.3.a). Ce phénomène a lieu ici particulièrement dans la masselotte où le matériau exothermique est situé.

Néanmoins, les résultats vont tout de même dépendre de la valeur choisie de G_{crit} comme le montre la Figure IV.1-25. On voit que la répartition finale des structures varie surtout pour les valeurs extrêmes du critère ($G_{crit} < 25 \text{ K.m}^{-1}$ ou $G_{crit} = 150 \text{ K.m}^{-1}$). Ceci étant dit, on peut voir que dans l'intervalle $G_{crit} \in [25; 100] \text{ K.m}^{-1}$, la TCE est modifiée de manière moins sensible et également de manière non-monotone lorsque l'on augmente la valeur de G_{crit} . Ceci permet donc d'utiliser la valeur de 100 K.m^{-1} avec une certaine confiance.

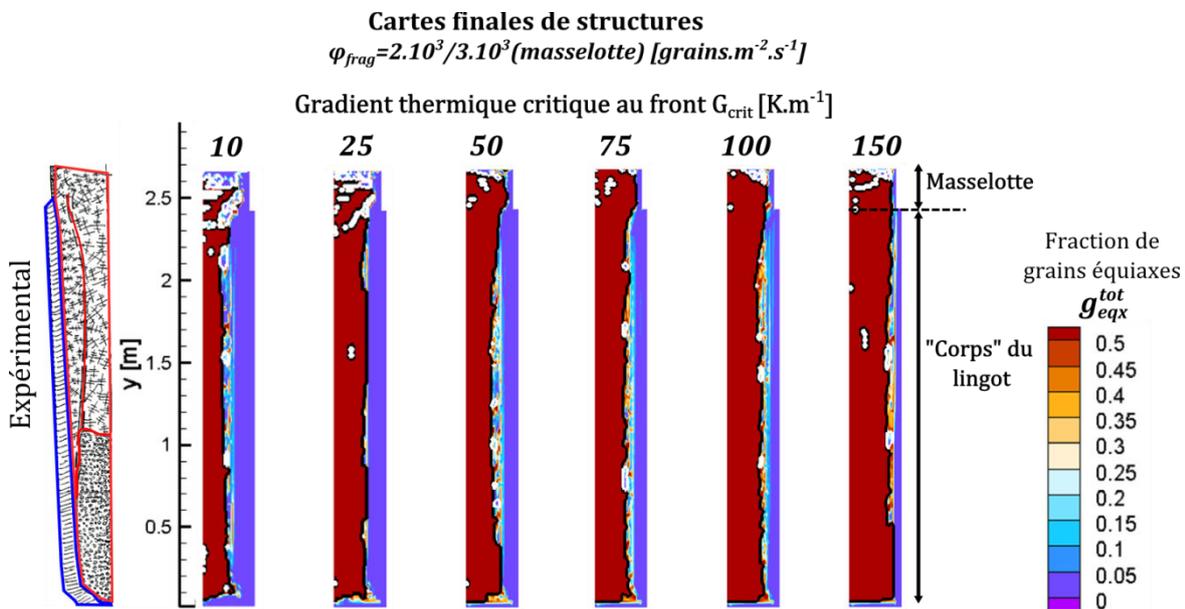


Figure IV.1-25 Cartes finales de fraction de grains équiaxes. La ligne noire indique la TCE et les zones entourées de blanc la TEC. On a pris le même flux d'injection φ_{frag} pour les calculs : $2.10^3 \text{ grains.m}^{-2}.s^{-1}$ en face du moule et 3.10^3 dans la zone de la masselotte (pour $h \geq 2,37 \text{ m}$, comme schématisé à droite de la figure).

En faisant varier le flux d'injection surfacique, qui est l'autre paramètre importante de notre modèle, on obtient les résultats reportés sur la Figure IV.1-26.

On constate en premier lieu que l'utilisation du critère choisi dans ce chapitre améliore sensiblement la TCE calculée. Même pour les valeurs les plus faibles du flux, l'épaisseur de la structure colonnaire est plus régulière et elle est plus importante en haut du lingot et un peu en-dessous de la masselotte où on trouve toujours des structures fortement mixtes. Pour $\varphi_{frag} \in [10^3; 3.10^3] \text{ frag.m}^{-2}.s^{-1}$, la TCE expérimentale est qualitativement retrouvée, selon que l'on considère la zone mixte comme colonnaire ou pas. Afin de choisir les flux de fragments les mieux adaptés pour la suite, on s'est basé sur une appréciation globale de la prédiction de la TCE et des ségrégations en carbone par rapport à l'expérience.

Les flux imposés sont globalement plus élevés que dans le chapitre IV.1.3 car les durées pendant lesquelles l'injection surfacique a lieu sont inférieures.

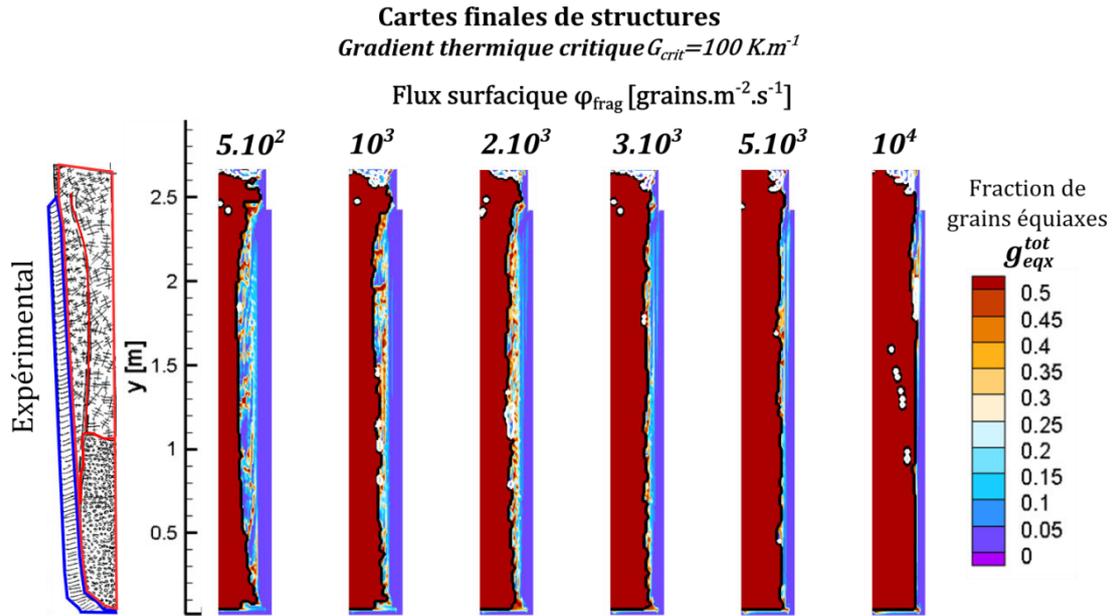


Figure IV.1-26 Cartes finales de fractions de grains équiaxes. Le gradient thermique critique pour la fragmentation est dans tous les cas $G_{crit} = 100 K.m^{-1}$. On fait varier le flux de fragments φ_{frag} [grains.m⁻².s⁻¹].

Les temps locaux pendant lesquels le phénomène de fragmentation a lieu pour $\varphi_{frag} = 2.10^3 \text{ grains.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ et $G_{crit} = 100 K.m^{-1}$ sont présentés sur la Figure IV.1-27. On peut y voir que le long de la zone en-dessous de la masselotte la fragmentation n’est pas immédiate et les temps totaux de fragmentation t_{frag} sont faibles, entre 40 s et 100 s. En revanche, en face de la masselotte, les temps de fragmentation sont sensiblement plus importants (voir encart à droite), dépassant parfois 1000 s.

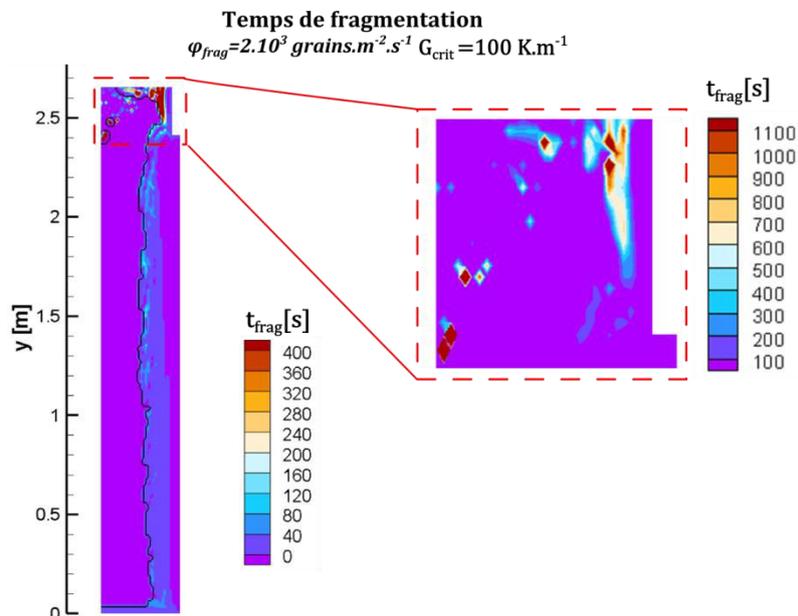


Figure IV.1-27 Temps totaux de fragmentation dans le lingot Ascométal. Les lignes noires délimitent les positions finales des fronts colonnaires.

L’injection de fragments depuis la masselotte a lieu dès le début de la solidification mais se fait principalement aux mêmes instants que dans le reste du lingot (pour $120 s \lesssim t \lesssim 1000 s$). Donc les grains produits dans la masselotte alimentent bien la zone de sédimentation de grains équiaxes dans

la partie centrale du lingot. La fragmentation dans la masselotte se poursuit également jusqu' à $t \approx 6000$ s. Dans ce cas, les grains équiaxes produits restent confinés en haut du lingot (voir Figure IV.1-30.a). En conséquence, une partie importante des grains produits au cours de la solidification proviennent de la masselotte, alors que cette zone ne mesure que 30 cm de haut. On peut en fait estimer, à partir des temps de fragmentation, la proportion des grains équiaxes produits dans la masselotte. On calcule pour cela la grandeur définie par :

$$N_{frag}^{mass} = \frac{\iint_{\partial\Omega_{p/i} \in \text{masselotte}} \varphi_{frag}^i t_{frag}^i dS_i}{\iint_{\partial\Omega_{p/i} \in V_{tot}} \varphi_{frag}^i t_{frag}^i dS_i} \quad (4.2)$$

Où la masselotte est définie comme la partie du lingot directement en face du réfractaire (pour $y \geq 2,37$ m, comme schématisé sur la Figure IV.1-26). On intègre sur $\partial\Omega_{p/i}$ les surfaces de contact entre les mailles où l'injection surfacique a lieu. On trouve ainsi qu'environ 55 % des grains ont comme origine la zone de la masselotte. Ce résultat est en accord avec de précédentes observations sur ce lingot (D. J. Kumar A. 2012) qui indiquent que, particulièrement dans le cas d'une masselotte exothermique, la majeure partie des grains créés peuvent provenir de cette zone. La refusion du tissu dendritique colonnaire au contact du matériau exothermique est également mis en avant pour expliquer la fragmentation importante dans la masselotte. Notre modèle considérant des flux constants d'injection surfacique sous-estime probablement la proportion de grains équiaxes provenant du haut du lingot. Par exemple, si l'on considère un flux d'injection $\varphi_{frag} = 2.10^3 \text{ grains.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ dans le corps du lingot mais de $3.10^3 \text{ grains.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ dans la masselotte, l'équation (4.2) indique que 71 % du nombre de grains équiaxes ont pour origine la zone de la masselotte. En fait, pour des flux d'injections suffisamment élevé uniquement dans la masselotte ($\varphi_{frag} \geq 10^5 \text{ grains.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$) et donc aucune création de grains dans le corps du lingot, on retrouve une épaisseur similaire de la zone colonnaire et la macroségrégation chimique n'est que modérément impactée.

Ces valeurs des flux rapprochent légèrement les résultats de l'expérience. On va donc choisir ces valeurs des flux pour définir un calcul de référence dont on présente les résultats détaillés par la suite en le comparant à l'expérience. En résumé, le calcul choisit comme référence (suite aux études paramétriques sur G_{crit} et φ_{frag}) ne considère pas de germination volumique mais un flux $\varphi_{frag} = 2.10^3 \text{ grains.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ pour $y \leq 2,37$ m à partir du pied du lingot et $\varphi_{frag} = 3.10^3 \text{ grains.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ sinon. Le gradient thermique critique pour activer l'injection surfacique est $G_{crit} = 100 \text{ K.m}^{-1}$.

La Figure IV.1-28 résume les cartes finales des principales grandeurs étudiées précédemment pour le calcul de référence.

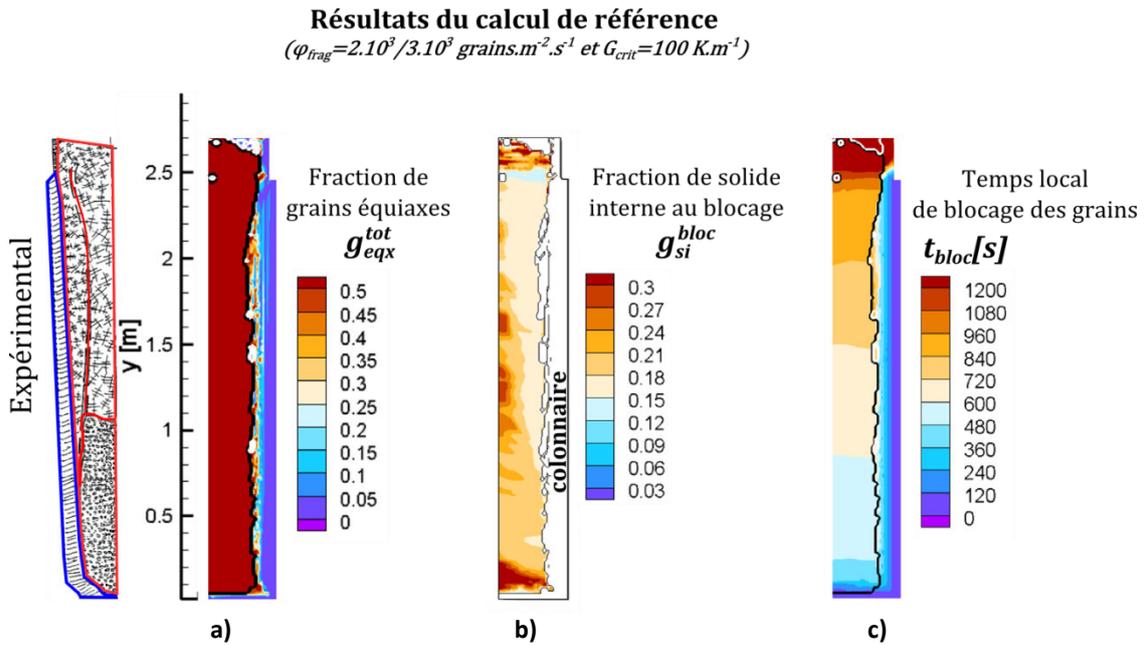


Figure IV.1-28 Résultats pour le calcul de référence sur le lingot de 6,2 tonnes. Les contours noirs et blancs indiquent la position finale du front colonnaire. a) Fraction de grains équiaxes b) Morphologie des grains équiaxes c) Temps locaux de blocage des grains.

Comme on l'a mentionné précédemment, l'injection surfacique permet de retrouver la TCE se rapprochant de l'expérience. On remarque ainsi une zone purement colonnaire mesurant entre 7 et 10 cm en-dessous de la masselotte. Des zones mixtes sont également présentes particulièrement juste en-dessous de la masselotte. Ceci indique que le front colonnaire n'est pas immédiatement bloqué dès que les grains équiaxes commencent à apparaître. Les zones mixtes sont également représentées sur la macrographie expérimentale et, comme dans le calcul on peut voir une bosse de l'épaisseur des structures mixtes vers $y = 2 \text{ m}$. Il y a cependant globalement moins de structures mixtes dans notre calcul. La TEC n'a pas lieu de manière conséquente, seule une zone colonnaire repart tout en haut du lingot.

Pour comparer plus précisément les épaisseurs de la zone colonnaire, la Figure IV.1-29.a indique, en fonction de la hauteur, les tailles de zone colonnaires mesurées et prédites pour différent flux de fragments. Globalement, on voit un bon accord entre l'expérience et le modèle. Une différence notable s'établit néanmoins pour $h > 1,6 \text{ m}$. Cette différence peut être cependant en partie expliquée par le fait que dans les mesures expérimentales (basées sur des estimations visuelles à partir des macrographies) les structures mixtes ne sont pas prises systématiquement en compte. Dans le calcul, on a au contraire choisi de compter toutes les zones mixtes comme des zones colonnaires et on considère donc que seule la TCE prédite permet de faire la distinction entre les zones colonnaires et équiaxe. Par ailleurs la Figure IV.1-29.b présente les résultats avec le scénario d'injection surfacique mais sans critère sur le gradient thermique devant le front. Lorsque l'on ne retarde pas l'apparition des grains dans le liquide, on retrouve une zone colonnaire trop fine en bas du lingot dans le cône de sédimentation et une épaisseur trop importante dans la partie haute. Enfin, la Figure IV.1-29.c fait de même pour le scénario d'injection volumique où l'on constate bien que la discontinuité abrupte entre une zone colonnaire très fine et la partie haute où tout le lingot est occupé par les structures colonnaires, donne des résultats éloignés des mesures.

