

Etude de l'influence du mouvement et de la croissance des grains équiaxes sur la macroségrégation en coulée semi-continue d'aluminium

Najat Houti Houti-Lefay

▶ **To cite this version:**

Najat Houti Houti-Lefay. Etude de l'influence du mouvement et de la croissance des grains équiaxes sur la macroségrégation en coulée semi-continue d'aluminium. Autre. Institut National Polytechnique de Lorraine, 2005. Français. NNT : 2005INPL095N . tel-01748881

HAL Id: tel-01748881

https://hal.univ-lorraine.fr/tel-01748881

Submitted on 29 Mar 2018

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

AVERTISSEMENT

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

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

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

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

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4
Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10
http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php
http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm

INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE LORRAINE

ETUDE DE L'INFLUENCE DU MOUVEMENT ET DE LA CROISSANCE DES GRAINS EQUIAXES SUR LA MACROSEGREGATION EN COULEE SEMI-CONTINUE D'ALUMINIUM

THESE

Présentée devant
L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE LORRAINE
pour obtenir le titre de
Docteur de l'INPL

Spécialité : Mécanique et Energétique
Ecole Doctorale EMMA (Energie, Mécanique, Matériaux)

le 10 novembre 2005
par N. Houti - Lefay

Travail préparé au Laboratoire de Science et Génie des Matériaux et de Métallurgie à l'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Nancy

Jury :

Mme V. FAVIER	Rapporteur
M B. GOYAU	Rapporteur
M P. ARCHAMBAULT	Examinateur
M B. COMMET	Examinateur
Professeur H. COMBEAU	**Directeur de thèse**

Avant-propos

Les travaux de recherche présentés dans ce mémoire ont été réalisés au sein du Laboratoire de Science et Génie des Matériaux et Métallurgie à l'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Nancy, dirigé successivement par Messieurs Jean-Marie DUBOIS et Pierre ARCHAMBAULT, Directeurs de Recherche. Je leur exprime toute ma gratitude pour leur accueil.

Je tiens à remercier Messieurs Pierre ARCHAMBAULT et Benoît COMMET d'avoir accepté de faire partie de mon jury ;
De même je tiens à remercier vivement Madame Véronique FAVIER et Monsieur Benoît GOYEAU d'avoir bien voulu être mes rapporteurs.

La réussite de ce travail tient à la confiance que m'a témoignée durant ces années le professeur Hervé COMBEAU, mon directeur de thèse. Je lui exprime ma profonde reconnaissance pour son soutien et ses précieux conseils.

Merci à toutes les personnes que j'ai côtoyées durant ces années passées au laboratoire et à l'Ecole des Mines.

Toute ma sincère reconnaissance à ma famille qui m'a soutenue jusqu'au bout.

Mille mercis à mes parents qui ont tant attendu ce moment, merci à toi maman et à toi mon papa (j'aurai tant aimé que tu sois là), à ta mémoire qui ne me quitte guère.

Jamais je ne te remercierai assez David (BB) pour ton soutien et surtout pour ta patience sans limite.

Enfin, merci à mes rayons de soleil, mes petits cœurs, toi Heba et toi ma petite puce Shirel.

SYMBOLES ET NOTATIONS 1

CHAPITRE I : INTRODUCTION GENERALE : **5**

I- INTRODUCTION GENERALE : 6
I-1. L'ALUMINIUM : PRODUCTION ET UTILISATION : 6
I-2. L'ALUMINIUM ET SES ALLIAGES : 7
I–3. SOLIDIFICATION DES ALLIAGES D'ALUMINIUM : 8
I–4. LA COULEE SEMI-CONTINUE : 9
I–5. MACRO/MICRO STRUCTURE: 12
I–6. MACROSEGREGATION : 14
I-7. CONCLUSION: 15

CHAPITRE II : REVUES BIBLIOGRAPHIQUES : **17**

II–1. INTRODUCTION : 18
II–2. MORPHOLOGIES ET DIMENSIONS CARACTERISTIQUES D'UN GRAIN EQUIAXE : 18
II–3. DESCRIPTION DES PHENOMENES ELEMENTAIRES LIES A LA GERMINATION ET A LA CROISSANCE D'UN GRAIN EQUIAXE : 19
II–3.1. Germination : *19*
II–3.2. Equilibre thermodynamique à une interface : *23*
II–3.3. Bilan de masse et d'énergie à une interface solide/liquide : *24*
II–3.4. La croissance d'une pointe de dendrite : *26*
II– 3.5. Croissance des branches secondaires : *29*
II–3.6. La maturation : *30*
II–4. LE PRINCIPE D'UN MODELE PRENANT EN COMPTE LA GERMINATION ET LA CROISSANCE DE GRAINS EQUIAXES : 31
II–4.1. Modèle de croissance : *31*
II–4.2. Modèle germination / croissance d'une population de grains équiaxes : *35*
II–5. LES MODELES MICRO/ MACRO : 37
II–6. LES OBSERVATIONS EN COULEE SEMI-CONTINUE 41
II–7. APPLICATION DES MODELES MICRO – MACRO A LA COULEE SEMI-CONTINUE : 45
II–8. RELATION ENTRE LES MICROSTRUCTURES ET LA MACROSEGREGATION EN COULEE SEMI-CONTINUE : 53
II–8.1. La microségrégation (Scheil, bras de levier) : *53*
II-8.2. Observation en coulée semi-continue : *56*
II–9. CONCLUSION ET OBJECTIFS DE THESE : 62