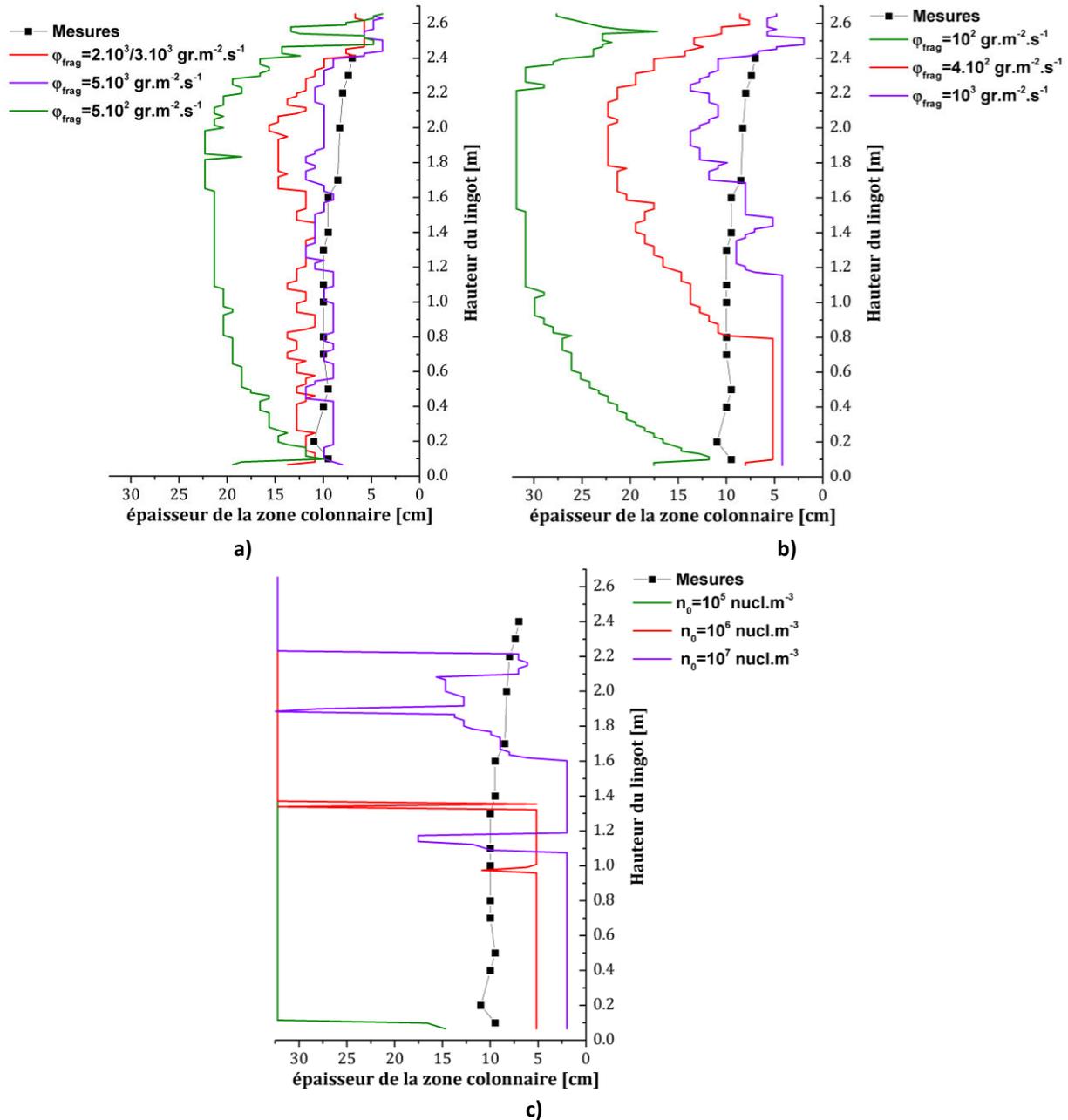


Figure IV.1-29 Comparatif des épaisseurs de la zone colonnaire mesurées et calculées. Dans le calcul, on compte les zones mixtes comme étant toujours colonnaires. La position finale du front (TCE) donne l'épaisseur finale pour une zone continue de colonnaire partant du moule. a) En utilisant le modèle d'injection surfacique avec critère sur le gradient. b) Avec le modèle d'injection surfacique sans critère sur le gradient c) Avec le modèle d'injection volumique

L'épaisseur globalement uniforme dans le calcul de référence (excepté dans la masselotte) peut être expliquée par la mise en place rapide de la zone de sédimentation, comme on peut le voir sur la carte des temps de blocage local des grains. De par les flux d'injection importants, le lingot se remplit par des grains équiaxes en moins de 700 s pour la majeure partie du volume. Le blocage des grains est généralement accompagné du blocage du front et donc de la TCE car dès que la fraction locale d'enveloppes atteint $g_{env}^{eqx} = 0,4$, le liquide extragranulaire équiaxe est quasiment à l'équilibre et donc on a un blocage solutal du front colonnaire. Le blocage mécanique peut également intervenir si on arrive localement à avoir $g_{env}^{eqx} > g_{Hunt} = 0,5$.

Sur la Figure IV.1-28.b, la carte de morphologie indique que les grains les plus globulaires se sont concentrés en pied de lingot et sur l’axe jusqu’au milieu du lingot. Un peu plus haut, on observe une transition morphologique vers des grains plus dendritiques. Néanmoins, dans la masselotte les morphologies sont de nouveau plus globulaires. Ceci est dû à l’injection surfacique intense en fin de calcul pour remplir le haut de la masselotte. Comme on le voit sur la Figure IV.1-30.a, un grand nombre de grains se concentrent dans cette zone ce qui mène à la zone globulaire observée. Dans l’expérience, les morphologies dendritiques reportées correspondent possiblement à une TEC qui n’est pas prédite ici. La fragmentation prédite semble trop importante en haut du lingot par rapport à la réalité et peut souligner les limites d’un simple critère sur le gradient thermique (avec un flux constant de grains) afin de modéliser le phénomène complexe de fragmentation.

Sur la Figure IV.1-30.b on a mis, en parallèle des densités finales de grains équiaxes (cf. Figure IV.1-30.a), le diamètre de grains sur l’axe du lingot. Sur le même graphe, on a également répété les tailles de structures mesurées. Comme indiqué dans le chapitre IV.1.1, les tailles mesurées correspondent plutôt à des espacements dendritiques entre bras. En effet, les diamètres calculés sont environ un ordre de grandeur supérieur aux tailles mesurées. Par contre, il s’agit du bon ordre de grandeur par rapport aux tailles de bras primaires de 1 à 2 cm (dans la zone dendritique) reportées par Thierry Mazet (Mazet T. 1995).

On surestime par contre probablement la taille des grains dans la zone correspondante au cône de sédimentation expérimental (où les morphologies sont globulaires). On retrouve ici le fait que l’étendue de la zone globulaire n’est pas assez étendue dans notre calcul et est limitée au pied du lingot. En haut du lingot, le diamètre des grains se réduit, pour les raisons évoquées précédemment.

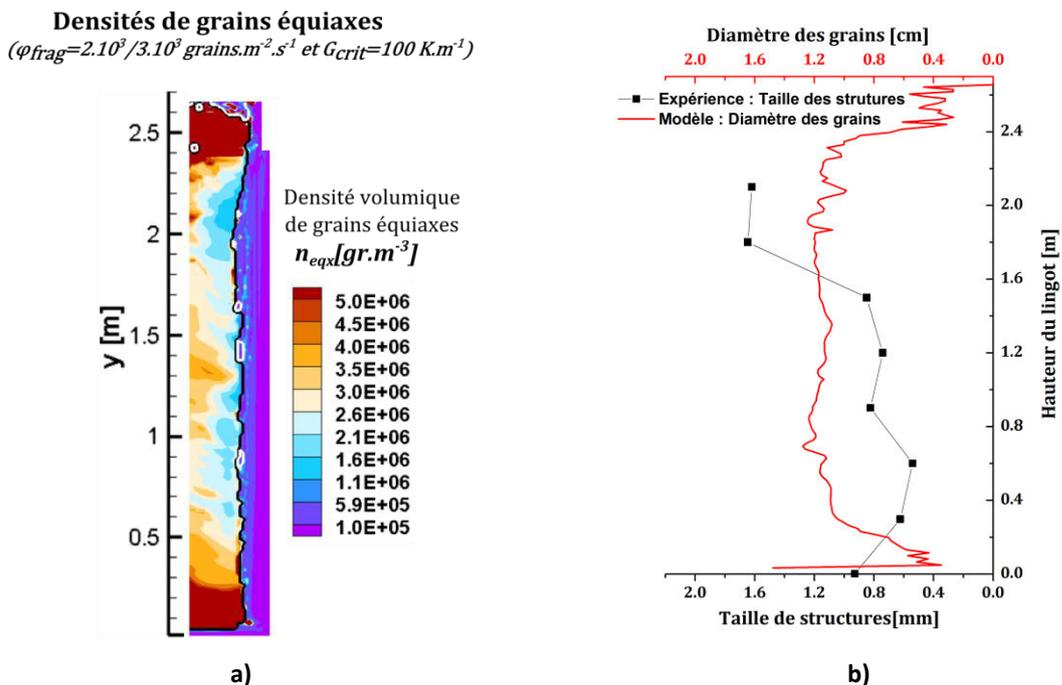


Figure IV.1-30 a) Densités finales de grains équiaxes dans le lingot. b) Comparaison entre les tailles de structures mesurées sur l’axe du lingot (cf. Figure IV.1-6.b) et les diamètres calculés des grains équiaxes sur l’axe.

Les conséquences de la mise en place des grains équiaxes sur les macroségrégations sont résumées sur la Figure IV.1-31 et la Figure IV.1-32.

La carte générale de macroségrégation en Figure IV.1-31 permet de faire clairement apparaître que

les différences principales entre le calcul et les mesures sont situées dans la zone près de l’axe et à une hauteur comprise entre environ 0,5 m et 1,5 m. Dans le calcul, les ségrégations négatives ne sont pas assez intenses. Ceci peut être également relié à la taille réduite de la zone à morphologie plus globulaire dans le calcul.

La ségrégation est alors moins influencée par la sédimentation de grains car ceux-ci sont moins nombreux et plus dendritique qu’en pied du lingot. Pour les hauteurs mentionnées, le gradient thermique dans la zone de grains équiaxes fixes est faible (de l’ordre de 2°C sur la zone comprise entre 0,5 m et 1,5 m. Par conséquent, l’influence de l’écoulement sur la macroségrégation chimique est quasiment négligeable (Z. M. Combeau H. 2009).

Une explication possible du nombre trop réduit et des morphologies trop dendritiques prédites est qu’on a négligé la fragmentation du tissu dendritique équiaxe. Il est probable qu’à la frontière de la zone pâteuse équiaxe (zone de grains fixes) et la zone de grains libres, une production de fragments ait lieu, de manière similaire à la frontière entre le front colonnaire et le bain liquide. Comme évoqué en conclusion du chapitre précédent, un autre phénomène d’importance qui a été négligé ici est le remplissage du lingot. Dans le cas du lingot Ascométal de 6,2 tonnes, celui-ci a lieu par le pied avec une surchauffe de 30°C. Par conséquent, des mouvements de convection importants et une refusion des structures en pied de lingot a probablement lieu dans la réalité, ce qui peut expliquer la multiplication et la globularisation des grains équiaxes.

On remarque également une « traînée » verticale de ségrégations négatives le long du lingot qui sont corrélés au blocage du front colonnaire. Ces ségrégations ponctuelles ne sont pas visibles sur les cartes expérimentales et elles sont dues dans le calcul à l’accumulation des grains équiaxes à l’endroit où le front est bloqué. Il est possible que ce soit une conséquence de notre hypothèse de ne pas décrire le mouvement des structures équiaxes dans les mailles mixtes.

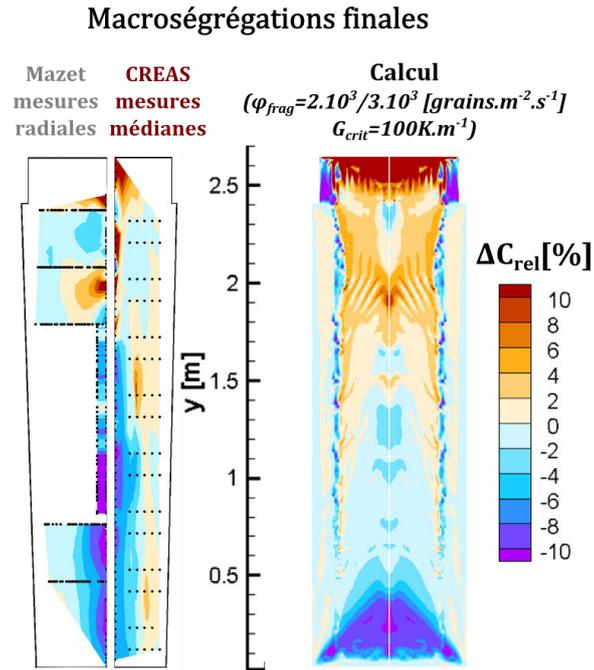


Figure IV.1-31 Cartes expérimentales de ségrégation en carbone (à gauche) et résultats du calcul de référence.

Les différences que l’on peut estimer sur la carte de macroségrégation sont présentées plus en détail sur la Figure IV.1-32.a pour la ségrégation axiale et la Figure IV.1-32.b pour les coupes radiales. En plus des coupes utilisées jusqu’à présent, on a rajouté des meures provenant du deuxième lingot analysé par le CREAS (Forestier R. 2008) afin de comparer à intervalles réguliers les coupes radiales dans le lingot. Rappelons par ailleurs que les ségrégations axiales mesurées dans les deux lingots sont très proches. De plus, comme nous avons considéré jusqu’ici un alliage uniquement binaire, on a également reporté sur la figure les résultats pour un alliage Fe-C-Si-Cr, en rajoutant les éléments Si et Cr qui ont les impacts parmi les plus importants sur l’intervalle de solidification, la croissance et la convection solutale.

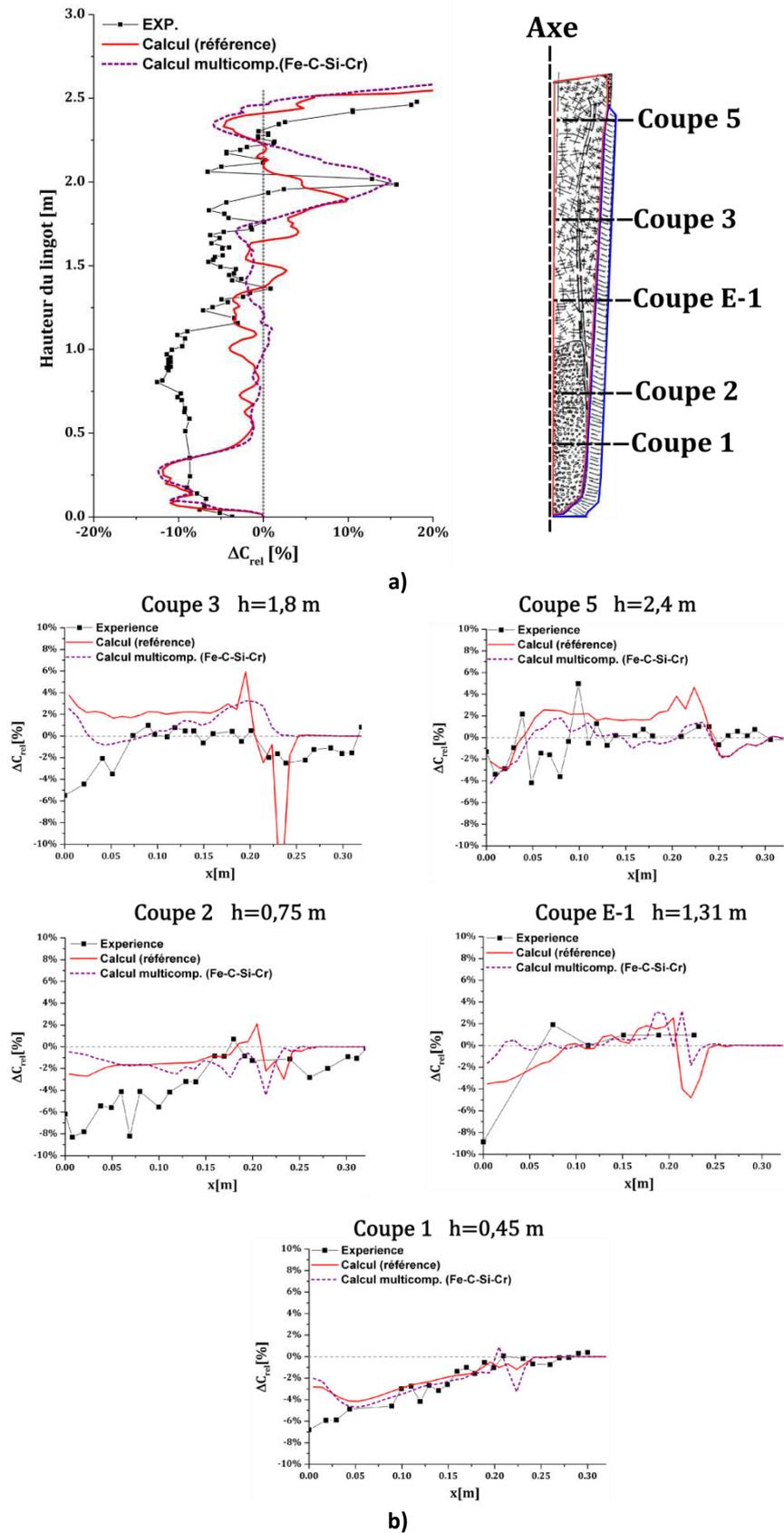


Figure IV.1-32 a) Ségrégations axiales. L'expérience (EXP.) correspond aux mesures de Thierry Mazet (Mazet T. 1995). Les positions des coupes radiales de la figure b) sont également indiquées. b) Ségrégations radiales pour les coupes symbolisées sur la figure a). La coupe E-1 provient d'une mesure médiane à une hauteur intermédiaire (cf. Figure IV.1-4).

Comme on l’a décrit précédemment, on remarque sur la coupe axiale que la différence principale se situe entre 0,3 m et 1m où les ségrégations prédites ne sont pas suffisamment négatives. Si l’on se reporte aux coupe radiales de la Figure IV.1-32.b, on note qu’on obtient globalement une ségrégation moins négative près de l’axe, y compris plus haut dans le lingot (jusqu’à la coupe 3). En pied du lingot et en haut (coupe 5) l’intensité des ségrégations prédites près de l’axe semble mieux correspondre à l’expérience. On remarque également que les résultats de macroségrégation pour un alliage multiconstitué sont proches de ceux du binaire Fe-C utilisé jusqu’à présent, ce qui est aussi le cas concernant la position de la TCE. Ceci permet de justifier cette approximation et de valider les analyses réalisées sur le binaire dans le cas d’un multiconstitué.

Concernant les paramètres numériques, les résultats sont quasiment indépendants du pas de temps Δt pour des valeurs inférieures à celles choisies par défaut (entre $10^{-3}s$ et $10^{-1}s$). En revanche, la dépendance au maillage n’ a pas encore pu être étudiée en détail, ce qui serait une étape nécessaire pour finaliser l’étude paramétrique du modèle.

IV.2.Application au lingot Aubert&Duval de 3,3 tonnes

IV.2.1 Présentation du cas étudié

On va dans un second temps s’intéresser à un lingot de géométrie et de nuance différente. Il s’agit ici de vérifier que les conclusions établies par l’étude précédente (l’utilité de considérer la fragmentation comme source principale de grains en y associant un critère indiquant le début probable de la fragmentation) permettent aussi d’obtenir des résultats concluants en changeant de système.

Les dimensions utilisées pour nos calculs sont présentées en Figure IV.2-1 : on considère toujours que le domaine est axisymétrique et donc on ne modélise qu’une moitié du lingot. En réalité la géométrie du lingot est légèrement octogonale. On négligera toujours l’étape de remplissage du lingot qui est coulé en source par le pied en un peu moins de 8 minutes avec une surchauffe de 30 °C.

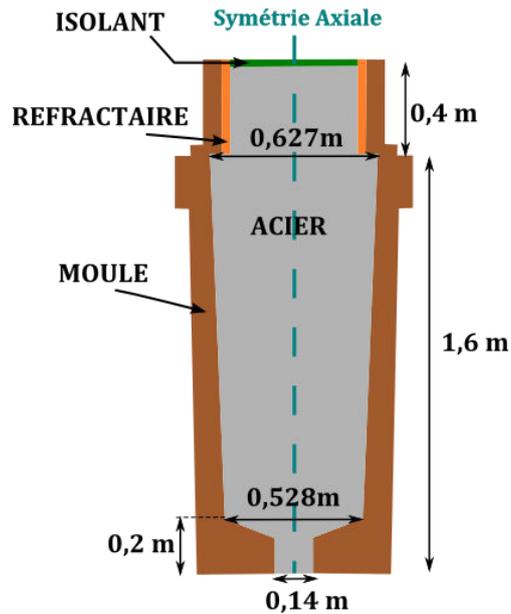


Figure IV.2-1 Schéma des dimensions utilisées pour le lingot 3,3 tonnes. On ne modélise qu’une moitié du lingot (symétrie axiale du système) et on néglige ici l’étape de remplissage.

Les conditions aux limites thermiques utilisées ainsi que les propriétés des matériaux constituant la lingotière sont reportées en Annexe D.

La nuance considérée ici est nommée 35NCD16 et on va supposer sauf mention du contraire qu’il s’agit d’un alliage binaire Fe-0,36% pds C. Les propriétés thermophysiques de l’acier utilisé sont disponibles en Annexe D. La composition exacte de cet acier est Fe-0.36% pds C-0.33% pds Si-0.3 %pds Mo-0.37%pds Mn-1.7 %pds Ni-3.8 %pds Ni-0.06 %pds V.

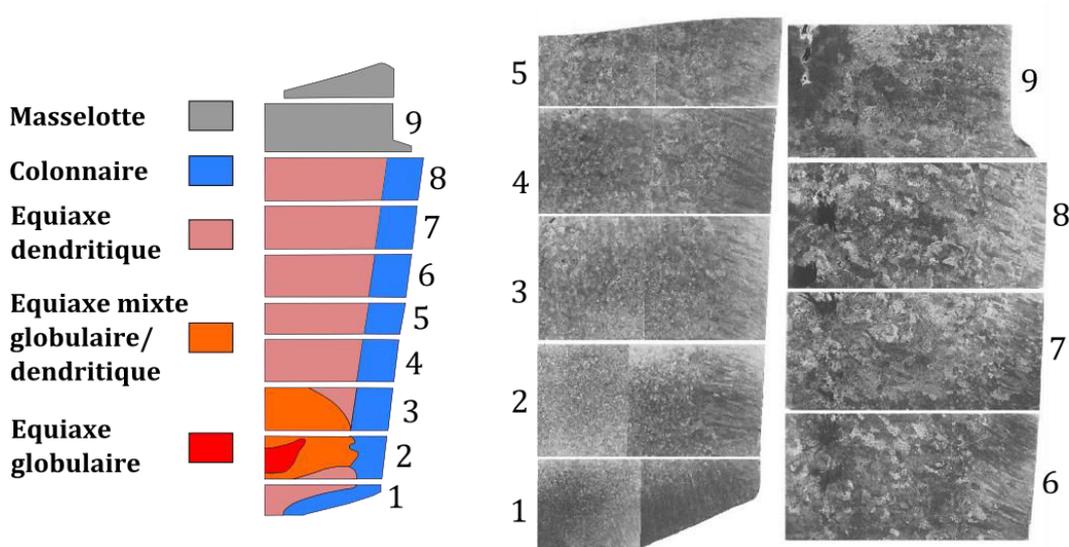


Figure IV.2-2 A gauche, carte de structures proposée par Combeau et coll. (Z. M. Combeau H. 2009) pour le lingot 3,3 tonnes. Cette carte est déduite des macrographies expérimentales présentées à droite pour les coupes correspondantes numérotées de 1 à 9.

Une série de coupes macrographique sur un lingot de ce type et de cette nuance est présentée en Figure IV.2-2. Sur la base de ces coupes, Combeau et coll. (Z. M. Combeau H. 2009) ont proposé

une carte simplifiée de structures qui est reproduit à gauche de la figure. Les auteurs considèrent en particulier une épaisseur de la zone colonnaire quasi-constante sur l’ensemble du lingot (excepté au pied et dans la masselotte où cette zone disparaît) autour de 7-8 cm. On peut néanmoins constater sur les macrographies que la position de la TCE n’est pas aussi nette, particulièrement en haut du lingot.

Dans la partie centrale équiaxe du lingot, les morphologies sont largement dendritiques. Seule une zone de taille restreinte possède une morphologie clairement globulaire, un peu au-dessus du pied du lingot, à une hauteur d’environ $y = 25 \text{ cm}$.

Une mesure axiale et des mesures radiales de ségrégation en carbone sont également disponibles pour ce lingot. Sur la Figure IV.2-3, on peut voir la carte de ségrégation résultant de ces mesures. Comme pour la partie précédente, cette carte doit être utilisée avec précaution car les valeurs sont simplement interpolées entre les zones où il n’y a pas de mesures.

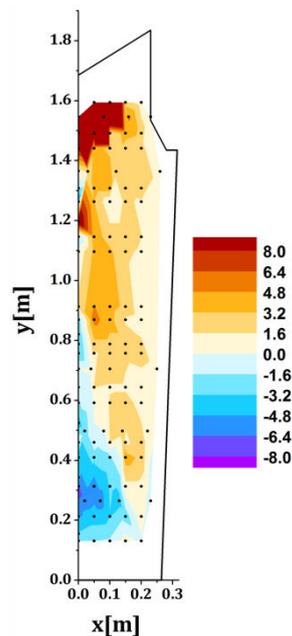


Figure IV.2-3 Carte expérimentale de macroségrégation en carbone établie à partir des mesures (indiquées par les points noirs). Les lignes noires délimitent la géométrie du lingot post-mortem.

IV.2.2 Influence de l’injection surfacique avec critère sur le gradient thermique

Dans ce chapitre, et au vu des résultats obtenus au chapitre IV.1.4, on va directement supposer que la source des grains équiaxes est la fragmentation et donc uniquement considérer l’injection surfacique des grains dans notre modèle. Par ailleurs, on va directement utiliser le critère sur le gradient thermique pour l’injection surfacique établi au chapitre IV.1.4.

La Figure IV.2-4 montre l’influence du choix de G_{crit} sur la répartition finale des structures. Similairement au lingot de 6,2 tonnes, on peut voir que la TCE finale est relativement peu affectée

par le choix de G_{crit} dans l’intervalle $50 K \leq G_{crit} \leq 100 K$. Pour cette étude paramétrique, on a choisi $\varphi_{frag} = 10^3 \text{ grains} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ comme flux surfacique d’injection.

L’influence du choix de φ_{frag} est résumée sur la Figure IV.2-5. On constate que la répartition des structures colonnaires est moins régulière que dans le cas du lingot de 6,2 tonnes. Dans le cas général, l’épaisseur prédite de zone colonnaire est trop fine en bas du lingot et devient progressivement plus importante jusqu’ à la masselotte (pour $y = 1,6 \text{ m}$). Les structures sont également mixtes dans l’ensemble de la zone colonnaire.

La prédiction de la TCE semble ici un peu moins correspondre à l’expérience même si là encore il peut être difficile de détecter la limite entre les zones mixtes et purement équiaxes sur les macrographies disponible. Néanmoins, le but est ici de simplement montrer comment se comporte le modèle établi précédemment dans le cas de différents systèmes plutôt que de chercher à ajuster précisément les résultats numériques par rapport à l’expérience. On va donc étudier un peu plus en détail un cas de référence que l’on définit pour $G_{crit} = 100 K \cdot \text{m}^{-1}$ (comme dans le chapitre précédent) et avec $\varphi_{frag} = 10^3 \text{ grains} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$.

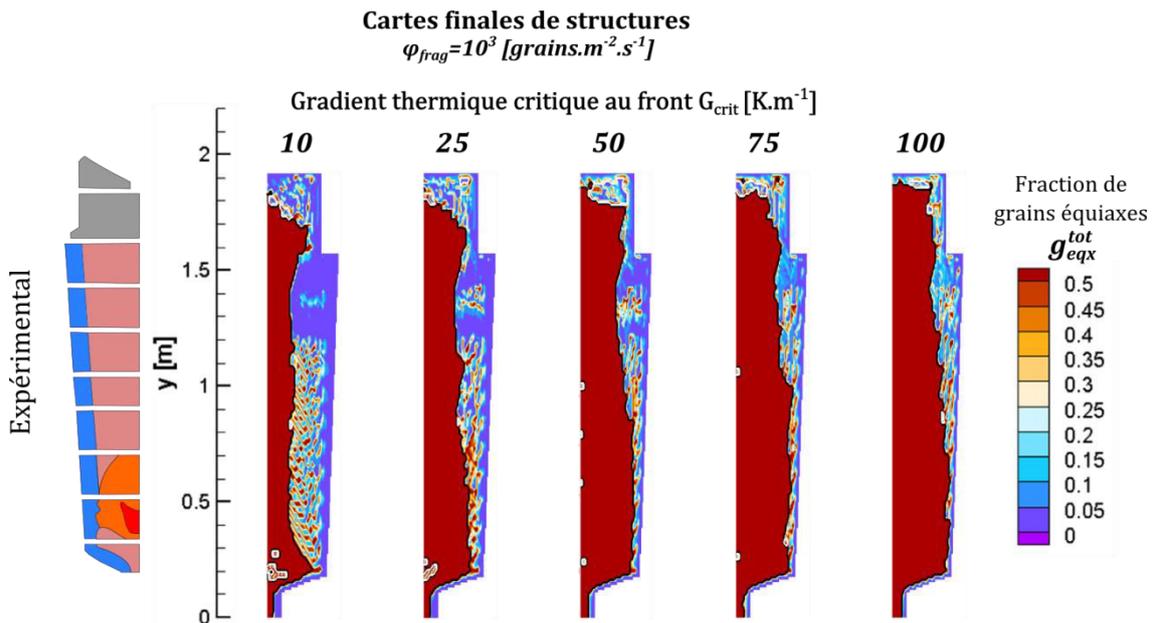


Figure IV.2-4 Cartes finales de fraction de grains équiaxes en fonction de la valeur du gradient critique G_{crit} . Le flux d’injection est $\varphi_{frag} = 10^3 \text{ grains} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$. Le rapport hauteur/largeur de la carte expérimentale a été modifié par rapport à la Figure IV.2-2 afin de respecter les dimensions réelles (cf. Figure IV.2-1).

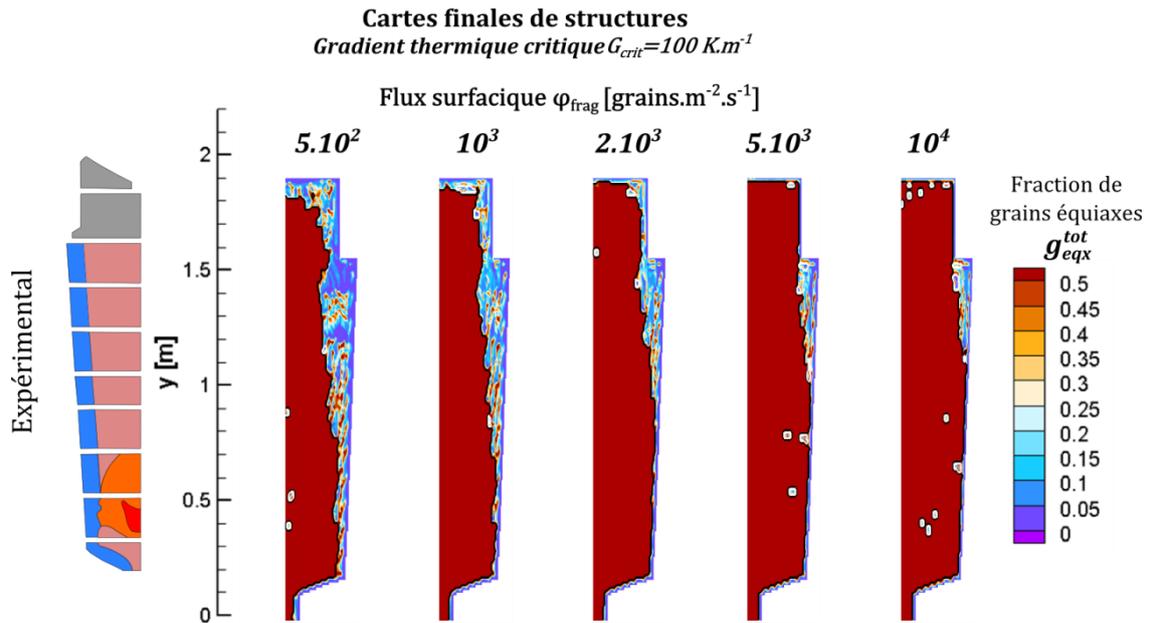


Figure IV.2-5 Cartes finales de fractions de grains équiaxes. Le gradient thermique critique pour la fragmentation est dans tous les cas $G_{crit} = 100K.m^{-1}$. On fait varier le flux de fragments φ_{frag} [grains.m⁻².s⁻¹].

En premier lieu, les résultats pour la macroségrégation chimique en carbone sont comparés sur la Figure IV.2-6. En plus des résultats du calcul de référence et des mesures expérimentales, on a rajouté une carte obtenue précédemment avec SOLID sur ce lingot (K. A. Combeau H. 2009). Pour ces précédentes simulations, la germination est réalisée uniquement en volume pour une classe unique de germes $n_0 = 10^9 nucl.m^{-3}$ et $\Delta T_N \approx 0 K$. Les structures colonnaires sont simplement modélisées en considérant une épaisseur de 6 cm à partir du moule où le solide est fixe.

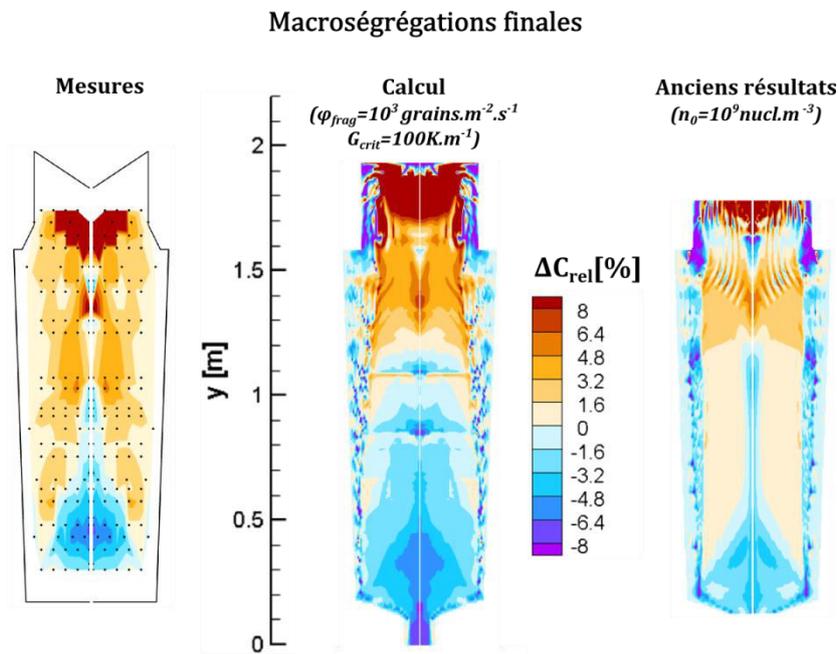


Figure IV.2-6 Cartes finales de macroségrégation en carbone. Les résultats expérimentaux (à gauche) sont comparés avec le calcul de référence (milieu) et les anciens résultats du programme SOLID (Z. M. Combeau H. 2009).

La macroségrégation négative jusqu’à $y = 1,15 \text{ m}$ est trop étendue radialement dans la simulation actuelle par rapport à l’expérience. On remarque également deux zones horizontales (vers $y = 0,9 \text{ m}$ et $y = 1,1 \text{ m}$) où une ségrégation négative plus intense est présente.

Par rapport aux résultats de l’ancien modèle (avec injection volumique et sans la cinétique de croissance du front), la macroségrégation est semblable en haut du lingot, à l’exception des veines ségrégées qui sont clairement moins présentes dans les nouveaux résultats. En-dessous de $y = 1,15 \text{ m}$, la macroségrégation est globalement légèrement positive dans les anciens calculs, sauf dans la zone « colonnaire » ainsi qu’au centre du lingot. Ce résultat a déjà été expliqué par le mouvement du liquide dans la zone de grains fixes et la relativement faible contribution de la sédimentation des grains équiaxes, qui possèdent des morphologies très dendritiques (Z. M. Combeau H. 2009).

Le fait que la macroségrégation est globalement plus négative dans la partie inférieure pour le calcul actuel peut paraître surprenant, d’autant plus que les densités finales de grains équiaxes sont plus faibles dans les nouveaux résultats (cf. Figure IV.2-9.a) qu’avec l’injection volumique où $n_0 = 10^9 \text{ nucl. m}^{-3}$. Si l’on observe les morphologies prédites sur la Figure IV.2-7, on remarque que la morphologie des grains équiaxes est largement uniforme dans les deux calculs. Par contre, les grains sont plus globulaires dans le nouveau calcul ($g_{si}^{bloc} \approx 0,2$) par rapport à l’ancien ($g_{si}^{bloc} \approx 0,12$). La raison d’une telle différence au niveau de la croissance des enveloppes peut s’expliquer par la prise en compte du liquide intragranulaire à l’équilibre, qui n’est pas considéré dans les anciens calculs où les liquides extragranulaire et intragranulaire ne sont pas distingués lors de la croissance. Il a été par ailleurs montré que la prise en compte du liquide intragranulaire produit des morphologies plus globulaires (Bedel M. 2014). En conséquence, le dépôt de fraction solide lors du blocage des grains équiaxes est plus important pour les nouveaux calculs et ainsi l’importance relative de la sédimentation des grains provoque une ségrégation négative.

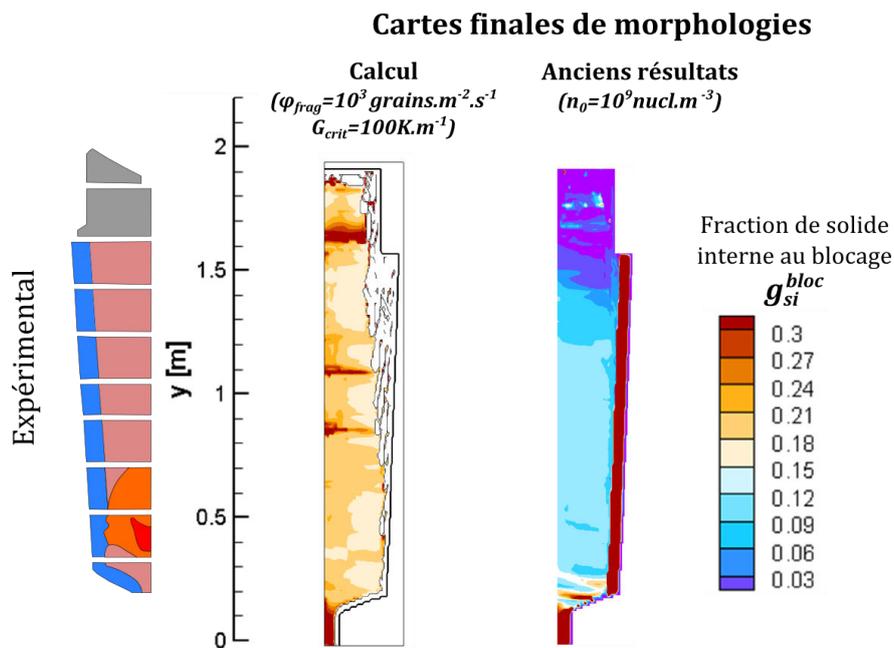


Figure IV.2-7 Comparaisons des morphologies finales prédites pour le calcul de référence et pour les anciens résultats (Z. M. Combeau H. 2009).