CHAPITRE III : MODELE DE GERMINATION/CROISSANCE DE GROUPE DE GRAINS EQUIAXES : **65**

III.1. INTRODUCTION : 66
III.2. DESCRIPTION DU MODELE DE CROISSANCE D'UN GRAIN DEVELOPPE PAR B.APPOLAIRE [APP, 00] : 67
III.3. MODELE D'ENVELOPPE ET DE STRUCTURE : 68
III.4. LA SOLIDIFICATION DES PHASES SOLIDE ET LIQUIDE PRESENTES DANS L'ENVELOPPE : 71
III.5. PRINCIPE DU MODELE DE GERMINATION/CROISSANCE : 75

III.5.1. Description : ... *76*
III.5.2. Notion de groupes de grains : ... *76*
III.5.3. Modèle de croissance de l'enveloppe : ... *77*
III.5.4. Les principales équations résolues dans le modèle : ... *79*
III.5.5. Calcul du Das : ... *80*
III.5.6. Lois d'injection de grains : ... *80*
III.6. APPLICATION DU MODELE DE CROISSANCE : ... 91
III.6.1. Définition du système étudié : ... *91*
III.6.2. Influence de la loi de germination : ... *93*
III.6.3. L'influence de la vitesse de refroidissement : ... *129*
III.7. CONCLUSION : ... 134

CHAPITRE IV : MISE EN PLACE DE CRITERE SIMPLE A PARTIR DE L'ANALYSE DE L'HYDRODYNAMIQUE ET DE LA THERMIQUE DE LA COULEE SEMI-CONTINUE POUR PREVOIR LES ZONES DE LA MACROSEGREGATION : ... 135

IV–1. INTRODUCTION : ... 136
IV-2. PRINCIPE DE L'ANALYSE DE L'HYDRODYNAMIQUE : ... 137
IV–2.1. Système d'injection : ... *139*
IV–2.2. Calcul du mouvement : ... *144*
IV–2.3. Prise de moyenne : ... *148*
IV–2.4. Etude de sensibilité : ... *149*
IV–2.5. Conclusion : ... *160*
IV-3. PRINCIPE DE L'ANALYSE THERMIQUE : ... 162
IV-3.1. Introduction : ... *162*
IV-3.2. Définition des critères basés sur l'analyse thermique : ... *163*
IV-3.3. Conclusion : ... *177*
IV-4. CONCLUSION : ... 178

CHAPITRE V : COUPLAGE MICRO/MACRO : ... 179

V-1. INTRODUCTION : ... 180
V-2. PRINCIPE : ... 180
V-3. CALCUL DE LA CROISSANCE ET DU MOUVEMENT : ... 184
V-3.1. Forces appliquées sur les grains : ... *184*
V-3.2. Intégration du mouvement des grains : ... *187*
V-3.3. Conclusion : ... *187*
V-4. APPLICATION A DES CAS DE COULEE SEMI-CONTINUE : ... 188
V-4.1. Introduction : ... *188*
V-4.2. Conditions de calcul : ... *188*
V-4.3. Résultats et discussions : ... *191*
V-4.4. Comparaison avec les résultats expérimentaux : ... *199*
V-5. CONCLUSION : ... 203

CHAPITRE VI : CONCLUSION GENERALE : ... 205

VI- CONCLUSION GENERALE : 206
BIBLIOGRAPHIE 209

ANNEXES I : **213**

ANNEXES II : **215**

ANNEXES III : **223**

ANNEXES IV : **231**

SYMBOLES ET NOTATIONS

Ans	surface de la sphère équivalente	m²
As	surface de la sphère équivalente	m²
Cd	coefficient de traînée d'une particule	
c_p^l	capacité thermique du liquide	J/kg/K
D^l	coefficient d'autodiffusion dans le liquide	m²/s
D_i^ϕ	diffusivité chimique de l'élément de l'alliage i dans la phase ϕ	m²/s
D_{th}^l	diffusivité thermique du liquide	m²/s
d	épaisseur des branches secondaires	m
deq	diamètre de la sphère équivalente dit diamètre équivalent	m
$\overrightarrow{F_a}$	force d'Archimède	N
$\overrightarrow{F_P}$	poids d'une particule	N
$\overrightarrow{F_T}$	force de traînée	N
f^s	fraction massique de solide	
g_i	fraction volumique de solide interne	
g_{lenv}	fraction de liquide extradendritique	
$\overline{h}$	enthalpie massique moyenne	J/kg
$\overline{h}^\phi$	enthalpie massique moyenne de la phase ϕ	J/kg
Idivis	paramètre de régularisation du pas de temps	
$\overline{J}_{th}^{l^{env}}$	densité de flux moyen de chaleur sur l'enveloppe dans le liquide extérieur	J m/s
$\overline{J}_i^{\phi^*}$	densité de flux moyen de l'élément d'alliage i par diffusion dans la phase ϕ à l'interface s/d	% mass./m²/s
K_{mat}	constante de maturation	m^3/s
K_p	perméabilité isotrope d'un milieu poreux	m-²
Kse	rapport de la vitesse limite de stokes réelle d'une particule de forme quelconque à la vitesse limite de stokes de la sphère équivalente	

k_i	coefficient de partage de l'élément d'alliage i	
k^{ϕ}	conductivité thermique de la phase ϕ	W/m/K
L	chaleur latente de fusion	J/kg
l_1	longueur des troncs dendritiques primaires	m
m	exposant intervenant dans l'expression de la surface du solide en fonction de la fraction volumique de solide interne	
npar	nombre totale de particules injectées	
m_i	pente de liquidus linéarisé en fonction de la composition en élément d'alliage i	K/%mass.
R	rayon d'une particule	m
Re	nombre de Reynolds	
r_p	rayon de courbure des pointes de dendrite primaire	m
Ss	surface de solide	m²
Sv	surface spécifique du solide	m²
T	température moyenne	K
T^*	température de l'interface solide/liquide	K
T^{∞}	température du liquide infini d'une particule	K
Tc	température de cohérence	K
Teq	température d'une interface solide/liquide à l'équilibre thermodynamique	K
T_f	température de fusion d'un corps pur	K
t	temps	s
tsl	temps de séjour de particules dans le puits liquide	s
tsc	temps de séjour de particules entre la température de liquidus et la température de cohérence	s
tss	temps de séjour de particules entre la température de cohérence et la température de solidus	s
U_p	Vitesse de la particule m/s	
U	vitesse limite de stokes d'un cristal dendritique	m/s
Ueq	vitesse limite de stokes d'une sphère de même volume et de même masse qu'un cristal	m/s
Uns	vitesse limite de stokes réelle d'une particule de forme quelconque	m/s
Uperm	vitesse limite de stokes d'une sphère poreuse	m/s
Us	vitesse limite de stokes de la sphère équivalente	m/s