Les autres différences principales entre les deux calculs que l’on compare ici sont d’une part le scénario d’injection des grains et d’autre part la cinétique de croissance des pointes colonnaires qui est prise en compte dans le nouveau modèle. On obtient dans les deux cas des histoires thermiques différentes, comme indiqué sur la Figure IV.2-8.

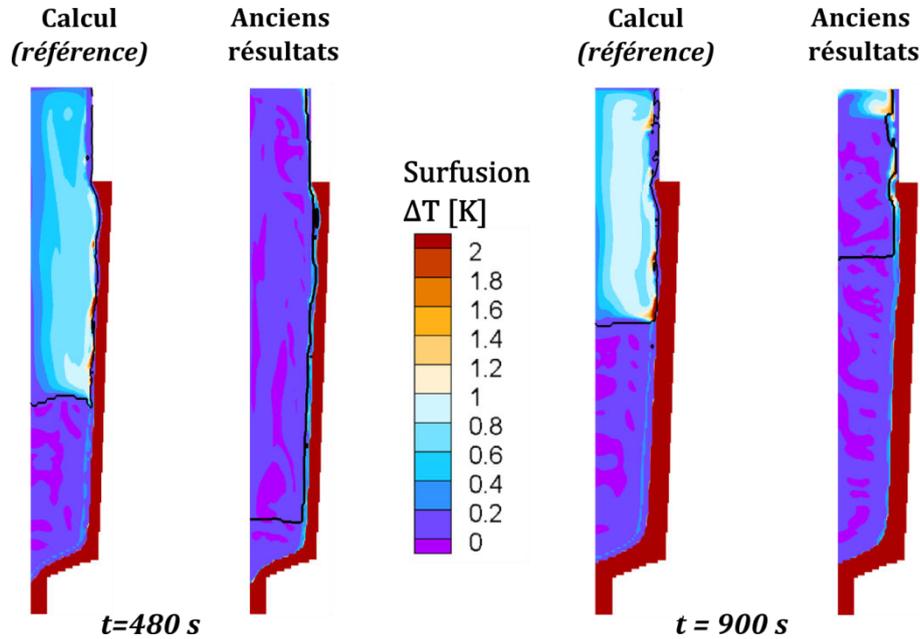


Figure IV.2-8 Cartes de surfusion constitutionnelle pour le calcul de référence et pour les anciens résultats (Z. M. Combeau H. 2009) à $t = 480\text{ s}$ (gauche) et $t = 900\text{ s}$ (droite). Les lignes noires indiquent la limite de la zone de grains fixes ($g_{env} \geq 0,4$).

À $t = 480\text{ s}$, on remarque tout d’abord que la zone de blocage des grains est plus haute dans le cas de l’injection surfacique indiquant que le remplissage au début se fait plus vite dans ce cas. Au niveau de la surfusion dans le bain liquide, l’injection volumique des anciens résultats avec $n_0 = 10^9\text{ nucl. m}^{-3}$ consomme l’ensemble de la surfusion et la surfusion chimique est pratiquement négligeable. Dans le cas de l’injection surfacique par contre, une surfusion non négligeable dans le bain liquide est prédite. Dans ce cas, les grains sont relativement peu nombreux dans le liquide (on obtient $n_{eqx} \leq 5.10^5\text{ grains. m}^{-3}$) et également ne peuvent apparaître que devant le front colonnaire. La surfusion de croissance du front est de l’ordre de 4°C à ce stade de la solidification du lingot de 3,3 tonnes. En conséquence, une partie importante de la surfusion est tout de même consommée par l’apparition et le transport des grains injectés surfaciques et à part à quelques endroits localisés, la surfusion dans le liquide devant le front reste entre 1°C et 2°C .

Par la suite, pour $t = 900\text{ s}$, la sédimentation d’un nombre important de grains dans le cas de l’injection volumique a provoqué un remplissage plus rapide du lingot. La surfusion reste globalement négligeable dans le liquide sauf en face de la masselotte, indiquant qu’un nombre important de grains est encore présent dans l’ensemble de la zone libre restante. Dans le cas de l’injection surfacique, les observations sont qualitativement identiques aux précédentes.

La présence de deux bandes horizontales ségréguées négativement (déjà évoquée pour la Figure IV.2-6) peut être reliée à la concentration locale de grains équiaxes, ce qui est visible sur la Figure IV.2-9.a. L’accumulation de grains équiaxes à ces endroits est une conséquence du ralentissement de la vitesse de remplissage, ce qui est reporté sur la Figure IV.2-9.b. On peut voir que

le gradient du temps local de blocage des grains est plus important là où les grains équiaxes se sont concentrés.

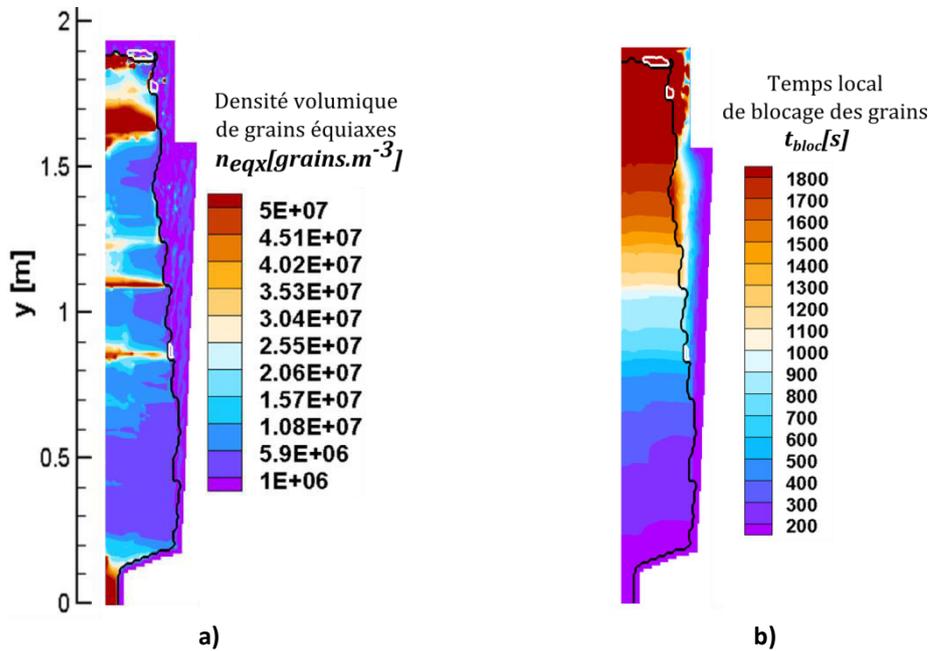


Figure IV.2-9 a) Densités de grains équiaxes pour le calcul de référence. b) Temps local de blocage des grains pour le calcul de référence. Les lignes noires et blanches indiquent la position finale de la TCE et de la TEC respectivement.

La raison de ce ralentissement soudain du blocage des grains n’est par contre pas encore claire pour le moment.

En conclusion de cette étude moins poussée sur le lingot 3,3 tonnes, on constate que l’on a l’aide de deux études paramétriques de relativement faibles amplitudes sur G_{crit} et φ_{frag} , on obtient des résultats en accord qualitatif avec l’expérience. La zone colonnaire est plus épaisse en haut du lingot (avant la masselotte) tandis que dans les macrographies des zones mixtes sont présentes. La macroségrégation prédite est encore trop négative dans la partie inférieure mais n’est pas si éloignée des mesures expérimentales, considérant également les imprécisions de la carte en Figure IV.2-3, qui a été établie par interpolation. En haut du lingot les résultats sont similaires à ceux déjà obtenus avec une version plus ancienne du modèle, à l’exception notable de la disparition des « veines ségréguées » qui ont presque disparues dans les présents résultats.

Conclusions et perspectives

Synthèse

Le travail présenté ici porte sur la modélisation des Transitions Colonnaire-Equiaxe (TCE) et Equiaxe-Colonnaire (TEC) dans les coulées en lingot et l'impact de ces transitions sur la taille des structures, leur morphologie ainsi que les macroségrégations chimiques. Le modèle proposé a été implémenté au sein de SOLID, un code calcul développé au sein de l'équipe 302 de l'Institut Jean Lamour à Nancy et dédié à la modélisation de la solidification. Le code traite les phases solide et liquide selon une approche eulérienne et se base sur la technique de la prise de moyenne volumique. Les résultats de simulation obtenus sont comparés à des mesures obtenues lors de précédentes études sur des lingots d'acier ainsi qu'à des expériences et d'autres modèles de la littérature.

Les structures colonnaires trouvent leur origine lors de la compétition de croissance qui a lieu dans la zone de peau des coulées située au contact du moule. Cette zone constituée de grains équiaxes de petites tailles est le siège de la première TEC. Par la suite, les structures colonnaires se développent en croissant dans une direction globale qui peut être approximée comme opposée à celle du flux de chaleur. Par ailleurs, des grains équiaxes apparaissent dans le liquide puis croissent devant le front colonnaire. La TCE a lieu lorsque les grains équiaxes bloquent l'avancée des structures colonnaires. Si les sources de grains équiaxes sont épuisées par la suite, il y a possibilité de former à nouveau des structures colonnaires. Cette TEC est particulièrement observée dans les lingots industriels de grande taille. Les sources des structures équiaxes peuvent être diverses :

- L'arrachement puis la survie (et éventuellement la multiplication) de cristaux qui se forment au contact du moule et qui sont arrachés pendant le remplissage, on parle alors de phénomène de « Big-Bang ».

-La germination hétérogène qui a lieu sur des impuretés ou des particules inoculantes volontairement ajoutées à l'alliage.

-La fragmentation du tissu dendritique colonnaire. Le transport des fragments ainsi créés vers le liquide devant le front est favorisé par la convection. Il est généralement admis que ce phénomène est une source importante de grains équiaxes dans les coulées industrielles non-inoculées.

Cependant, les modèles numériques de la littérature appliqués à la prédiction de la TCE utilisent toujours des lois de germination volumique pour les grains équiaxes, ce qui représente seulement les deux premiers phénomènes ci-dessus.

Dans le cadre de ce travail, on présente dans un premier chapitre le modèle développé pour les structures colonnaires seules. La représentation choisie, inspirée de la littérature (B. C. Martorano M.A 2003) simplifie chaque bras colonnaire comme un ensemble de sous-structures régulièrement espacées dont les enveloppes ont une forme octaédrique. L'avantage est que la croissance de ces sous-structures peut être traitée de manière identique à celle des grains équiaxes, ce qui simplifie les relations microscopiques utilisées. Le modèle de croissance dendritique utilisé distingue le liquide extragranulaire (à l'extérieur des enveloppes) du liquide intragranulaire (à l'intérieur des enveloppes). En revanche, nous avons pu constater par la suite que cette représentation ne permet pas de prédire correctement les morphologies des structures colonnaires dans le sens où

pratiquement tous les résultats prédisent des morphologies cellulaires pour les structures colonnaires. L'impact sur la position de la TCE est faible car la maturation des structures colonnaires se fait principalement en arrière du front alors que c'est l'interaction des grains équiaxes avec les pointes primaires colonnaires qui est importante pour prédire TCE. C'est en effet au niveau du front colonnaire que l'on observe de forts gradients de concentration. On arrive ainsi à la particularité de notre modèle qui est de proposer une modélisation plus précise de la croissance des structures dans les VER qui contiennent le front colonnaire. Dans ces VER, on va alors distinguer une zone colonnaire et une zone extra-colonnaire (entièrement liquide en l'absence de grains équiaxes). Lors de la croissance des structures, ces deux zones sont supposées ne pas échanger de soluté. Ceci est justifié par le fait que la diffusion chimique à l'échelle du VER est négligeable durant le temps de passage du front colonnaire dans le VER. En revanche, la diffusion à l'échelle de l'espacement dendritique primaire n'est pas négligeable, ce qui conduit à l'enrichissement du liquide extragranulaire colonnaire. De plus, on suppose l'équilibre thermique à l'échelle du VER, cette hypothèse étant basée sur le même type d'analyse en considérant cette fois la diffusivité thermique. Enfin, l'hypothèse la plus forte de notre modèle concerne la modélisation du transport dans les VER contenant le front : on y suppose que la vitesse du solide est nulle dans le repère du produit (ce qui est vrai pour les structures colonnaires) et on traite le transport du soluté liquide de manière simplifiée.

Des modèles décrivant l'avancée et la propagation des structures colonnaires sont également proposés pour permettre de suivre la position du front colonnaire dans le système. Le modèle développé est par la suite comparé sur un cas de solidification purement à deux autres modèles de front-tracking et d'automates cellulaires (Carazonni T. 2012). Les résultats obtenus sont très proches de ceux des modèles cités ci-dessus excepté lors de la transformation eutectique. Ceci est dû au fait que notre modèle ne prend pas en compte la croissance des structures eutectiques.

Dans un second temps (Chapitre III), on introduit dans le modèle purement colonnaire l'apparition et la croissance des structures équiaxes. On prend ainsi en compte la présence simultanée de structures colonnaires et équiaxes dans les VER contenant le front. La germination et la croissance des grains équiaxes sont alors modélisées dans la zone extracolonnaire des VER contenant le front ainsi que dans les VER ne contenant pas de structures colonnaires. Par ailleurs, les simplifications faites sur le transport (notamment l'absence de mouvement du solide dans les VER contenant le front, cf. Equation (3.2) p.119) permettent de minimiser les modifications à apporter à la modélisation du transport. Deux mécanismes différents sont implémentés afin de prédire la TCE :

- Le blocage dit « solutal » (B. C. Martorano M.A 2003). Le modèle tel qu'il a été construit prend en compte intrinsèquement ce mécanisme et on observe que la vitesse du front s'annule lorsque le liquide devant le front se retrouve à l'équilibre thermodynamique.
- Le mécanisme de blocage introduit par Hunt (Hunt J.D 1984). Lorsque la fraction locale de grains équiaxes devant le front colonnaire devient supérieure à une valeur critique, on stoppe la progression du front à cet endroit.

Les différentes sources de grains équiaxes présentées ci-dessus sont modélisées de deux manières distinctes :

- La germination hétérogène et le phénomène de « Big-Bang » sont modélisées par une distribution volumique initiale de germes, chaque classe de germes étant activée pour une surfusion donnée.
- La fragmentation est modélisée par un flux surfacique de grains que l'on injecte dans les VER voisins

de ceux contenant le front. Dans un premier temps, on considère un flux constant et on ne pose pas de conditions particulières sauf à vérifier que la quantité de solide représentée par les fragments créés est négligeable par rapport à celle dans la zone pâteuse des structures colonnaires. Cette hypothèse est vérifiée lorsque l'on considère une taille initiale des fragments de l'ordre du micron. Enfin, on présente un modèle simplifié du phénomène d'ECT (exceptée l'ECT ayant lieu dans la zone de peau des coulées). Les structures colonnaires sont supposées se former devant une zone de grains équiaxes bloqués et si le liquide devant cette zone est en surfusion, vide de grains et vide de germes. Le modèle ainsi complété est utilisé pour modéliser la TCE dans des lingots de quelques kilogrammes composés d'Al-Si et le modèle est comparé aux résultats expérimentaux. Le modèle reproduit bien la position expérimentale de la TCE bien qu'il prédise des tailles finales de grains équiaxes légèrement supérieures à l'expérience.

Dans le dernier chapitre, le modèle est appliqué aux cas industriels de deux lingots d'acier de 6,2 tonnes et 3,3 tonnes coulés respectivement par Ascométal et Aubert&Duval. Notre modèle permet de modéliser des systèmes de cette taille voire supérieure pour des temps de calculs raisonnables et cela en dépit du fait que le code n'est pas parallélisé. Afin de comparer les simulations et l'expérience on cherche à retrouver en premier lieu la position expérimentale de la TCE et ensuite on compare des profils axiaux et radiaux de ségrégation en carbone ainsi que la morphologie des grains équiaxes. Les premiers résultats sur le lingot de 6,2 tonnes nous amènent à une première conclusion importante : il n'est pas possible de retrouver la TCE expérimentale en considérant la germination volumique comme unique source de grains équiaxes. On prédit alors une épaisseur trop fine de la zone colonnaire en bas du lingot mais des structures entièrement colonnaires dans la partie haute du lingot. Les résultats pour la morphologie des grains équiaxes ne sont pas non plus en accord avec l'expérience. Ceci semble indiquer que les phénomènes de Big-Bang et de germination hétérogène ne peuvent expliquer à eux seuls la formation de la zone équiaxe. Dans un second temps, on applique alors notre modèle de fragmentation à ce lingot. On considère d'abord que la fragmentation est possible dès que les structures colonnaires apparaissent et on utilise un flux de fragments constant et homogène le long du front colonnaire. Bien que la prédiction de la TCE soit améliorée, on observe tout de même une épaisseur de la zone colonnaire trop fine en bas du lingot et généralement trop importante dans la partie haute. Par la suite, on introduit un critère sur le gradient thermique devant le front colonnaire comme condition pour le déclenchement de la fragmentation. Ainsi l'injection surfacique de grains équiaxes n'a lieu que si le gradient thermique est inférieur à la valeur critique. Ce critère est basé sur le phénomène de déstabilisation des structures colonnaires proposé par Gandin (Gandin Ch.-A 2000). La fragmentation est également supposée avoir lieu en cas de refusion du front colonnaire, un phénomène qui a été observé expérimentalement au niveau de la masselotte exothermique sur le lingot étudié. A l'aide de ces nouveaux critères, on prédit bien la position expérimentale de la TCE. On détermine alors que la masselotte est la source principale de grains équiaxes tout au long de la solidification. Ainsi, jusqu'à 75% du nombre total de grains équiaxes provient de cette zone de seulement 30 cm de hauteur. Ceci est dû aux gradients thermiques réduits dans cette zone ainsi qu'au phénomène de refusion lors du rejet de chaleur de la poudre exothermique. On retrouve aussi qualitativement la ségrégation mesurée en carbone, bien que la ségrégation négative dans la partie centrale du lingot (particulièrement entre 0,5 m et 1m de hauteur) soit sous-estimée. Les morphologies calculées des grains équiaxes reproduisent la tendance expérimentale générale (plus globulaire dans ma partie

basse et dendritique dans la partie haute) mais les différences de morphologies sont moins marquées que dans l'expérience. On vérifie également que les calculs pour un alliage multiconstitué ou binaire Fe-C présentent peu de différences entre eux.

Enfin on vérifie sur le lingot de 3,3 tonnes que notre modèle et les critères établis précédemment pour l'amorce du phénomène de fragmentation permettent de prédire la TCE et la ségrégation en carbone pour une autre nuance d'acier et une nouvelle géométrie de lingot.

Perspectives

Le modèle SOLID permet désormais de prédire la croissance des structures colonnaires, la TCE et l'ECT dans des systèmes de tailles industrielles et en prenant en compte le transport des grains équiaxes. Il reste néanmoins encore un travail important à faire tant du point de vue numérique et de la compréhension des phénomènes physiques avant de pouvoir avoir une prédiction quantitative à la fois de la TCE, de la macroségrégation et de la taille et la morphologie des structures.

Indépendamment de la modélisation des structures colonnaires, certaines parties du modèle restent à améliorer. Numériquement, le modèle n'est pas parallélisé et est limité aux calculs en 2D. Concernant les phénomènes de transport, nous avons remarqué que l'hypothèse que le liquide intragranulaire se déplace avec le solide est discutable. Par ailleurs l'utilisation d'une taille caractéristique constante pour le calcul de la perméabilité dans les zones poreuses impacte la prédiction de la convection dans la zone pâteuse. Il faudrait en toute rigueur considérer un tenseur de perméabilité, fortement anisotrope dans la zone colonnaire (Goyeau B. 2004). Cependant comme le font remarquer les auteurs les caractérisations expérimentales n'ont pas encore suffisamment abouties afin de proposer un modèle plus fin que Carman-Kozeny que l'on utilise ici. De même l'utilisation d'une unique fraction de blocage des grains équiaxes pour différencier entre la zone libre et bloquée est une autre limite du modèle, en l'absence de description plus physique de l'interaction des grains équiaxes entre eux et avec l'écoulement.

La modélisation du transport telle que nous l'avons proposé dans les VER contenant le front colonnaire est également basée sur des hypothèses fortes. Notamment on a supposé que le fait de négliger le mouvement des grains équiaxes dans ces VER avait un impact limité sur la position de la TCE tant que la taille des VER est faible devant la taille du système. Numériquement, il serait utile de mener une analyse plus poussée de l'influence de la taille de maille sur la position de la TCE en présence de mouvement des grains équiaxes. Une étape ultérieure serait de modifier les équations de transport afin de s'affranchir de cette hypothèse ou en tout cas d'améliorer la modélisation du transport du liquide dans la zone du front colonnaire que nous simplifions fortement par l'hypothèse (2.52) p. 94.

La modélisation de la fragmentation par un flux surfacique de grains devant le front est évidemment une forte simplification du phénomène réel. Néanmoins si on considère la complexité du phénomène et l'absence de quantification expérimentale du nombre de fragments créés et de la proportion qui survit et transportée dans le liquide devant le front, il semble difficile de proposer une modélisation plus réaliste. Le problème majeur reste la non-conservation de masse (et des autres grandeurs). En effet, la quantité de solide représentée par les fragments créés devrait être

logiquement soustraite aux structures colonnaires, ce qui n'est pas le cas pour le moment. L'erreur est négligeable pour des tailles de fragments d'environ un micron. Assurer la conservation des grandeurs permettrait d'utiliser des tailles de fragments plus réalistes. Enfin, il serait intéressant de reproduire les expériences de Gandin sur des alliages d'acier afin de vérifier le critère sur le gradient thermique dont la validité peut être discutée dans les conditions du procédé industriel.

Pour finir, on remarque que l'étape de remplissage est négligée dans notre modèle. Or puisque le moule est pratiquement à température ambiante, il est possible que même si le métal est coulé avec une surchauffe importante, la mise en place des structures se fait pendant le remplissage qui dure environ 10 minutes pour le lingot de 6,2 tonnes. On peut estimer l'épaisseur de la zone colonnaire en utilisant un des modèles analytiques de la littérature (Dantzig J. 2009). Le modèle choisi ici est valable en conduction pure, pour la solidification en front plan d'un corps pur (le rejet de soluté est négligé) et où le moule et le métal en solidification sont deux domaines semi-infinis. On reproduit ci-dessous l'expression analytique obtenue par les auteurs (équation 5.28 dans (Dantzig J. 2009)) qui doit être résolue pour ϕ :

$$\left[\phi \exp(\phi^2) - \frac{c_{p,s}(T_\infty - T_f)}{\Delta h_f \sqrt{\pi}} \frac{\left(\exp\left(1 - \frac{\alpha_s}{\alpha_l} \phi^2\right) \right)}{\operatorname{erfc}\left(\phi \sqrt{\alpha_s / \alpha_l}\right)} \frac{\sqrt{e_l}}{\sqrt{e_s}} \right] \left[\operatorname{erf}(\phi) + \sqrt{\frac{e_s}{e_m}} \right] = \frac{Ste}{\sqrt{\pi}}$$

Où ϕ est le paramètre à déterminer, sachant que la position du front solide $x^*(t)$ peut être calculée par $x^*(t) = 2\phi\sqrt{\alpha_s t}$. $Ste = \frac{T_f - T_0}{c_{p,s}}$ est le nombre de Stefan. T_0 et T_∞ sont les températures initiales du moule et du métal respectivement et T_f la température de fusion du corps pur. La notation e représente l'effusivité et α la diffusivité thermique pour le liquide (l), le solide (s) et le moule (m). Pour l'alliage binaire Fe-1,01%pds C en considérant 70°C de surchauffe et $T_0 = 100^\circ\text{C}$ on trouve $\phi \approx 0,65$ et au bout de 10 minutes $x^*(t) = 10,5 \text{ cm}$. Les auteurs proposent également une expression analytique dans le cas de la solidification en front plan d'un alliage binaire et on a pu vérifier que l'on obtenait une épaisseur solidifiée similaire. On en déduit qu'il est probable que la TCE ait déjà eu lieu dans la partie basse du lingot à la fin du remplissage et ce même si le métal dans les parties supérieures est encore en surchauffe. Le remplissage devra donc être pris en compte par la suite dans notre modèle.

Indépendamment de la modélisation du remplissage, l'influence de la surchauffe initiale dans le liquide n'a pas été présentée ici. Des premiers calculs paramétriques ont pu montrer que globalement, on favorise les structures colonnaires mais cet effet reste faible jusqu'à 40°C de surchauffe initiale. Une étude plus approfondie de l'effet de la surchauffe devrait également être menée.

ANNEXES

A. Présentation du modèle SOLID

Le code SOLID développé au sein de l'Institut Jean Lamour est basé sur un modèle diphasique Euler-Euler. Les échelles macroscopiques (représentant les phénomènes de transport) et microscopiques (croissance des grains et nucléation) sont supposées séparables car opérant à des échelles de temps différentes. Par conséquent lors d'une première étape, les équations de la chaleur, de conservation de la masse, de la quantité de mouvement, du soluté, des grains et des germes sont résolues. Une seconde étape dite microscopique décrit la germination, la croissance des enveloppes et le changement de phases.

- **Modèle macroscopique : équations moyennées**

Tableau A-12 : Equations moyennées dans le modèle implémenté dans SOLID

Conservation de la masse totale	$\frac{\partial(\rho_s g_s + \rho_l g_l)}{\partial t} + \nabla(\rho_s g_s \vec{v}_s + \rho_l g_l \vec{v}_l) = 0 \quad (\text{A.1})$
Bilan sur la masse de solide	$\frac{\partial(\rho_s g_s)}{\partial t} + \nabla(\rho_s g_s \vec{v}_s) = \Gamma_s + \Phi_s \quad (\text{A.2})$
Bilan d'énergie (équation de la chaleur)	$\frac{\partial(\rho_s g_s h_s + \rho_l g_l h_l)}{\partial t} + \nabla(\rho_s g_s h_s \vec{v}_s + \rho_l g_l h_l \vec{v}_l) = \nabla(\lambda \vec{\nabla}(T)) \quad (\text{A.3})$
Bilan sur la masse de soluté dans la phase liquide	$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho_l g_l \langle C_l^i \rangle^l)}{\partial t} + \nabla(\rho_l g_l \langle C_l^i \rangle^l \vec{v}_l) \\ = -\Gamma_s C_l^{i,*} + \frac{\rho_l S_v^{env} D_l^i}{\delta_l^{i,env}} \frac{g_l}{g_e} (C_l^{i,*} - \langle C_l^i \rangle^l) \\ - \Phi_s k_i \langle C_l^i \rangle^l \end{aligned} \quad (\text{A.4})$
Bilan sur la masse de soluté dans la phase solide	$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho_s g_s \langle C_s^i \rangle^s)}{\partial t} + \nabla(\rho_s g_s \langle C_s^i \rangle^s \vec{v}_s) = \Gamma_s C_s^{i,*} + \frac{\rho_s S_v^s D_s^i}{\delta_s^i} (C_s^{i,*} - \langle C_s^i \rangle^s) + \\ \Phi_s k_i \langle C_l^i \rangle^l \end{aligned} \quad (\text{A.5})$
Bilan pour la densité de grains	$\frac{\partial n_{eqx}}{\partial t} + \nabla(n_{eqx} \langle \vec{v}_s \rangle^s) = \sum_{1 \leq j \leq N_{nucl}} \Phi_{nucl}^j + \sum_{1 \leq i \leq N_{vois}} \Phi_{frag}^i \quad (\text{A.6})$
Bilan pour la densité de germes	$\frac{\partial n_{nucl}^j}{\partial t} + \nabla(n_{nucl}^j \langle \vec{v}_l \rangle^l) = - \sum_{1 \leq j \leq N_{nucl}} \Phi_{nucl}^j \quad (\text{A.7})$

Bilan pour la fraction d'enveloppe	$\frac{\partial g_{env}}{\partial t} + \nabla(g_{env} \langle \vec{v}_s \rangle^s) = \Gamma_{env} + \frac{1}{\rho_s} \Phi_s \quad (A.8)$
------------------------------------	--

Les détails du modèle sont reportés dans (Z. M. Combeau H. 2009), (C. H. Zaloznik M. 2010) et (Bedel M. 2014).

Le modèle prend en compte le mouvement du liquide induit par la convection thermosolutale. Le modèle prend aussi en compte le mouvement du liquide dû au retrait lors de la solidification en considérant un retrait constant $c_{retrait} = \frac{\rho_s^{ref} - \rho_l^{ref}}{\rho_s^{ref}}$.

Deux régimes sont distingués selon le comportement de la phase solide. Lorsque la fraction d'enveloppe dépasse une valeur limite notée g_{env}^{bloc} , les grains sont supposés bloqués et l'écoulement du liquide dans ce milieu poreux est décrit par une équation de conservation de la quantité de mouvement incluant un terme de Darcy afin de modéliser les interactions liquide-solide. La perméabilité du milieu poreux est modélisée par la loi de Kozeny-Carman, fonction d'une dimension caractéristique de la microstructure, notée DAS . Lorsque la fraction d'enveloppe est plus faible que cette valeur limite, les grains sont supposés libres de se déplacer dans le liquide.

Dans la zone pâteuse ($g_{env} < g_{env}^{bloc}$), on résout le bilan total de quantité de mouvement :

$$\frac{(\rho_l g_l \langle \vec{v}_l \rangle^l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l g_l \langle \vec{v}_l \rangle^l \cdot \langle \vec{v}_l \rangle^l) = \vec{\nabla} \left(\mu_l \nabla (g_l \langle \vec{v}_l \rangle^l) \right) - \vec{\nabla}(p) + \rho_m^b \vec{g} \quad (A.9)$$

Où $\rho_m^b = \rho_s^b g_s + \rho_l^b (1 - g_s)$ avec $\rho_l^b = \rho_l^{ref} \left(1 - \beta_T (T - T_{ref}) - \sum_i \beta_c^i (C_i^i - C_{ref}^i) \right)$ (approximation de Boussinesq) et $\rho_s^b = \frac{\rho_{ref}}{1 - c_{retrait}}$.

La vitesse du solide est déduite de la vitesse du liquide par la relation :

$$\langle \vec{v}_s \rangle^s = \langle \vec{v}_l \rangle^l + \frac{4d_g^2(1 - g_{env})}{3C_d \mu_l Re} \left(-\vec{\nabla}(p) + \rho_g \vec{g} \right) \quad (A.10)$$

Où d_g est le diamètre du grain moyen, $Re = \frac{\rho_l d_g |\langle \vec{v}_s \rangle^s - \langle \vec{v}_l \rangle^l|}{\mu_l}$ et $\rho_g = \rho_s g_s + \rho_l (1 - g_s)$. Le coefficient C_d est déterminé par :

$$C_d = \frac{48 C_{ke} (1 - g_l)}{Re} + C_{ie} \quad (A.11)$$

$$\text{Avec } \begin{cases} \text{Si } g_{env} \leq 0,5 : C_{ke} = \frac{25}{6} \text{ et } C_{ie} = \frac{7}{3} \\ \text{Si } g_{env} > 0,5 : C_{ke} = \frac{1}{2} \frac{(1 - g_{env})^3}{g_{env}} \frac{1 + 4,7 g_{env}}{1 + 1,83 g_{env}} \text{ et } C_{ie} = \frac{24(10^E - 1)}{Re \left[1 - 0,9(0,75 - g_{env})^{\frac{1}{3}} g_{env}^{\frac{2}{3}} \right]^3} \end{cases}$$

$$\text{Où } E = 0,261 Re^{0,369} - 0,105 Re^{0,431} - \frac{0,124}{1 + (\log_{10} Re)^2}$$

Dans la zone poreuse ($g_{env} \geq g_{env}^{bloc}$), le bilan de quantité de mouvement dans la phase liquide :

$$\begin{aligned} \frac{(\rho_l g_l \langle \vec{v}_l \rangle^l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l g_l \langle \vec{v}_l \rangle^l \cdot \langle \vec{v}_l \rangle^l) \\ = \vec{\nabla} \left(\mu_l \nabla (g_l \langle \vec{v}_l \rangle^l) \right) - g_l \vec{\nabla}(p) - \frac{g_l^2 \mu_l}{K} + \rho_l^b g_l \vec{g} \end{aligned} \quad (A.12)$$

La perméabilité est calculée selon le modèle de Carman-Kozeny $K = \frac{DAS^2}{20\pi^2} \frac{g_l^3}{(1-g_l)^2}$.

L. Heyvaert a récemment développé dans SOLID un modèle pour décrire plus précisément le mouvement des grains que nous ne détaillerons pas ici puisque (sauf indication contraire) nous n'utiliserons pas ce nouveau modèle dans les calculs effectués.

- **Modèle microscopique : nucléation et croissance**

Le modèle de croissance de la structure constituant les équiaxes (en tant que grain) et les colonnaires (en tant que sous-structure) est exposé en détail dans le chapitre II et n'est donc que résumé brièvement ici. Ce modèle suppose que la croissance du grain moyen dans un VER peut être traitée indépendamment dans chaque VER.

A l'échelle macroscopique, aucune distinction n'est faite entre les liquides intra- et extra-granulaires mais à l'échelle microscopique on distingue le liquide intragranulaire où la diffusion est parfaite du liquide extragranulaire où cette diffusion est finie et où le gradient est approximé par une expression analytique de la longueur de diffusion (cf. (Bedel M. 2014)). Le liquide dans l'enveloppe du grain est donc supposé à l'équilibre avec l'interface solide/liquide. En conséquence on peut écrire $C_l^{*,i} = k_i C_s^{i,*} = C_d^i$ et pour la température moyenne (supposé uniforme dans le VER) : $T = T_f + \sum_i m_i^i C_l^{i,*}$.

La différence entre cette température T et la température locale de liquidus $T_{liq} = T_f + \sum_i m_i^i \langle C_l^i \rangle^l$ est le moteur de la croissance des enveloppes de la structure considérée ici, la forme de l'enveloppe étant supposée octaédrique. La morphologie des grains équiaxes peut alors être caractérisée par la fraction interne de solide équiaxe $g_i = \frac{g_s}{g_{env}}$.

La formation de grains équiaxes se fait soit par germination hétérogène soit par fragmentation. Le processus de germination est expliqué au chapitre II. Il est modélisé par une loi de germination instantanée où la distribution en classes des germes en fonction de leur taille amène à distinguer n classes où à chaque densité de germe n_{nucl}^j on associe une surfusion de germination ΔT_{nucl}^j .

Dans le chapitre IV, on considère également l'origine des grains équiaxes par fragmentation, modélisé alors par une injection surfacique. L'apparition de grains équiaxes dans un volume dépend alors des états des volumes voisins. Un premier prérequis est que les volumes voisins contiennent le front colonnaire et que celui-ci ne soit pas bloqué par les structures équiaxes (blocage « mécanique). D'autres conditions sur la fragmentation peuvent être imposées, comme indiqué dans le chapitre III.

B. Données thermodynamiques

Tableau A- 13 : Propriétés de l'alliage Al-3%pds Cu (Annexe C)

Propriété	Symbole		
Densité (à la température de liquidus)	ρ	2359	$kg.m^{-3}$
Chaleur spécifique	c_p	1441,3	$J.kg^{-1}.K^{-1}$
Coefficient de diffusion dans le liquide	D_l	5.10^{-9}	$m^2.s^{-1}$
Chaleur latente	Δh_f	$4,324.10^5$	$J.kg^{-1}$
Température de fusion du corps pur	T_f	659,96	$^{\circ}C$
Température de solidus (eutectique)	T_{eut}	547,85	$^{\circ}C$
Pente de liquidus	m_l	-3,37	$K.\%pds^{-1}$
Coefficient de partage	k	0,17	-

Tableau A- 14 : Propriétés de l'alliage Al-4,5%pds Cu (Chapitre II)

Propriété	Symbole		
Densité (à la température de liquidus)	ρ	2359	$kg.m^{-3}$
Chaleur spécifique	c_p	1441,3	$J.kg^{-1}.K^{-1}$
Coefficient de diffusion dans le liquide	D_l	5.10^{-9}	$m^2.s^{-1}$
Chaleur latente	Δh_f	$4,324.10^5$	$J.kg^{-1}$
Température de fusion du corps pur	T_f	660	$^{\circ}C$
Température de solidus (eutectique)	T_{eut}	548,12	$^{\circ}C$
Pente de liquidus	m_l	-3,37	$K.\%pds^{-1}$
Coefficient de partage	k	0,17	-

Tableau A-15 : Propriétés de l'alliage Al-7%pds Si (Chapitre II calcul en colonneur pur)

Propriété	Symbole		
Densité (à la température de liquidus)	ρ	2452	$kg.m^{-3}$
Chaleur spécifique	c_p	1060	$J.kg^{-1}.K^{-1}$
Conductivité thermique dans le liquide	λ_l	70	$W.m^{-1}.K^{-1}$
Conductivité thermique dans le solide	λ_s	70	$W.m^{-1}.K^{-1}$
Coefficient de diffusion dans le liquide	D_l	$6,45.10^{-9}$	$m^2.s^{-1}$
Coefficient de diffusion dans le solide	D_s	10^{-12}	$m^2.s^{-1}$
Chaleur latente	Δh_f	$3,874.10^5$	$J.kg^{-1}$
Température de fusion du corps pur	T_f	663,5	$^{\circ}C$
Température de solidus (eutectique)	T_{eut}	577	$^{\circ}C$
Pente de liquidus	m_l	-6,5	$K.\%pds^{-1}$
Coefficient de partage	k	0,13	-

Tableau A-16 : Propriétés de l'alliage Al-7%pds Si (Chapitre III)

Propriété	Symbole		
Densité (à la température de liquidus)	ρ	2452	$kg.m^{-3}$
Coefficient de retrait $(\rho_s - \rho_l)/\rho_s$	C_{ret}	0,0651	—
Chaleur spécifique	c_p	1060	$J.kg^{-1}.K^{-1}$
Conductivité thermique dans le liquide	λ_l	61 à $T = 681\text{ °C}$ 66 sinon	$W.m^{-1}.K^{-1}$
Conductivité thermique dans le solide	λ_s	170 à $T = 300\text{ °C}$ 165 à $T = 400\text{ °C}$ 155 à $T = 500\text{ °C}$ 145 à $T = 550\text{ °C}$ 139,6 sinon	$W.m^{-1}.K^{-1}$
Coefficient de diffusion dans le liquide	D_l	$6,45.10^{-9}$	$m^2.s^{-1}$
Coefficient de diffusion dans le solide	D_s	10^{-12}	$m^2.s^{-1}$
Chaleur latente	Δh_f	$3,874.10^5$	$J.kg^{-1}$
Température de fusion du corps pur	T_f	663,5	$^{\circ}C$
Température de solidus (eutectique)	T_{eut}	577	$^{\circ}C$
Pente de liquidus	m_l	-6,5	$K.\%pds^{-1}$
Coefficient de partage	k	0,13	—

Tableau A-17 : Propriétés de l'alliage Fe-1,01%pds C (binaire pour la nuance 100C6) et paramètres hydrodynamiques pour le lingot Ascométal de 6,2 tonnes (Chapitres II et IV).