V_{env}	volume de l'enveloppe	m^3
Volp	volume de la particule	m^3
V_s	volume de solide contenu dans l'enveloppe du cristal	m^3
$w_i^{\phi^*}$	titre massique en élément d'alliage i de la phase ϕ à l'interface s/d	%mass
$\overline{w}_i^{l}$	titre massique en élément d'alliage i du liquide extragranulaire	%mass
$\overline{w}_i^{\phi^*}$	titre massique moyen en élément d'alliage i de la phase ϕ à l'interface s/d	%mass
β	rapport du diamètre de la sphère poreuse à la racine carré de sa perméabilité	
ΔH_f	chaleur latente de fusion	J/kg
ΔT	surfusion du liquide extragranulaire	K
ΔT_c	surfusion chimique	K
ΔT_{th}	surfusion thermique	K
ΔT_Γ	surfusion de courbure	K
Δt	pas de temps	s
δ	longueur caractéristique de transport	m
δ_d	longueur de transport de liquide intragranulaire	m
δ_{lth}	longueur de transport de chaleur dans le liquide extragranulaire	m
δ_l	longueur de transport de soluté dans le liquide extragranulaire	m
φ	paramètre de forme de l'enveloppe	
Γ	coefficient de Gibbs-Thompson	m.K
λ_2	espacement moyen des branches dendritiques secondaires	m
μ^l	viscosité dynamique réelle du liquide	Pa.s
ν^l	viscosité cinématique du liquide	m^2/s
ρ_p	la masse volumique de la particule	kg/m^3
ρ_ϕ	la masse volumique de la phase ϕ	kg/m^3
σ^*	constante de stabilité	
Ω_β	facteur correctif du coefficient de traînée d'une particule tenant compte de sa perméabilité	
Ψ	facteur de sphéricité d'une particule	

Chapitre I : INTRODUCTION GENERALE :

I- Introduction générale :

I-1. L'aluminium : production et utilisation :

Ce n'est que depuis 160 ans que l'aluminium a été découvert et seulement depuis 100 ans qu'une véritable production existe. A ce titre, l'aluminium constitue le plus jeune de tous les métaux courants. Mais la jeunesse de ce matériau, le manque de connaissance initial de ses propriétés ont longtemps entretenu un climat de défiance et ont donné à l'aluminium une image qui n'est pas le reflet exact de la réalité. L'image d'hier, il y a de cela seulement quelques dizaines d'années, était celle d'un matériau, certes léger, mais assez mou et peu résistant. Nous avons tous en mémoire les casseroles cabossées de nos grandes mères, les gardes bous de vélo tordus, …aujourd'hui, cette image a certes évolué, mais pour beaucoup, l'aluminium représente encore un métal malléable, pratique pour l'emballage, mais aussi utilisé pour son aspect décoratif. Certes nous connaissons tous l'usage important de l'aluminium dans des applications telles que l'aéronautique, mais l'image « grand public » de l'aluminium n'est pas aussi noble et freine encore son utilisation dans certains secteurs.

Pendant les cinquante dernières années. Le taux de croissance du marché de l'aluminium a été le plus fort de tous les métaux usuels. Il a été notamment deux fois supérieur à celui de l'acier. Trois facteurs contribuent à ce succès :

1. Quelques caractéristiques physiques qui démarquent nettement l'aluminium de tous les autres métaux :
    - Sa légèreté : sa faible densité qui est seulement le tiers de celle de l'acier, le rend le plus léger de tous les métaux après le magnésium ;
    - Sa conductivité électrique : en raison de sa densité très faible, la conductivité électrique massique de l'aluminium est pratiquement deux fois supérieure à celle du cuivre et bien supérieure à celle de tous les autres métaux ;
    - Sa conductivité thermique relativement élevée.
2. Une grande variété d'alliages, dont les propriétés s'adaptent aux applications les plus diverses ;
3. Une grande facilité de mise en œuvre, tant pour les demi-produits que pour les produits finis.

L'aluminium pur est extrait à partir d'un minerai appelé bauxite qui contient de 35% à 55% d'aluminium. La technologie de production de l'aluminium est principalement basée sur

le procédé de Bayer Hall (Evans 1991) qui consiste en des opérations successives brièvement décrites ci-dessous :

i. Lessive sélective du contenu de l'aluminium dans le minerai (présent sous forme d'oxydes/hydroxydes d'aluminium) dans une solution concentrée à chaud pour former de l'aluminate de sodium en solution.
ii. Purification de la solution et précipitation d'un hydroxyde d'aluminium très pur à partir de la solution diluée.
iii. Séparation du liquide et du solide de l'aluminate, qui est ensuite séché et calciné.
iv. Dissolution de l'aluminate en un sel fondu suivi d'une réduction électrolytique dans les cellules de Hall-Héroult ce qui permet de former un liquide d'aluminium pur.