Propriété	Symbole		
Densité (à la température de liquidus)	ρ	7060	$kg.m^{-3}$
Coefficient de retrait $(\rho_s - \rho_l)/\rho_s$	C_{ret}	0,048	—
Chaleur spécifique	c_p	500	$J.kg^{-1}.K^{-1}$
Conductivité thermique dans le liquide	λ_l	30	$W.m^{-1}.K^{-1}$
Conductivité thermique dans le solide	λ_s	40	$W.m^{-1}.K^{-1}$
Coefficient de diffusion dans le liquide	D_l	2.10^{-8}	$m^2.s^{-1}$
Coefficient de diffusion dans le solide	D_s	$5,19.10^{-11}$	$m^2.s^{-1}$
Chaleur latente	Δh_f	$3,09.10^5$	$J.kg^{-1}$
Viscosité dynamique du liquide	μ_l	$4,2.10^{-3}$	$Pa.s$
Coefficient de dilatation thermique	β_T	$-1,07.10^{-4}$	K^{-1}
Coefficient d'expansion solutal	β_C	$-1,4.10^{-2}$	$\%pds^{-1}$
Température de fusion du corps pur	T_f	1538	$^{\circ}C$
Température de solidus (eutectique)	T_{eut}	1347	$^{\circ}C$
Pente de liquidus	m_l	-62,3	$K.\%pds^{-1}$
Coefficient de partage	k	0,358	—
Fraction de blocage des grains équiaxes	g_{env}^{bloc}	0,4	—
Taille caractéristique pour la perméabilité	DAS	5.10^{-4}	m
Distance interdendritique primaire colonnaire	λ_1	10^{-3}	m

Tableau A-18 Propriétés spécifiques aux éléments d'alliage supplémentaires de la nuance 100C6 (chapitre IV)

	Cr	Mn	Si	Ni	Mo	S	P
Concentration nominale C_0 [%pds]	1,34	0,33	0,23	0,11	0,03	0,021	0,015
Pente de liquidus m_l [K. %pds ⁻¹]	-1,8	-5	-18,7	-3,2	-7,8	-33	-33
Coefficient de partage k	0,86	0,79	0,8	0,9	0,6	0,03	0,06
Coefficient d'expansion solutal β_C [%pds ⁻¹]	-10^{-3}	-2.10^{-3}	$-1,2.10^{-2}$	$1,4.10^{-3}$	2.10^{-3}	$-1,3.10^{-2}$	$-1,1.10^{-2}$
Coefficient de diffusion dans le liquide D_l [m ² .s ⁻¹]	3.10^{-9}	$3,4.10^{-9}$	$1,2.10^{-9}$	$2,7.10^{-9}$	$2,5.10^{-9}$	$3,7.10^{-9}$	$1,3.10^{-9}$
Coefficient de diffusion dans le solide D_s [m ² .s ⁻¹]	$1,2.10^{-12}$	$1,2.10^{-13}$	$5,6.10^{-13}$	2.10^{-13}	2.10^{-13}	$3,3.10^{-11}$	$2,4.10^{-12}$

Tableau 19 Propriétés de l'alliage binaire Fe-0,36%pds C et paramètres hydrodynamiques pour le lingot Aubert&Duval de 3,3 tonnes (chapitre IV).

Propriété	Symbole		
Densité (à la température de liquidus)	ρ	6990	kg.m ⁻³
Coefficient de retrait $(\rho_s - \rho_l)/\rho_s$	C_{ret}	0,039	-
Chaleur spécifique	c_p	500	J.kg ⁻¹ .K ⁻¹
Conductivité thermique dans le liquide	λ_l	39,3	W.m ⁻¹ .K ⁻¹
Conductivité thermique dans le solide	λ_s	25	W.m ⁻¹ .K ⁻¹
Coefficient de diffusion dans le liquide	D_l	2.10^{-8}	m ² .s ⁻¹
Coefficient de diffusion dans le solide	D_s	$5,19.10^{-11}$	m ² .s ⁻¹
Chaleur latente	Δh_f	$2,71.10^5$	J.kg ⁻¹
Viscosité dynamique du liquide	μ_l	$4,2.10^{-3}$	Pa.s
Coefficient de dilatation thermique	β_T	$-1,07.10^{-4}$	K ⁻¹
Coefficient d'expansion solutal	β_C	$-1,4.10^{-2}$	%pds ⁻¹
Température de fusion du corps pur	T_f	1532	°C
Température de solidus (eutectique)	T_{eut}	1462	°C
Pente de liquidus	m_l	-80,45	K.%pds ⁻¹
Coefficient de partage	k	0,314	-
Fraction de blocage des grains équiaxes	g_{env}^{bloc}	0,4	-
Taille caractéristique pour la perméabilité	DAS	5.10^{-4}	m
Distance interdendritique primaire colonnaire	λ_1	10^{-3}	m

C. Validation du modèle de croissance des structures équiaxes

On a choisi ici de comparer en 0D les résultats du modèle SOLID et du modèle développé par Beckermann et coll. (B. C. Martorano M.A 2003). Cet autre modèle à prise de moyenne de la littérature a été validé de manière assez complète, avec des cas expérimentaux (W. C. Beckermann C. 1996) et en comparaison avec d'autres modèles (B. C. Wang C.Y 1993).

D'autre part, les auteurs ont également utilisé leur modèle afin de prédire la TCE obtenue expérimentalement sur la solidification dirigée d'alliages Al-Si (B. C. Martorano M.A 2003) ainsi que sur des alliages Al-Cu et Sn-Pb (B. C. Wang C.Y 1994). Le modèle de TCE implémenté dans SOLID étant en partie inspiré des travaux de Beckermann et coll., il est intéressant de vérifier que le modèle de croissance utilisé est capable de donner des résultats similaires, en commençant par la solidification équiaxe.

On étudie dans ce cas le refroidissement lent ($\dot{T} = -5.10^{-3} K.s^{-1}$) d'un petit système constitué d'un alliage binaire Al- 3% pds Cu. La taille du système correspond à celle d'un VER pour la prise de moyenne et on suppose notamment qu'elle est suffisamment réduite pour pouvoir négliger les échanges convectifs ainsi que les gradients thermiques au sein du système. Les données thermodynamiques de l'alliage considéré sont rappelées en Annexe B.

En outre, on reprend les hypothèses suivantes faites par les auteurs :

- La température dans le système est imposée et uniforme. On a $T(t) = T_0 - \dot{T} \times t$ où T_0 est la température initiale, prise au liquidus.
- La diffusion dans le solide est totalement négligée.
- On utilise la même relation que les auteurs pour la longueur de diffusion du soluté dans le liquide. Soit (cf. équations A-6 et A-7 dans (B. C. Martorano M.A 2003)) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \delta_l^{env} = \frac{R_g^2}{R_f^3 - R_g^3} \left[\left(\frac{R_f R_g}{Pe_{env}} + \frac{R_g^2}{Pe_{env}^2} - R_f^2 \right) e^{-Pe \left(\frac{R_f}{R_g} - 1 \right)} - \left(\frac{R_g^2}{Pe} + \frac{R_g^2}{Pe^2} - \frac{R_g^3}{R_e} \right) + \right. \\ \left. \frac{Pe R_f^3}{R_g} \left(e^{-Pe \left(\frac{R_f}{R_g} - 1 \right)} \frac{Iv \left(Pe \frac{R_f}{R_g} \right)}{Pe \frac{R_f}{R_g}} - \frac{Iv(Pe)}{Pe} \right) \right] \quad si \ Pe \geq 10^{-5} \\ \delta_l^{env} = R_g \left(1 - \frac{3}{2} R_g \frac{R_f^2 - R_g^2}{R_f^3 - R_g^3} \right) \quad si \ Pe < 10^{-5} \end{array} \right.$$

Où R_g est le rayon de grain et R_f le rayon final.

- La morphologie des enveloppes est supposée sphérique et non plus octaédrique.
- La vitesse de pointe est calculée par le modèle LGK (G. M. Lipton J. 1984).

La Figure C-10 montre les résultats numériques pour différents rayons de grains concernant la fraction interne $g_i = \frac{g_s}{g_{env}}$, la fraction d'enveloppe g_{env} et la concentration du liquide extragranulaire $\langle C_l \rangle^e$.

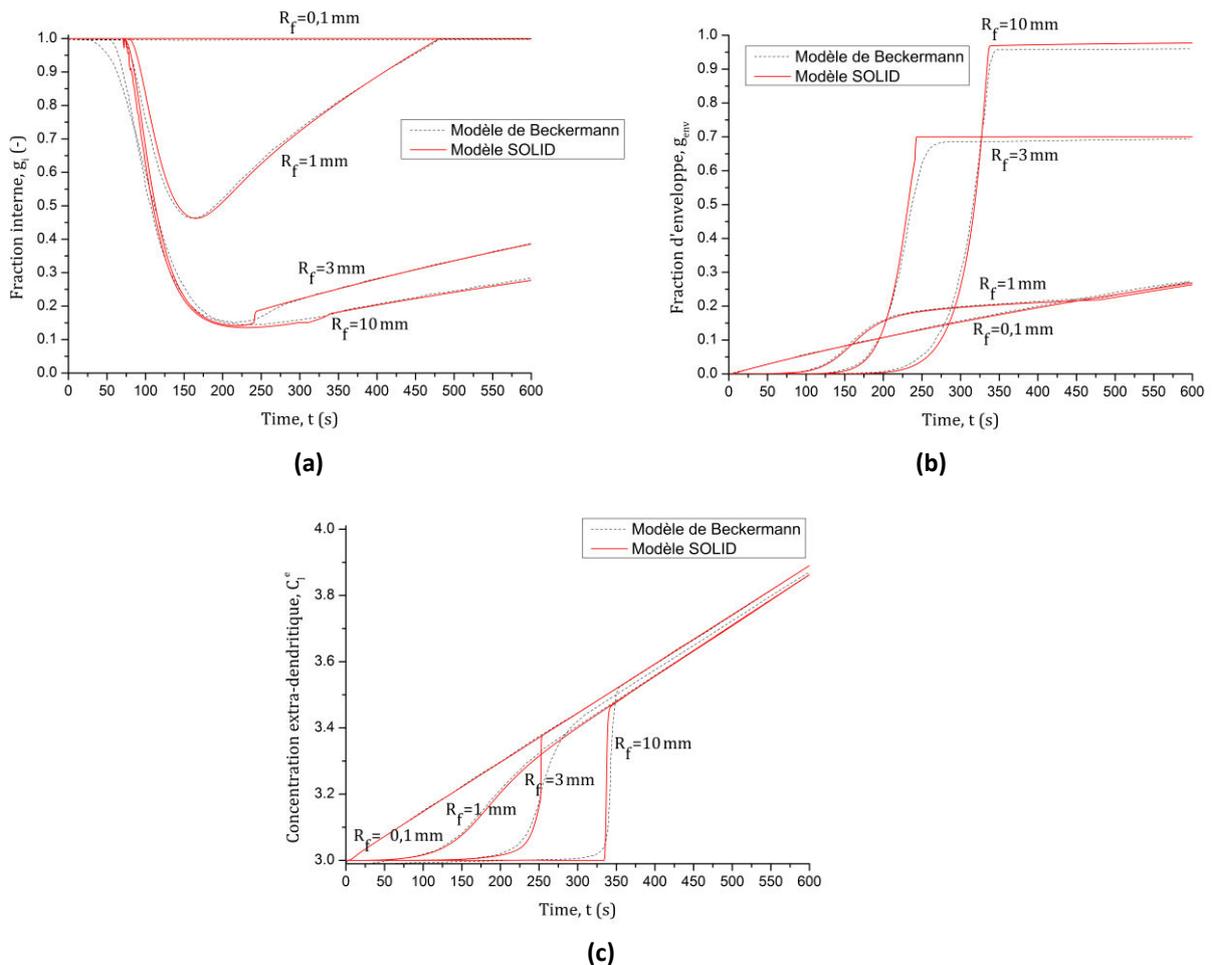


Figure C-10 : Comparaison des résultats du modèle SOLID avec ceux du modèle de Beckermann (B. C. Martorano M.A 2003). (a) : Fractions internes (b) : Fractions d'enveloppes (c) : Concentration du liquide extragranulaire

On constate que l'on obtient des résultats très proches de ceux du modèle de Beckermann. Pour les rayons les plus importants ($R_f = 3 \text{ mm}$ et $R_f = 10 \text{ mm}$, la croissance des grains est très faible durant une grande partie du calcul (150 s et 225 s respectivement). En conséquence, l'enrichissement du liquide extragranulaire est également négligeable durant cette même période. On constate également une dendritisation (diminution de la fraction interne g_i), les grains passant d'une morphologie initiale globulaire à une fraction interne inférieure à 0,2. Par la suite, la croissance des enveloppes et le retour du liquide à l'équilibre est brusque, en moins de 50 s. L'à-coup de fraction solide que l'on remarque sur les courbes de fractions internes de nos résultats est dû au fait que lorsque les enveloppes sont considérées comme étant en contact (généralement pour $g_{env} = 0,6$) le liquide total est remis à l'équilibre et on passe donc en solidification de type Scheil.

Par contre, pour les rayons les plus petits, l'enrichissement se fait depuis le début de la solidification et on se trouve même quasi-instantanément à l'équilibre dans le cas $R_f = 0,1 \text{ mm}$. Dans ce dernier cas, les grains restent globulaires et le chemin de solidification suit le modèle de Scheil. Enfin, on peut noter que pour les rayons $R_f = 0,1 \text{ mm}$ et $R_f = 1 \text{ mm}$ (soit $n_{eqx} = 2,4 \cdot 10^8 \text{ grains} \cdot \text{m}^{-3}$ et $n_{eqx} = 2,4 \cdot 10^{11} \text{ grains} \cdot \text{m}^{-3}$) le retour à l'équilibre a lieu pour des fractions

de grains encore faibles. Cela signifie donc qu'en présence d'une structure colonnaire, le mécanisme de blocage solutal sera prédominant sur le blocage mécanique de type Hunt pour ces tailles de grain.

On remarque aussi que les différences les plus notables entre les deux modèles ont lieu durant la phase de croissance lente des grains et pour les rayons les plus importants. En effet, si on se réfère au bilan de soluté dans le liquide intragranulaire :

$$\Gamma_s (C_l^* - C_s^*) = \frac{\rho_l S_v^{env} D_l}{\delta_l^{env}} (C_l^{i,*} - \langle C_l \rangle^e) + \rho_l g_d \frac{\partial C_l^*}{\partial t} \quad (C.1)$$

Dans l'équation (C.1), la diffusion dans le solide est négligée mais pas les termes en $\frac{\partial C_l^*}{\partial t}$, similairement à ce qui est réalisé dans les travaux de Beckermann et coll. Afin d'estimer l'erreur qui est faite sur le calcul de Γ_s en négligeant les termes en $\frac{\partial C_l^*}{\partial t}$, on peut étudier le rapport des deux termes de droite dans l'équation. Par ailleurs, pour $R_f = 3 \text{ mm}$ et $R_f = 10 \text{ mm}$ (mais pas pour les autres rayons) l'enrichissement du liquide extragranulaire est très faible juste avant le retour à l'équilibre. On peut supposer $\langle C_l \rangle^e \approx C_0$ où C_0 est la composition initiale du liquide. De plus, la température est donnée par : $T(t) = T_0 - \dot{T} \times t$ où T_0 est la température initiale (qui est aussi la température de liquidus nominale de l'alliage). On peut donc écrire : $C_l^*(t) = C_0 - \frac{\dot{T}}{m_l} \times t$. Ainsi, on a :

$$R = \frac{\rho_l g_d \frac{\partial C_l^*}{\partial t}}{\frac{\rho_l S_v^{env} D_l}{\delta_l^{env}} (C_l^* - \langle C_l \rangle^e)} = \frac{g_d \delta_l^{env}}{S_v^{env} D_l \times t} = \frac{g_{env}^{1/3} (1 - g_i) \delta_l^{env} R_f}{3 D_l \times t} \quad (C.2)$$

On remarque que l'erreur est d'autant plus importante que R_f est grand.

Tant que la vitesse de croissance est faible (et on vérifie donc $e_{env} = \frac{R_{env} v_{env}}{D_l} \ll 1$), l'expression de δ utilisée se rapproche de la diffusion autour d'une sphère stationnaire. On peut donc faire l'approximation suivante : $\delta_l^{env} \approx R_{env} = g_{env}^{1/3} R_f$. On trouve alors :

$$R = \frac{g_{env}^{2/3} (1 - g_i) R_f^2}{3 D_l \times t} \quad (C.3)$$

Par exemple pour $R_f = 10 \text{ mm}$ et $t \approx 200 \text{ s}$, on trouve $g_{env} \approx 0,08$ et $g_i \approx 0,15$ et au final $R \approx 1,1$.

Le terme en $\frac{\partial C_l^*}{\partial t}$ est donc du même ordre de grandeur. La différence sur les fractions d'enveloppe n'est pas visible sur la Figure C-10-a car les tailles de grains sont encore faibles, mais on remarque sur la Figure C-10-b que la croissance et donc la dendritisation des grains est retardée.

En revanche lorsque la croissance est rapide et que Pe_{env} est suffisamment élevée, l'expression de δ_l^{env} se rapproche de celle pour la croissance d'un front plan et donc : $\delta_l^{env} = \frac{D_l}{v_{env}}$.

Dans le cas d'enveloppes sphériques, $v_{env} = v_{tip}$ mais on peut également utiliser le fait que $v_{env} = \frac{\partial g_{env}/\partial t}{s_v^{env}}$.

On a alors :

$$R = \frac{g_{env}(1-g_i)}{\frac{\partial g_{env}}{\partial t} \times t} \quad (C.4)$$

A partir de la Figure C-10-a et la Figure C-10-b, on peut donc estimer pour $R_f = 10 \text{ mm}$ et $t \approx 300 \text{ s}$: $R \approx 0,1$.