I-2. L'aluminium et ses alliages :

Dès 1906, un métallurgiste allemand découvrit les effets bénéfiques d'un ajout de cuivre dans l'aluminium. Les tests montrèrent que les caractéristiques du matériau ont été largement améliorées et il donna le nom de « Duralumin » à cet alliage. Cette découverte fut capitale, car elle offrait de multiples perspectives à l'aluminium.

Depuis, les nombreuses et importantes recherches dans le domaine ont mis en évidence que des éléments tels que le cuivre, le magnésium, le manganèse, le silicium et le zinc peuvent être alliés à l'aluminium et conduire à l'élaboration d'alliages.

Il faut toutefois distinguer deux types d'alliages de compositions chimiques très différentes :

- Les alliages de corroyage, utilisés pour la fabrication de barres, profilés, tôles, fils, … et qui vont subir des déformations plastiques pour leur mise en œuvre.
- Les alliages de moulage, utilisés pour la fabrication de pièces complexes directement par solidification de l'aluminium.

Les alliages de corroyage peuvent eux aussi être séparés en deux catégories qui sont les alliages à durcissement structural et les autres alliages sans durcissement. Le tableau I.1 donne une classification des différents alliages. Cette classification est établie en fonction de l'élément principal ajouté.

Symbole	*Elements principaux d'ajout*	*Durcissement structural*	*Remarques*
1XXX	Al	Non	Aluminium pur.
2XXX	Al-Cu	Oui	Bonne résistance à chaud.
3XXX	Al-Mn	Non	
4XXX	Al-Si	Oui	Alliage de fonderie.
5XXX	Al-Mg	Non	Bonne résistance à la corrosion.
6XXX	Al-Mg-Si	Oui	Filage à chaud jusqu'à plusieurs dizaines de mètres par seconde.
7XXX	Al-Zn-Mg	Oui	Augmente sensiblement sa résistance mécanique lors d'ajout du cuivre.

Tableau I-1 : classification des alliages pour l'aluminium. [Jal, 00]

I–3. Solidification des alliages d'aluminium :

L'aluminium pur possède deux principales propriétés qui facilitent sa solidification:

- Sa basse température de fusion (660°C) qui le rend facile à fondre et à couler.
- Sa couche d'oxyde protectrice qui est formée automatiquement à la surface du métal fondu et qui prévient l'oxydation excessive.

Donc, la fusion et la coulée peuvent être faites dans l'air sans couverture avec un flux protecteur ou une atmosphère de gaz inerte.

La solidification de l'aluminium se fait principalement par trois procédés qui sont :

- ***Coulée en moule :*** l'alliage est coulé dans un moule. Une fois solidifié, il aura alors une forme proche du produit final.
- ***Coulée semi-continue :*** l'alliage est coulé sous la forme de plaques de section rectangulaire de l'ordre de quelques mètres ou de billettes circulaires pouvant atteindre une dizaine de mètres de longueur pour une section de plusieurs centimètres de diamètre. Ces produits seront alors utilisés dans des procédés d'extrusion ou de laminage.

- ***Coulée continue :*** l'alliage est coulé de manière continue sous la forme de feuilles dont l'épaisseur est proche de celle du produit final, le but étant d'éviter l'étape de laminage à chaud subie lors de la coulée semi-continue.

Nous nous sommes principalement intéressés à la coulée semi-continue que nous allons maintenant décrire plus en détail.

I–4. La coulée semi-continue :

Deux techniques de coulée semi-continue sont mises en oeuvre pour la production des lingots et des billettes : La coulée avec lingotière et la coulée électromagnétique (en anglais on les appelle respectivement : Direct Chill casting et electromagnetic casting).

1. Direct Chill (DC) casting :

Le processus du DC casting est représenté schématiquement sur la figure I-1 a) le métal liquide est coulé dans un moule sans fond dont les parois sont refroidies par un circuit d'eau. En début de coulée, le fond du moule est fermé par un faux-fond fixé à un vérin lui permettant de se déplacer verticalement. Lorsque le niveau de métal dans la lingotière a atteint une certaine hauteur, le faux-fond est déplacé vers le bas à vitesse constante de l'ordre de un millimètre par seconde, le métal solidifié formant le nouveau fond du moule. Le métal liquide est versé dans le moule par une buse, au travers d'un sac de distribution dont le rôle est de répartir le liquide horizontalement de manière à ce qu'il n'aille pas frapper le front de solidification, ce qui aurait tendance à creuser le puits liquide, et de filtrer les peaux d'oxydes. La chaleur est extraite dans un premier temps par contact direct entre le moule et le métal liquide (il s'agit du refroidissement primaire), puis par aspersion de l'eau de refroidissement de la lingotière qui est éjectée de celle-ci par un système de buses dans sa partie inférieure (il s'agit du refroidissement secondaire). Entre ces deux zones de refroidissement, le métal se détache du moule, laissant place à une lame d'air. Cette contraction est principalement due à l'apparition de contraintes dans le métal solidifié [Drezet, 96]. Le détachement du métal du moule provoque un réchauffement local à la surface du lingot. La température locale peut être telle que les joints de grains, dont la composition en éléments d'alliages est importante, redeviennent liquides. Ce liquide fortement enrichi trouve alors un chemin entre les grains jusqu'à la surface du lingot, créant à la surface de celui-ci une couche de métal fortement enrichie en éléments d'alliage [Alu, 64], [Jalanti, 00]. Ce phénomène porte le nom

d'exudation [Mo, 97]. L'alimentation en métal est arrêtée, une fois la taille de lingot désirée atteinte, le sac de distribution est retirée après. L'étape finale est de laisser le lingot finir sa solidification dans le puit de coulée, ensuite on le retire de ce dernier et on le laisse se refroidir à l'air libre.