Donc le terme en $\frac{\partial C_L^*}{\partial t}$ est effectivement négligeable à ce stade de la solidification, ce qui est cohérent avec les faibles différences observées sur les Figure C-10.

Cette analyse n'est plus valable pour les rayons plus faibles car le liquide extragranulaire s'enrichit dès le début de la solidification.

D. Conditions aux limites thermiques et propriétés des matériaux pour les lingots d'acier étudiés

- **Lingot Ascométal 6,2 tonnes**

Le détail des conditions aux limites utilisées pour simuler le lingot de 6,2 tonnes coulé par Ascométal est schématisé en Figure D-1.

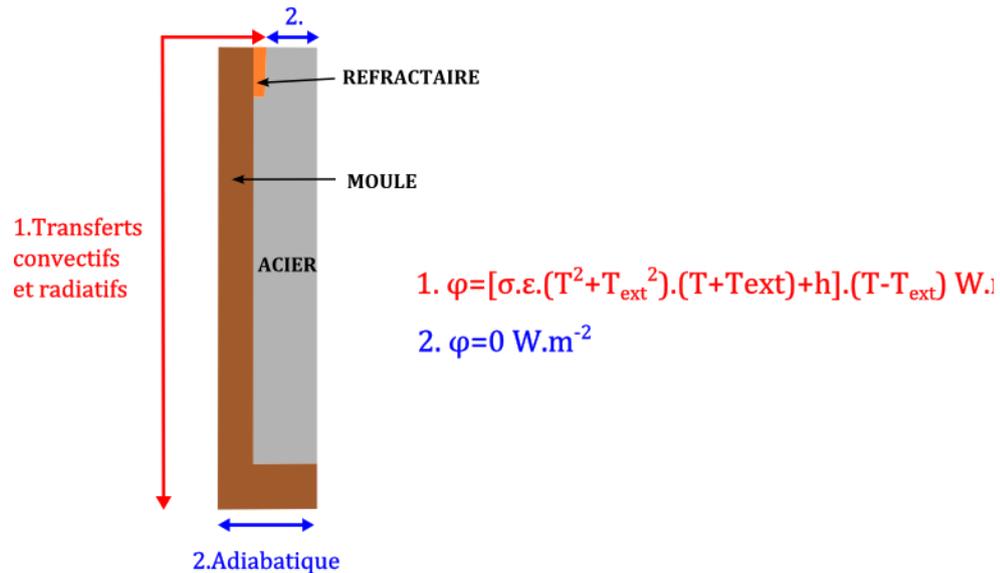


Figure D-1 Conditions aux limites thermiques utilisées pour le lingot Ascométal 6,2 tonnes (on ne modélise qu'un demi-lingot car on suppose une symétrie axiale du système).

Au contact entre le moule et l'acier, on suppose un contact parfait (aucune résistance thermique).

Pour les conditions avec transferts convectifs et radiatifs (en rouge) on utilise $h = 7,5 \text{ W.m}^{-2}\text{K}^{-1}$ et $T_{ext} = 20 \text{ }^\circ\text{C}$ constants. L'émissivité du moule ε est prise à $\varepsilon = 0,9$. σ est la constante de Stefan-Boltzmann ($\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W.m}^{-2}\text{K}^{-4}$).

Les données spécifiques aux matériaux de la lingotière (moule en fonte et réfractaire) sont reportées dans le Tableau D-1 .

Tableau D-1 Propriétés du moule et du matériau réfractaire pour les cas d'une masselotte isothermique et exothermique

PROPRIETES DU MOULE (FONTE)			
Propriété	Symbole		
Densité	ρ	7000	$kg.m^{-3}$
Conductivité thermique	λ	38 à $T \leq 100^\circ C$	$W.m^{-1}.K^{-1}$
		36 à $T = 400^\circ C$	
		34 à $T \geq 800^\circ C$	
Chaleur spécifique	c_p	551 à $T \leq 200^\circ C$	$J.kg^{-1}.K^{-1}$
		555 à $T = 300^\circ C$	
		605 à $T \geq 500^\circ C$	
Emissivité	ε	0,9	–
PROPRIETES DU REFRACTAIRE : CAS DE LA MASSELOTTE ISOTHERMIQUE			
Densité	ρ	640	$kg.m^{-3}$
Conductivité thermique	λ	0,4	$W.m^{-1}.K^{-1}$
Chaleur spécifique	c_p	920 à $T \leq 200^\circ C$	$J.kg^{-1}.K^{-1}$
		1140 à $T \geq 1000^\circ C$	
PROPRIETES DU REFRACTAIRE : CAS DE LA MASSELOTTE EXOTHERMIQUE			
Densité	ρ	640	$kg.m^{-3}$
Conductivité thermique	λ	0,3 à $T \leq 369^\circ C$	$W.m^{-1}.K^{-1}$
		0,34 à $T = 547^\circ C$	
		0,45 à $T = 712^\circ C$	
		0,6 à $T \geq 1137^\circ C$	
Chaleur spécifique	c_p	1020 à $T \leq 200^\circ C$	$J.kg^{-1}.K^{-1}$
		890 à $T = 700^\circ C$	
		940 à $T = 850^\circ C$	
		1110 à $T = 1100^\circ C$	
		1200 à $T \geq 1500^\circ C$	
Enthalpie massique totale dégagée	Δh_{exo}	$7,5.10^5$	$J.kg^{-1}$
Temps de début du dégagement exo	t_{exo}^{deb}	300	s
Temps de fin du dégagement exo	t_{exo}^{fin}	600	s

Dans le cas de la masselotte exothermique, on définit l'enthalpie totale dégagée par unité de masse du matériau réfractaire exothermique ΔH_{exo} . Cette quantité de chaleur est injectée directement dans le réfractaire et est équitablement répartie sur toute la durée d'action de la poudre exothermique. Par conséquent, la quantité de chaleur dégagée par unité de masse et de temps dans le réfractaire se calcule par $\frac{\Delta h_{tot}}{t_{exo}^{fin} - t_{exo}^{deb}}$.

- **Lingot Aubert&Duval 3,3 tonnes**

Le détail des conditions aux limites utilisées pour simuler le lingot de 3,3 tonnes coulé par Aubert&Duval est schématisé en Figure D-2.

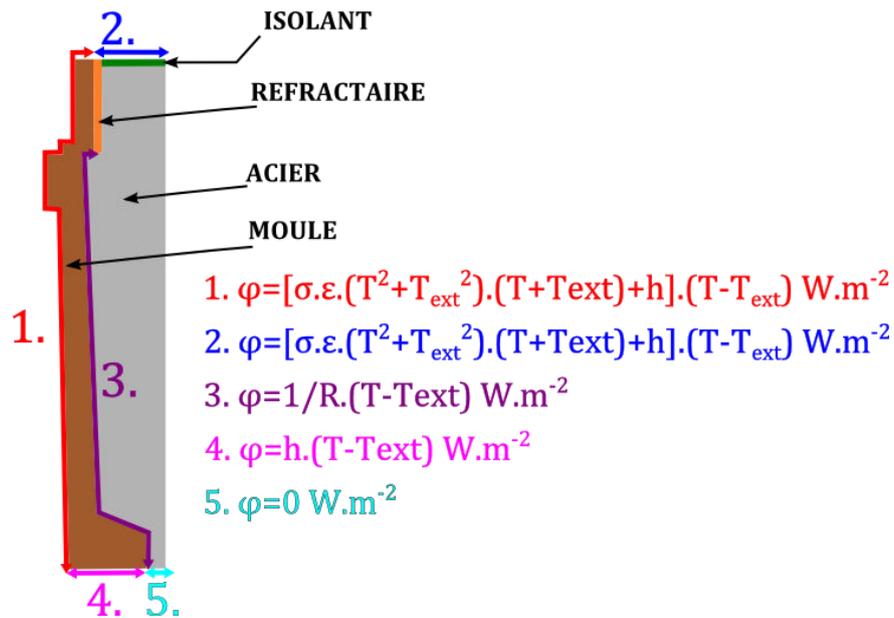


Figure D-2 Conditions aux limites thermiques utilisées pour le lingot Aubert&Duval 3,3 tonnes (on ne modélise qu'un demi-lingot car on suppose une symétrie axiale du système).

Pour la condition aux limites 1, entre le moule et l'extérieur, on utilise $h = 7,5 \text{ W.m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ et $T_{ext} = 20^\circ\text{C}$. L'émissivité du moule ε est prise à $\varepsilon = 0,9$.

Pour la condition aux limites 2, entre la couverture isolante et l'extérieure, on utilise $h = 5 \text{ W.m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ et $T_{ext} = 100^\circ\text{C}$. L'émissivité du matériau de couverture est prise à $\varepsilon = 0,5$. Le contact entre le moule et l'acier n'est pas considéré comme parfait et on suppose donc une résistance thermique R à ces endroits (conditions aux limites 3). Pour $t \leq 3000 \text{ s}$, on prend $R = 0,0035 \text{ W}^{-1}\text{m}^2\text{K}$ et pour $t > 3000 \text{ s}$, $R = 0,0039 \text{ W}^{-1}\text{m}^2\text{K}$.

Pour la condition aux limites 4, on a $h = 5 \text{ W.m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ et $T_{ext} = 100^\circ\text{C}$.

Les données spécifiques aux matériaux de la lingotière (moule en fonte et réfractaire) sont reportées dans le Tableau D-2.

Bien que le matériau isolant soit constitué de poudre exothermique, il n'est pas modélisé comme dans le cas précédent par une enthalpie dégagée au début de la solidification. Ce matériau est ici considéré comme un isolant et ses propriétés sont adaptées en conséquence.

Tableau D-2 Propriétés du moule, du matériau réfractaire et de l'isolant

PROPRIETES DU MOULE (FONTE)			
Propriété	Symbole		
Densité	ρ	7000	$kg.m^{-3}$
Conductivité thermique	λ	28,8 à $T \leq 59^\circ C$	$W.m^{-1}.K^{-1}$
		29,8 à $T = 100^\circ C$	
		31,5 à $T = 200^\circ C$	
		31,9 à $T = 300^\circ C$	
		31,1 à $T = 400^\circ C$	
		30 à $T = 500^\circ C$	
		27,8 à $T = 600^\circ C$	
		25,3 à $T = 700^\circ C$	
		26,6 à $T = 900^\circ C$	
		25,4 à $T \geq 1000^\circ C$	
Chaleur spécifique	c_p	507 à $T \leq 59^\circ C$	$J.kg^{-1}.K^{-1}$
		516 à $T = 100^\circ C$	
		560 à $T = 200^\circ C$	
		604 à $T = 300^\circ C$	
		649 à $T = 400^\circ C$	
		705 à $T = 500^\circ C$	
		794 à $T = 600^\circ C$	
		993 à $T = 700^\circ C$	
		795 à $T = 900^\circ C$	
		793 à $T \geq 1000^\circ C$	
Emissivité	ε	0,9	–
PROPRIETES DU REFRACTAIRE			
Densité	ρ	948	$kg.m^{-3}$
Conductivité thermique	λ	0,22 à $T \leq 200^\circ C$	$W.m^{-1}.K^{-1}$
		0,19 à $T \geq 556^\circ C$	
Chaleur spécifique	c_p	920 à $T \leq 200^\circ C$	$J.kg^{-1}.K^{-1}$
		1140 à $T \geq 1000^\circ C$	
PROPRIETES DE L'ISOLANT			
Densité	ρ	791	$kg.m^{-3}$
Conductivité thermique	λ	0,18	$W.m^{-1}.K^{-1}$
Chaleur spécifique	c_p	1800	$J.kg^{-1}.K^{-1}$
Emissivité	ε	0,5	–

Bibliographie

- Ananth R., Gill W.N. *Journal of Crystal Growth* 108 (1991): 173-189.
- Appolaire B., Combeau H., Lesoult G. *Materials Science & Engineering* 487 (2008): 33-45.
- Arcelor Mittal Industeel. 2014. <http://www.industeel.info/activities/our-products.aspx> (accès le 08 07, 2014).
- Ares A.E, Schvezov C.E. *Metallurgical and Materials Transactions A* 31 (2000): 1611-1625.
- Badillo A., Beckermann C. *Acta Materialia* 54 (2006): 2015-2026.
- Baker J., Kudrolli A. *Physical Review E* 82 (2010): 1-5.
- Banaszek J., McFadden S., Browne D.J, Sturz L., Zimmermann G. *Metallurgical and Materials Transactions A* 38 (2007): 1476-1484.
- Beckermann C. *International Materials Review* 47, n° 5 (2002): 243-261.
- Beckermann C., Diepers H.J, Steinbach I., Karma A., Tong X. *Journal of Computational Physics* 154 (1999): 468-496.
- Beckermann C., Viskanta R. *Applied Mechanics Reviews* 46, n° 1 (January 1993).
- Beckermann C., Wang C.Y. *Metallurgical and Materials Transactions A* 27 (1996): 2784-2795.
- Bedel M. *PhD Thesis*. Université de Lorraine, 2014.
- Bennon W.D, Incropera F.P. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 30, n° 10 (1987): 2161-2170.
- Bhat M.S., Poirier D.R., Heinrich D.C. *Metallurgical and Materials Transactions B* 26 (1995): 1049-1056.
- Biloni H., Chalmers B. *Journal of Materials Science* 3 (1968): 139-149.
- Biscuola V.B, Martorano M.A. *Metallurgical and Materials Transactions A* 39 (2008): 2885-2895.
- Boettinger W.J, Warren J.A, Beckermann C., Karma A. *Annual Review of Materials Research* 32 (2002): 163-194.
- Bousquet-Melou P., Néculea A., Goyeau B., Quintard M. *Metallurgical and Materials Transactions B* 33 (2002): 365-376.
- Brearley A. W, Brearley H. *Ingots and Ingots moulds*. Longmans Green, 1918.
- Browne D.J. *ISIJ International* 45, n° 1 (2005): 37-44.
- Browne D.J, Hunt J.D. *Numerical Heat Transfer, Part B* 45 (2004): 398-419.

- Burden M.H, Hunt J.D. *Journal of Crystal Growth* 22 (1974): 109-116.
- Burden M.H, Hunt J.D. *Metallurgical Transactions A* 6 (1975): 240-241.
- Camel D., Dupouy M.D. *J. Phys. IV France*. 2001. 119-126.
- Canté M.V, Cruz K.S, Spinelli J.E, Cheung N., Garcia A. *Materials Letters* 61 (2007): 2135-2138.
- Cantor B., Vogel A. *Journal of Crystal Growth* 41 (1977): 109-123.
- Carazonni T., Digonnet H., Gandin Ch.A. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 20 (2012).
- Carozzani T., Ch.-A. Gandin, Digonnet H., Bellet M., Zaidat K., Fautrelle Y. *Metallurgical and Materials Transactions A* 44 (2013): 873-887.
- Chalmers B. *Journal of the Australian Institute of Metals* 8 (1963): 255-263.
- Christian J.W. *The Theory of Transformations in Metals and Alloys*. 3rd. Vol. I. Pergamon, 2002.
- Ciobanas A.I, Fautrelle Y. *Journal of Physics D: Applied Physics* 40 (2007): 4310-4336.
- Ciobanas A.I, Fautrelle Y. *Journal of Physics D: Applied Physics* 40 (2007): 3733-3762.
- Cole G. S, Bolling G. F. *Transactions AIME* 263 (1965): 1568-1576.
- Combeau H., Kumar A., Zaloznik M. *Transactions of the Indian Institute of Metals* 62, n° 4-5 (2009): 285-290.
- Combeau H., Kumar A., Zaloznik M., Poitraul I., Lacagne G., Gingell A., Mazet T., Lesoult G. *International Conference on Ingot Casting, Rolling and Forging*. 2012.
- Combeau H., Rabia B., Charmond S., Hans S., Richy P.E. *Matériaux*. Dijon, 2006.
- Combeau H., Zaloznik M., Hans S., Richy P.E. *Metallurgical and Materials Transactions B* 40 (2009): 289-304.
- Cramb A. *Making, Shaping and Treating of Steel*. AISE, 2003.
- Dagner J., Friedrich J., Müller G. *Computational Materials Science* 43 (2008): 872-885.
- Dai H.J, Dong H.B, Atkinson H.V, Lee P.D. *Solid State Phenomena* 139 (2008): 129-134.
- Dantzig J., Rappaz M. *Solidification*. EPFL Press, 2009.
- Doherty R.D, Cooper P.D, Bradbury M.H, Honey F.J. *Metallurgical Transactions A* 8 (1977): 397-402.
- Dong H.B, Lee P.D. *Acta Materialia* 53 (2005): 659-668.
- Dong H.B, Yang X.L, Lee P.D. *Journal of Materials Science* 39 (2004): 7207-7212.
- Dupouy M.D, Camel D., Mazille J.E. *Matériaux 2002*. Tours, 2002.

- Dupouy M.D, Camel D., Mazille J.E, Hugon I. *Materials Science Forums*. Trans Tech Publications, 2000. 25-30.
- Eckert S., Willers B., Nikrityuk P.A, Eckert K., Michel U., Zouhar G. *Materials Science and Engineering* 413-414 (2005): 211-216.
- Erve M., Papouschek F., Fischer K., Maidorn Ch. *Nuclear Engineering and Design* 108 (1988): 487-495.
- Flemings M.C. *Journal of Metals* 31, n° 8 (January 1979).
- Flemings M.C, Nereo G.E. *Trans AIME* 239 (1967): 1449-1461.
- Flemings, M.C. *Metallurgical Transactions A* 22 (1991): 957-981.
- Flood S.C, Hunt J.D. *Journal of Crystal Growth* 82 (1987): 543-551.
- Flood S.C, Hunt J.D. *Journal of Crystal Growth* 82 (1987): 552-560.
- . *ASM Handbook - Casting*. Vol. 15. ASM Edition, 1988.
- Foley J.D. *Computer Graphics : Principles and Practice*. Addison-Wesley Professional, 1996.
- Forestier R., Stoquert A., Merchi A. Rapport interne Ascométal-CREAS, 2008.
- Fredriksson H., Hillert M. *Metallurgical Transactions* 3 (1972): 565-570.
- Fredriksson H., Olsson A. *Materials Science and Technology* 2 (1986): 508-516.
- Gandin Ch.-A. *Acta Materialia* 48 (2000): 2483-2501.
- Gandin Ch.-A. *ISIJ International* 40, n° 10 (2000): 971-979.
- Gandin Ch.-A., Desbiolles J.-L., Rappaz M., Thévoz Ph. *Metallurgical and Materials Transactions A* 30 (1999): 3153-3165.
- Gandin Ch.-A., Guillemot G., Appolaire B., Niane N.T. *Materials Science and Engineering A* 342 (2003): 44-50.
- Gandin Ch.-A., Rappaz M. *Acta Metallurgica et Materialia* 42, n° 7 (1994): 2233-2246.
- Gandin Ch.-A., Rappaz M. *Acta Materialia* 45, n° 5 (1997): 2187-2195.
- Gaümann M., Trivedi R., Kurz W. *Materials Science and Engineering A* 226-228 (1997): 763-769.
- Goyeau B., Bousquet-Melou P., Gobin D., Quintard M., Fichot F. *Computational and Applied Mathematics* 23, n° 2-3 (2004): 381-400.
- Greer A.L. Dans *Solidification and Casting*, de K. O'Reilly B. Cantor, 199-247. IOP Publishing, 2003.
- Greer A.L, Bunn A.M, Tronche A., Evans P.V, Bristow D.J. *Acta Materialia* 48 (2000): 2823-2835.
- Griffiths W.D, McCartney D.G. *Materials Science and Engineering A* 216 (1996): 47-60.