2. Electromagnetic casting (EMC) :

Une représentation schématique de la technique du EMC est représentée à la figure I-1 b). Un écran électromagnétique est inséré entre le lingot et un inducteur avec une haute intensité de courant (~6000A) afin de confiner le métal liquide. L'écran assure la formation d'un film régulier et linéaire de l'eau de refroidissement autour du lingot. Cette méthode permet d'éviter un contact direct entre le moule et le métal liquide. Par conséquent, on évite ainsi la diminution du transfert de chaleur entre le métal et l'extérieur résultant de la lame d'air qui se forme lors de la contraction à la solidification. Cette technique aide de fait à éliminer le phénomène d'exudation.

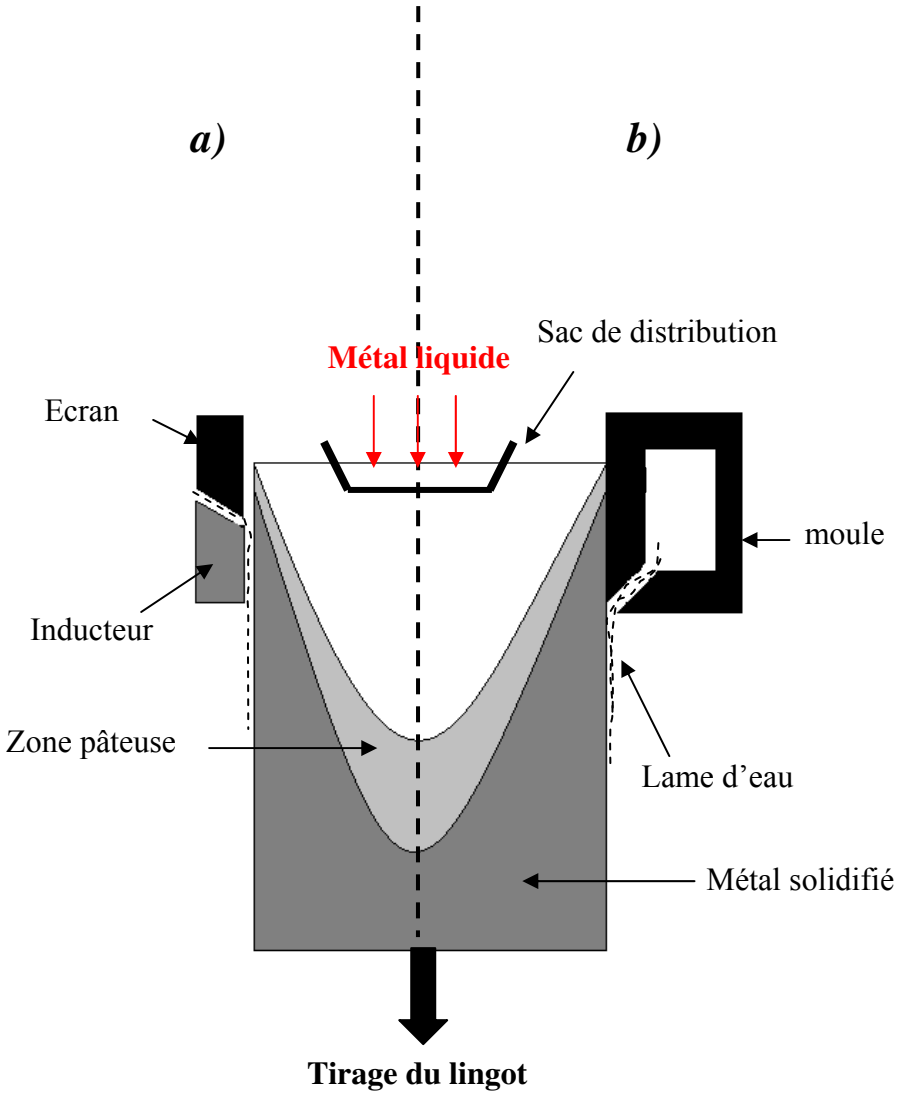


Figure I.1 : représentation schématique de la coulée semi-continue :
a) Coulée électromagnétique (EMC);
b) Coulée Semi-Continue (DC).

I–5. Macro/Micro structure:

Lorsqu'un métal se solidifie, on discerne trois zones (figure I-2) :

- Une première zone constituée de cristaux équiaxes sans orientation particulière, de petites tailles, s'étendant sur toute la périphérie du lingot. Cette zone est appelée la zone de peau.
- Une seconde zone qualifiée de colonnaire où les cristaux sont orientés parallèlement les uns aux autres vers l'axe central du lingot, perpendiculairement à sa surface. Ces cristaux ont une structure ramifiée dite dendritique, et cette zone est appelée la zone colonnaire.
- Une troisième zone, au centre du lingot, formée à nouveau de cristaux équiaxes, mais de tailles bien plus conséquentes que celles des cristaux de la zone de peau. Dans cette région centrale dite équiaxe, il est possible d'observer des cristaux présentant des morphologies différentes. Ils peuvent être dendritiques, ou compacts avec une allure sphéroïdale, on les qualifie alors de globulaires.

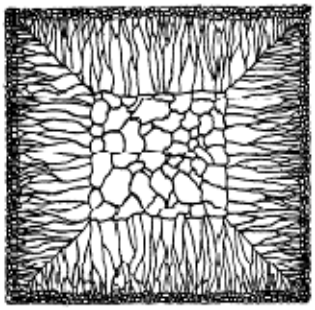


Figure I-2 : représentation schématique des structures rencontrées dans un lingot.

1) L'origine des cristaux équiaxes :

L'origine de cristaux équiaxes a été attribuée dans un premier temps, au phénomène de germination uniquement. Dans le cas d'un alliage fortement inoculé, cette approche devient

très proche de la réalité. Cependant, il s'avère qu'une importante source de cristaux dans les lingots ou pièces de fonderie, est le détachement de dendrites le long du front colonnaire par une interaction des mouvements de convection du liquide.

Dans une zone liquide légèrement en surfusion, lorsqu'un bras dendritique se détache des structures dendritiques par surfusion, il se retrouve transporté, et il pourra ensuite croître en formant un nouveau cristal sans pour autant qu'il y ait eu germination. Flood et al [Flo,89] ont proposé trois mécanismes pour la formation des germes :

1. La croissance de grain à partir de germes présents dans une zone en surfusion devant un front colonnaire ;
2. Le mécanisme du big bang qui consiste en la création de germes pendant la période de remplissage du moule. Ce mécanisme permet de donner une explication sur l'influence de la surchauffe et l'effet de la convection sur la zone équiaxe :
    a. <u>La surchauffe :</u>

       La surchauffe est la différence entre la température de coulée et la température de liquidus. D'après des études expérimentales, plus la surchauffe est grande et plus l'étendue de la zone équiaxe est petite. Dans certains cas, la zone équiaxe peut complètement disparaître, à cause d'une surchauffe très importante. On conclut que la surchauffe influence négativement la formation et l'extension de la zone équiaxe.
    b. <u>La convection :</u>

       La convection naturelle ou forcée permet l'abaissement de la température dans le liquide et la création de zones en surfusion devant le front où les cristallites peuvent survivre et croître.
3. Le mécanisme de détachement de dendrites :

   La morphologie des branches secondaires aux troncs épais et aux racines étroites favorise leur détachement lorsque survient un changement des conditions de croissance ou une perturbation du champ thermique. Ce détachement des bras de dendrites peut aussi être dû à la décélération du front colonnaire. Elle conduit à une élévation instantanée de la température des pointes dendritiques et leur détachement du tronc primaire. La convection joue aussi un rôle très important dans le détachement de dendrite. Lorsque cette dernière diminue, ceci entraîne un nombre plus faible de germes formés par détachement de dendrites.

2) La croissance :

La croissance des cristaux peut se produire de manière contrainte ou non contrainte :

a) Croissance contrainte :

Dans ce cas, la croissance des cristaux a lieu généralement des parois du moule vers l'intérieur et les cristaux s'orientent suivant le gradient de température local. Ce mode de croissance peut conduire à des structures cellulaire ou dendritique. La chaleur latente du changement de phase liquide/solide est évacuée à travers la phase solide.

b) Croissance non contrainte :

Dans ce cas, la chaleur latente du changement de phase liquide/solide est évacuée à travers la phase liquide. L'orientation des grains n'est plus alors contrainte par le gradient de température local.

Ainsi, la différence principale entre les deux modes de croissance, est la direction du transfert thermique. Dans le cas du premier mode, le transfert de chaleur se produit dans la direction opposée à la direction de la croissance. Dans le cas du deuxième mode, il se produit dans la même direction que la croissance. Les deux modes de croissance se développent généralement dans la plupart des coulées.

I–6. Macroségrégation :

La macroségrégation se rapporte aux variations de composition qui se produisent à l'échelle du produit. Elle peut varier sur une échelle de quelques millimètres à quelques centimètres, voire des mètres. Ces variations de composition affectent d'une manière négative le comportement d'une pièce lors de son traitement postérieur et les propriétés des matériaux moulés. Elles peuvent ainsi conduire aux rebus des composants moulés ou des produits traités. Elles sont présentes quasiment dans tous les procédés de moulage. A cause d'une faible diffusivité des solutés dans la phase solide et les grandes distances impliquées, la macroségrégation ne peut pas être atténuée durant le processus de coulée ou après que la solidification soit finie.

L'origine de la macroségrégation est due au mouvement relatif du liquide ségrégé par rapport au solide durant la solidification. La plupart des éléments d'alliage ont une plus faible solubilité dans la phase solide que dans la phase liquide. Au cours du refroidissement les solutés sont ainsi rejetés dans la phase liquide, conduisant à un enrichissement continuel du

liquide et à des concentrations en solutés plus faibles dans la phase solide primaire. Cette ségrégation se produit à l'échelle de la microstructure qui est en cours de formation. C'est ce qu'on désigne par la microségrégation, elle conduit à une distribution de soluté hétérogène dans les branches dendritiques. Si on considère maintenant un petit volume élémentaire qui contient plusieurs branches dendritiques et le liquide entre elles, cela équivaut à la présence d'un élément à l'intérieur de la zone pâteuse (liquide-solide). Le flux de liquide riche en soluté ou le mouvement du solide pauvre en soluté, à l'intérieur ou l'extérieur du volume élémentaire va changer la composition moyenne de ce dernier. Une ségrégation positive (négative) se réfère à des compositions au dessus (en dessous) de la composition nominale de l'alliage.

La figure I-3 présente un profil type de composition obtenu lors de la coulée semi-continue d'une billette d'aluminium cuivre [Fle, 74]. Ce profil nous donne une idée sur la forme des macroségrégations rencontrées en coulée semi-continue. D'après la figure I-3, on observe :

- Une ségrégation positive à la surface du lingot et dans la région environnant la zone centrale. Elle est souvent associée au phénomène d'exudation.
- Une ségrégation négative au centre qui est souvent associée au mouvement équiaxes.

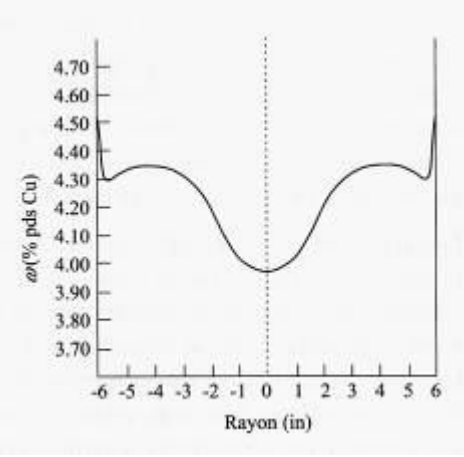


Figure I-3 : profil de ségrégation au travers d'une billette cylindrique obtenue par la coulée semi-continue.