- Gu J.P, Beckermann C. *Metallurgical and Materials Transactions* 30 (1999): 1357-1366.
- Guillemot G., Gandin Ch.A, Bellet M. *Journal of Crystal Growth* 303 (2007): 58-68.
- Guillemot G., Gandin Ch.A, Combeau H. *ISIJ International* 46 (2006): 880-895.
- Guillemot G., Gandin Ch.A, Combeau H., Heringer R. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 12 (2004): 545-556.
- Guo H.M, Yang X.J, Luo X.Q. *Journal of Alloys and Compounds* 482 (2009): 412-415.
- Hansen G., Hellawell A., Lu S.Z, Steube R.S. *Metallurgical and Materials Transactions A* 27 (1996): 569-581.
- Hao J., Grasser M., Wu M., Ludwig A., Riedle J., Eberle R. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. IOP Publishing, 2011.
- Hellawell A., Liu S., Lu S.Z. *Journal of Metals*, Mars 1997: 18-20.
- Hellawell A., Sarazin J.R, Steube B. *Philosophical Transactions: Physical Sciences and Engineering* 345 (1993): 507-544.
- Ho C.J, Viskanta R. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 27 (1984): 705-716.
- Hunt J.D. *Materials Science and Engineering* 65 (1984): 75-83.
- . *Solidification and Casting of Metals*. Metal Society, London, 1979.
- Hunt J.D, Lu S.Z. *Metallurgical and Materials Transactions A* 27 (1996): 611-623.
- Iron and Steel Institute. «1st Report of the Ingots Committee.» 1 (1926).
- Iron and Steel Institute. «2nd Report of the Ingots Committee.» 1 (1928).
- Ishii M., Zuber N. *AIChE Journal* 25, n° 5 (1979): 843-855.
- Ivantsov G.P. *Doklady Akademii Nauk SSSR* 58 (1947): 567-569.
- Jackson K.A, Hunt J.D. *Trans AIME*, 1966: 1126-1142.
- Jackson K.A, Hunt J.D, Uhlmann D.R, Seward T.P III,. *Transactions of the Metallurgical Society of AIME* 236 (1966): 149-158.
- Jacot A., Maijer D., Cockcroft S. *Metallurgical and Materials Transactions A* 31 (2000): 2059-2068.
- Johnston M.H, Griner C.S. *Metallurgical and Materials Transactions A* 8 (1977): 77-82.
- Kerr H.W, Kurz W. *International Materials Review* 41, n° 4 (1996): 129-164.
- Kim S., Grugel R.N. *Metallurgical Transactions A* 23 (1992): 1807-1815.
- Kraft T., Chang Y.A. *Journal of Metals*, Décembre 1997: 20-28.

- Kumar A., Demurger J., Wendenbaum J., Zaloznik M., Combeau H. *International Conference on Ingot Casting, Rolling and Forging*. Aachen, 2012.
- Kumar A., Zaloznik M., Combeau H. *International Journal of Thermal Sciences* 54 (2012): 33-47.
- Kurz W., Fisher D.J. *Fundamentals of Solidification*. 3rd. Trans Tech Publications, 1992.
- Kurz W., Giovanola B., Trivedi R. *Acta Metallurgica* 34, n° 5 (1986): 823-830.
- Lakehal D., Meier M., Fulgosi M. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 23 (2002): 242-257.
- Langer J.S. *Reviews of Modern Physics* 52, n° 1 (1980): 1-30.
- Langer, J.S. *Reviews of Modern Physics* 52, n° 1 (1980): 1-30.
- Laren I., Fredriksson H. *Scandinavian Journal of Metallurgy* 1 (1972): 59-69.
- Lesoult G. *Materials Science and Engineering A* 413-414 (2005): 19-29.
- Lesoult G. *Cristallisation et Microstructures*. Techniques de l'ingénieur, 1986.
- Lesoult G. *Macrostructures et qualité des produits*. Techniques de l'Ingénieur, 1989.
- Li J., Wang J., Yang G. *Journal of Crystal Growth* 309 (2007): 65-69.
- Li J., Wu M., Ludwig A., Kharicha A. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2013.
- . *IOP Conf. Ser. : Mat. Sci. Eng.* 2012. 1-8.
- Li J., Wu M., Ludwig A., Kharicha A. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 72 (2014): 668-679.
- Li J., Wu M., Ludwig A., Kharicha A., Schumacher P. *Materials Science Forum*. Trans Tech Publications, 2014. 121-126.
- Li X., Gagnoud A., Fautrelle Y., Ren Z., Moreau R., Zhang Y., Esling C. *Acta Materialia* 60 (2012): 3321-3332.
- Limmaneevichitr C., Pongananpanya S., Kajornchaiyakul J. *Materials & Design* 30 (2009): 3925-3930.
- Lipton J., Glicksman M.E, Kurz W. *Materials Science and Engineering* 65 (1984): 57-63.
- Lipton J., Kurz W., Heinemann W. *Arch. Eisenhuttenwes.* 55 (1984): 195-200.
- Liu S., Lu S.Z, Hellawell A. *Journal of Crystal Growth* 234 (2002): 740-750.
- Liu Z., Qiu D., Wang F., Taylor J.A., Zhang M. *Acta Materialia* 79 (2014): 315-326.
- Ludwig A., Wu M. *Metallurgical and Materials Transactions* 37 (2006): 1613-1631.
- Ludwig A., Wu M. *Materials Science and Engineering A* 413-414 (2005): 109-114.
- Mahapatra R.B, Weinberg F. *Metallurgical Transactions B* 18 (1987): 425-432.

- Maidorn C., Blind D. *Nuclear Engineering and Design* 84 (1985): 285-296.
- Martorano M.A, Beckermann C., Gandin Ch.A. *Metallurgical and Materials Transactions A* 34 (2003): 1657-1674.
- Martorano M.A, Biscuola V.B. *Acta Materialia* 57 (2009): 607-615.
- Martorano M.A, Biscuola V.B. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 14 (2006): 1225-1243.
- Mathiesen R.H., Arnberg L. *Materials Science and Engineering* 413-414 (2005): 283-287.
- Maxwell I., Hellawell A. *Acta Metallurgica* 23 (1975): 229-237.
- Mazet T. Nancy: INPL (Univeristé de Lorraine), 1995.
- McFadden S., Browne D.J. *Metallurgical and Materials Transactions* 40, n° 3 (2009): 662-672.
- McFadden S., Browne D.J. *Applied Mathematical Modelling* 33 (2009): 1397-1416.
- McFadden S., Browne D.J. *Scripta Materialia* 55 (2006): 847-850.
- M'Hamdi M. *PhD Thesis*. INPL - Université de Lorraine, 1999.
- Mirihanage W.U, Arnberg L., Mathiesen R.H. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. IOP Publishing, 2012.
- Mirihanage W.U, Browne D.J. *Shape Casting: The 4th international Symposium*. 2011. 129-136.
- Mirihanage W.U, Browne D.J. *Computational Materials Science* 50 (2010): 260-267.
- Mirihanage W.U, Dai H., Dong H., Browne D.J. *Advanced Engineering Materials* 15, n° 4 (2013): 216-229.
- Mirihanage W.U, McFadden S., Browne D.J. *Materials Science Forum*. 2010. 355-360.
- Mirihanage W.U., Browne D.J., Zimmermann G., Sturz L. *Acta Materialia* 60 (2012): 6362-6371.
- Morando R., Biloni H., Cole G.S, Bolling G.F. *Metallurgical Transactions* 1 (1970): 1407-1412.
- Mosbah S., Bellet M., Gandin Ch.-A. *Metallurgical and Materials Transactions A* 41 (2010): 651-659.
- Mullins W.W, Sekerka R.F. *Journal of Applied Physics* 34, n° 2 (1963): 323-329.
- Neumann-Heyme H., Beckermann C. *IOP Conference Series: Metallurgical and Materials Transactions A*. 2014. Publication en cours.
- Nguyen-Thi H., Reinhart G., Mangelinck-Noël N., Jung H., Billia B., Schenk T., Gastaldi J., Härtwig J., Baruchel J. *Metallurgical and Materials Transactions A* 38 (2007): 1458-1464.
- Ni J., Beckermann C. *Metallurgical Transactions B* 22 (1991): 349-361.

- Nielsen O, Appolaire B., Combeau H., Mo A. *Metallurgical and Materials Transactions A* 34 (2001): 2049-2060.
- Ohno A., Motegi T., Soda H. *Transactions of The Iron and Steel Institute of Japan* 11 (1971): 18-23.
- Papapetrou A. *Zeitschrift für Kristallographie* 92 (1935): 89-130.
- Papazian J.M, Kattamis T.Z. *Metallurgical and Materials Transactions A* 11 (1980): 483-493.
- Paradies C.J, Smith R.N, Glicksman G.E. *Metallurgical and Materials Transactions A* 28 (1997): 875-883.
- Peres M.D, Siqueira C.A, Garcia A. *Journal of Alloys and Compounds* 381 (2004): 168-181.
- Pickering E.J. *ISIJ International* 53, n° 6 (2013): 935-949.
- Plapp M. *Journal of Crystal Growth*, 2007: 49-57.
- Poirier D.P. *Metallurgical Transactions B* 18 (1987): 245-255.
- Pollock T.M, Murphy W.H. *Metallurgical and Materials Transactions A* 27 (1996): 1081-1094.
- Quested T.E, Greer A.L. *Acta Materialia* 53 (2005): 4643-4653.
- Quillet G. *PhD Thesis*. INPG, 2003.
- Rabia B. *PhD Thesis*. INPL- Université de Lorraine, 2004.
- Ramirez J.C, Beckermann C., Karma A., Diepers H.J. *Physical Review E* 69 (2004).
- Rappaz M. *International Materials review* 34, n° 3 (1989): 93-123.
- Rappaz M., Charbon Ch., Sasikumar R. *Acta Metall. Mater.* 42, n° 7 (1994): 2365-2374.
- Rappaz M., Gandin Ch.A. *Acta Metallurgica and Materialia* 41, n° 2 (1993): 345-360.
- Rappaz M., Thévoz Ph. *Acta Metallurgica* 35, n° 7 (1987): 1487-1497.
- Rebow M., Browne D.J. *Scripta Materialia* 56 (2007): 481-484.
- Reinhart G., Gandin Ch-A., Mangelinck-Noël N., Nguyen-Thi H., Billia B., Baruchel J. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. IOP Publishing, 2012.
- Roux P. *PhD Thesis*. Université Paris 6, 2005.
- Ruvalcaba D., Mathiesen R.H, Eskin D.G, Arnberg L., Katgerman L. *Acta Materialia* 55 (2007): 4287-4292.
- Shevchenko N., Eckert S., Boden S., Gerbeth G. *IOP Conf. Ser. : Mat. Sci. Eng.* 2012. 1-8.
- Shyy W., Thakur S.S, Ouyang H., Jiu L., Blosch E. *Computational Techniques for Complex Transport Phenomena*. Cambridge University Press, 2005.

- Silva J.N, Moutinho D.J, Moreira A.L, Ferreira I.L, Rocha O.L. *Journal of Alloys and Compounds* 478 (2009): 358-366.
- Siqueira C.A, Cheung N., Garcia A. *Metallurgical and Materials Transactions A* 33 (2002): 2107-2118.
- Siqueira C.A, Cheung N., Garcia A. *Journal of Alloys and Compounds* 351 (2003): 126-134.
- «Solidification Course.» Les Diablerets, 2011.
- Spinelli J.E, Ferreira I.L, Garcia A. *Journal of Alloys and Compounds* 384 (2004): 217-226.
- Spittle J.A. *International Materials Review* 51, n° 4 (2006): 247-269.
- Spittle J.A, Sadli S. *Materials Science and Technology* 11 (1995): 533-537.
- Steinbach I. *Modelling and Simulation in Materials Science* 17 (2009).
- Sturz L., Drevermann A., Pickmann C., Zimmermann G. *Materials Science and Engineering A* 413-414 (2005): 379-383.
- Sturz L., Zimmermann G. *Journal of Physics: Conference Series*. 2011.
- Tarshis L.A, Walker J.L, Rutter J.W. *Metallurgical Transactions* 2 (1971): 2589-2597.
- Thévoz Ph., Rappaz M. *Metallurgical Transactions A* 20 (1989): 311-322.
- Tiller W.A, Jackson K.A, Rutter J.W, Chalmers B. *Acta Metallurgica* 1 (1953): 428-437.
- Tryggvason G., Bunner B., Esmaeeli A., Juric D., Al-Rawahi N., Tauber W., Han J., Nas S., Jan Y.-J. *Journal of Computational Physics* 169 (2001): 708-759.
- Tveito K., M'Hamdi M., Combeau H., Zaloznik M. *en cours*, 2014: en cours.
- Vandyoussefi M., Greer A.L. *Acta Materialia* 50 (2002): 1693-1705.
- Vannier I. *PhD Thesis*. INPL, 1995.
- Vannier I., Combeau H., Lesoult G. *Materials Science and Engineering*, 1993: 317-321.
- Viardin A., Sturz L., Zimmermann G., Apel M. *Journal of Physics: Conference Series*. 2011.
- Wang C.Y, Ahuja S., Beckermann C., de Groh III H.C. *Metallurgical and Materials Transactions B* 26 (1995): 111-119.
- Wang C.Y, Beckermann C. *Metallurgical and Materials Transactions A* 27 (1996): 2754-2764.
- Wang C.Y, Beckermann C. *Metallurgical Materials Transactions A* 25 (1994): 1081-1093.
- Wang C.Y, Beckermann C. *Materials Science and Engineering A* 171 (1993): 199-211.
- Wang X.D, Ciobanas A., Baltaretu F., Bianchi A.M, Fautrelle Y. *Materials Science Forum*. 2006. 163-168.

- Willers B., Eckert S., Michel U., Haase I., Zouhar G. *Materials Science and Engineering A* 402 (2005): 55-65.
- Winegard W.C, Chalmers B. *Transactions of the ASM* 46 (1954): 1214-1223.
- Witzke S., Riquet J.-P, Durand F. *Acta Metallurgica* 29 (1981): 365-374.
- Wu M., Ahmadein M., Kharicha A., Ludwig A., Li J.H., Schumacher P. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. IOP Publishing, 2012.
- Wu M., Fjeld A., Ludwig A. *Computational Materials Science* 50 (2010): 32-42.
- Wu M., Li J., Kharicha A., Ludwig A. *International Symposium on Liquid Metal Processing & Casting (LMPC)*. Austin, 2013. 171-180.
- Wu M., Ludwig A. *Acta Materialia* 57 (2009): 5621-5631.
- Wu M., Ludwig A. *Metallurgical and Materials Transactions A* 38 (2007): 1465-1475.
- Wu M., Ludwig A., Fjeld A. *Computational Materials Science* 50 (2010): 43-58.
- Yasuda H., Ohnaka I., Kawasaki K., Sugiyama A., Ohmichi T., Iwane J., Umetani K. *Journal of Crystal Growth* 262 (2004): 645-652.
- Yin H., Koster J.N. *Journal of Crystal Growth* 205 (1999): 590-606.
- Zaloznik M., Combeau H. *Computational Materials Science* 48 (2010): 1-10.
- , Édité par Maijer D.M Cockroft S.L. *MCWASP XII, TMS. The Minerals, Metals and Materials Transactions*, 2009. 165-172.
- Zaloznik M., Kumar A., Combeau H. *Computational Materials Science* 48 (2010): 11-21.
- Ziv I., Weinberg F. *Metallurgical Transactions B* 20 (1989): 731-734.

Étude de la Transition Colonnaire-Equiaxe dans les lingots et en coulée continue d'acier et influence du mouvement des grains.

Résumé

Les coulées industrielles permettent de distinguer deux types de structures : colonnaires et équiaxes. La mise en place de ces structures a des conséquences importantes sur les autres hétérogénéités, particulièrement les macroségrégations chimiques. Le code SOLID, développé à l'Institut Jean Lamour, permet de décrire de manière couplée la convection naturelle du liquide ainsi que la germination, la croissance et le transport des grains équiaxes. Le travail présenté a pour but de proposer une modélisation de l'apparition et de la croissance des structures colonnaires couplées à celles des grains équiaxes, permettant ainsi de prédire la Transition Colonnaire-Equiaxe (TCE) et Equiaxe-Colonnaire (ECT). La particularité du modèle est de considérer la croissance couplée des structures uniquement au niveau des pointes primaires colonnaires car c'est à cet endroit que les gradients de soluté sont les plus importants. Après validation, le modèle est appliqué à des cas de coulées industrielles de lingots d'acier et comparé à des mesures expérimentales. Il en ressort en premier lieu que sans la modélisation du mouvement des grains équiaxes, les morphologies et les ségrégations de carbone prédites ne correspondent pas à l'expérience. Par la suite, on montre que les résultats obtenus dépendent fortement du scénario d'apparition des grains équiaxes. Une germination hétérogène volumique des grains équiaxes ne permet pas de prédire la TCE expérimentale. En revanche, la fragmentation des grains, associée à un critère pour le début de la fragmentation, prédit une TCE et des ségrégations en carbone en accord avec l'expérience. On montre alors que la masselotte des lingots peut ainsi être une source importante de grains.

Mots clés : solidification, modélisation, macroségrégations, Transition Colonnaire-Equiaxe, Transition Equiaxe-Colonnaire, fragmentation.

Study of the Columnar-to-Equiaxed Transition in steel ingots and continuous castings and the influence of the movement of the grains

Abstract

It is possible to distinguish two main types of structures in castings: columnar and equiaxed. The dynamic set up of these structures has a strong impact on other heterogeneities, especially the chemical macrosegregations. Developed at the Institut Jean Lamour, SOLID is a numerical code that accounts for natural convection as well as the germination, growth and transport of equiaxed grains. The purpose of this work is to model the appearance and the growth of the columnar structures coupled with the description of the equiaxed grains. The model can therefore predict the Columnar-to-Equiaxed (CET) and Equiaxed-to Columnar (ECT) Transitions. The main characteristic of the model is to consider the coupled growth of both structures only in the zone near the tips of the primary columnar dendrites. It is indeed there that the strongest solute gradients are located. The model is verified by comparing it to experiments and other models of the literature. The model is then applied to the case of industrial steel ingots and compared to experimental measurements. The first result is that without taking into account the movement of the equiaxed grain the results for equiaxed grain morphology and for macrosegregation do not agree with the measurements. Next, we find that the phenomenon considered for equiaxed grain formation is decisive for the CET prediction. When heterogeneous volumic nucleation is considered, we were not able to predict the CET correctly. However, when fragmentation at the columnar front is considered – along with a criterion for the onset of fragmentation – the results agree quite well with the experiments. It is also shown that the hot-top of ingots is consequently an important source of equiaxed grains.

Keywords: solidification, modelling, macrosegregation, Columnar-to-Equiaxed Transition, Equiaxed-to-Columnar Transition, fragmentation.