I-7. Conclusion:

Lors de l'examen des différents événements et mécanismes responsables de l'existence de la zone équiaxe en coulée semi-continue d'aluminium, il apparaît que la convection et la germination jouent un rôle important. Le but de cette étude est d'étudier, dans

le cadre du projet européen de recherche Vir[cast](*), le comportement des cristaux équiaxes évoluant dans un liquide en mouvement dans le but de prédire la distribution de taille de grains en sortie du procédé. Pour cela notre étude est basée sur trois étapes essentielles :

- La réalisation d'un modèle de mouvement : il consiste à suivre le mouvement des grains à partir de leur injection jusqu'à leur arriver au plan de sortie ;
- Introduire la germination dans le modèle de croissance de grains de B.Appolaire [App,00] ;
- Le couplage entre les deux modèles afin d'obtenir les caractéristiques de l'évolution des particules équiaxes.

Ce modèle a été introduit dans le logiciel de solidification Vircast développé par le groupe Calcom ESI (Virsoft(**)).

Avant de présenter cette étude, nous proposons de présenter une étude bibliographique, tant du point de vue expérimental que modélisation. Elle contient plusieurs parties traitant les différents paramètres influant sur la structure des grains et la relation de cette dernière avec la macroségrégation.

(*)Vircast est un projet européen qui signifie « Virtual casthouse », dans le cadre duquel on cherche à développer des modèles de solidification d'Aluminium en DC casting avec la collaboration des interfaces.

(**)Virsoft est une interface du projet Vircast. Les interfaces du projet sont des industriels et des laboratoires de recherches qui établissent ou développent des codes de calcul macroscopique de vitesse, de température et de fraction solide. Pour notre cas il s'agit de Calcom.

Chapitre II : REVUES BIBLIOGRAPHIQUES :

II–1. Introduction :

Pendant la solidification d'un alliage métallique, du fait de la différence de solubilité entre les phases solide et liquide, des hétérogénéités de structure et de composition se développent à plusieurs échelles. L'utilisation d'une pièce métallique pour une application précise est liée à ses caractéristiques mécanique et chimique. Ces dernières sont elles mêmes liées aux hétérogénéités structurales et de composition. Ces hétérogénéités présentent des allures très différentes suivant l'alliage et le procédé mis en œuvre, révélant la variété des phénomènes élémentaires intervenant, ainsi que la complexité de leurs interactions.

Pour un procédé donné, il est donc nécessaire de caractériser et de connaître les phénomènes prépondérants. Pour cette raison, nous allons présenter plusieurs travaux de recherche tant expérimentaux que de modélisation. De la littérature afin de mieux comprendre l'influence de certains phénomènes sur les micro/macro structures et les micro/macro ségrégations.

II–2. Morphologies et dimensions caractéristiques d'un grain équiaxe :

Pour notre étude, nous nous sommes concentrés sur l'étude des grains équiaxes qui sont les grains les plus rencontrés en coulée semi-continue d'aluminium. Deux morphologies différentes de cristaux peuvent être observées dans la zone équiaxe des produits coulés :

- Une morphologie globulaire pour laquelle les grains sont plus au moins compacts (figureII-1) ;
- Une morphologie dendritique pour laquelle les grains sont ramifiés (figure II-2). Dans ce cas, deux paramètres sont utilisés afin de caractériser le grain dendritique. Ces paramètres sont sa taille, et le DAS (dendrite arm spacing) qui est la distance entre les bras de dendrites secondaires.

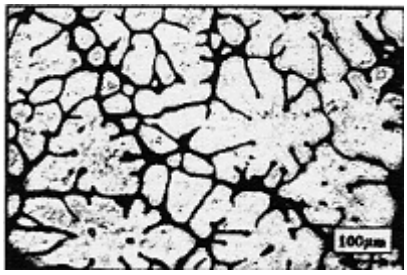


Figure II-1 : exemple de morphologie globulaire

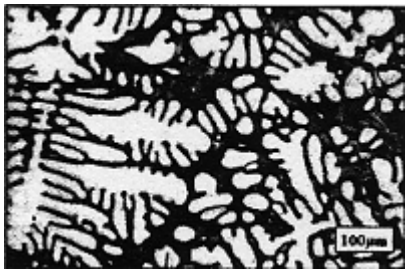


Figure II-2 : exemple de morphologies dendritiques.

Les deux morphologies peuvent exister individuellement ou mélangées. Les différents mécanismes permettant de décrire l'évolution d'un grain équiaxe sont bien répertoriés. Ces mécanismes se produisent à des échelles différentes : la pointe de dendrite, le DAS, et le grain. Dans la partie suivante nous présentons la description des phénomènes élémentaires liés à ces différentes échelles afin d'étudier leur influence sur la croissance d'un grain équiaxe.

II–3. Description des phénomènes élémentaires liés à la germination et à la croissance d'un grain équiaxe :

Les phénomènes élémentaires : équilibre thermodynamique aux interfaces solide/liquide, et diffusion de matière et de chaleur à une interface sont essentiels pour l'étude de ces mécanismes. Pour cela nous allons rappeler les principaux résultats relatifs à ces phénomènes, ainsi que les différents mécanismes associés à la germination puis à la croissance des cristaux dans la zone équiaxe.

II–3.1. Germination :

La germination peut être définie comme la formation d'une nouvelle phase, séparée de ce qui l'entoure par une limite bien définie. Dans le cas de la solidification, la germination implique la formation de petites particules (de germe) de solide entourées de liquide. Il existe deux types de germination :

- La germination homogène : elle se produit lorsque le solide est formé uniquement à partir des atomes présents dans le liquide, fonte sans ajout d'inoculant. Cette cristallisation demande une énergie élevée, pour cette raison elle présente peu d'intérêt pour les processus de coulée.

- La germination hétérogène : cette germination signifie que le développement d'un nouveau cristal se fait sur la surface d'une autre particule qui existe tel qu'un inoculant ajouté, ou sur les parois du moule. Cette cristallisation ne demande pas une grande énergie. C'est elle que l'on rencontre habituellement dans les procédés industriels.

Un métal devrait commencer à se solidifier lorsqu'il se trouve à une température inférieure à la température de liquidus. Ceci est dû à une diminution de l'énergie libre associée à la transformation liquide/solide. Quand un groupe d'atomes se rassemblent pour donner naissance à un germe, ou noyau potentiel, une surface les sépare de la matière environnante. Cette surface conduit à une augmentation de l'énergie libre associée à ce germe. Ce dernier ne peut survivre que si l'énergie libre totale diminue, c'est-à-dire :

- Lorsqu'un germe solide se forme, son énergie libre volumique (ΔG_v) diminue, cette dernière est représentée par la relation (II-1), pour le cas d'une sphère de rayon r :

$$\Delta G_V = -\frac{\rho L}{T_f}\Delta T\frac{4}{3}\pi r^3 \qquad \textbf{(II-1)}$$

Avec :

- ρ : est la densité de la phase solide [$kg.m^{-3}$] ;
- T_f : est la température de fusion [K] ;
- ΔT : est la surfusion [K] ;
- L : est la chaleur latente [J/kg].

Entre un germe de solide et son liquide environnant, existe une interface solide/liquide possédant une énergie. La variation de cette énergie que l'on note (ΔG_s) est égale à $4\pi r^2\gamma$ pour une sphère de rayon r, avec γ l'énergie libre interfaciale spécifique par unité de surface. La variation totale d'énergie libre due à la formation d'une particule solide de rayon r est égale à la somme de ΔG_s et ΔG_V. La variation totale de l'énergie libre en fonction du rayon r montre que pour un certain rayon critique r^*, ΔG passe par un maximum. Ce rayon s'exprime selon la relation suivante :

$$r^* = \frac{2\gamma T_f}{L\,\Delta T} \qquad \textbf{(II-2)}$$

Soit encore :

$$r^* = \frac{2\Gamma}{\Delta T} \qquad \textbf{(II-3)}$$

Où $\Gamma = \frac{\gamma T_f}{L}$ est le coefficient de Gibbs-thomson [m K].

Lorsque le rayon de la particule, qui se forme, est plus grand que le rayon critique, cette particule va croître de façon à diminuer l'énergie libre du système. Tandis que la particule disparaitra pour la même raison si son rayon est inférieur au rayon critique.

L'addition d'inoculant aide à affiner les grains. Les particules ajoutées agissent en tant que substrats pour une germination hétérogène. A.L.Greer et al. [Gre, 00] ont développé un modèle numérique afin de prédire la taille des grains après l'ajout d'inoculant lors de la solidification. Le modèle est basé sur le modèle de Maxwell et Hellawell [Max, 75]. Ce modèle suppose que pour une taille de germe donnée, un germe devient actif lorsque la surfusion atteint la valeur critique ΔT_c :

$$\Delta T_c = \frac{4\Gamma}{d} \qquad \textbf{(II-3)}$$

Où :

- d est le diamètre du germe.

Ainsi, la croissance d'un grain sur un germe commence lorsque la surfusion atteint la valeur ΔT_c. La figure II-3 représente la distribution du diamètre de particule pour l'alliage AL-5Ti-1B obtenue par analyse d'image. A partir de cette distribution, la description de la population de particules est exprimée sous la forme d'une loi de distribution de taille :

$$y = y_0 \exp\left(-\frac{d}{d_0}\right) \qquad \textbf{(II-4)}$$

Avec :

- d est le diamètre du disque ;
- d_0 est la largeur caractéristique de la distribution.

Pour des diamètres de l'ordre de 1-6µm, d_0 égale 0.72µm.

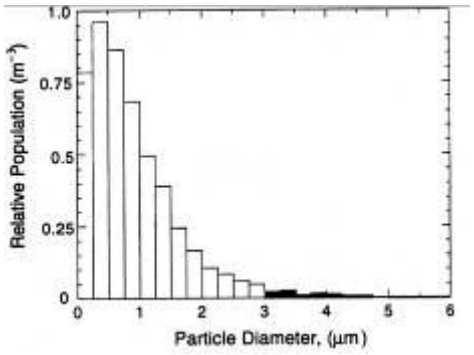


Figure II-3 : distribution du diamètre de particules pour l'alliage Al-5Ti-1B [Gre,00].

L'addition d'inoculant influence la taille finale des grains, cette dernière décroît lorsque on augmente le niveau de l'addition. Greer et al. ont développé un modèle de germination/croissance. La distribution de germe utilisée pour leur calcul est celle mesurée et rapportée sur la figure II-3. Le modèle de croissance de grains est un modèle qui décrit la croissance d'une sphère pleine, autrement dit les grains sont globulaires. Des classes de grains sont définies à partir de la distribution de taille des particules d'inoculant. La taille de grain est calculée pour chaque classe de grain. La moyenne des tailles de grain pondérée par la densité relative de grain activées permet d'accéder à la taille moyenne de grain.

La figure II-4 présente l'évolution du diamètre de grains en fonction du niveau d'addition d'inoculant. On observe qu'en dessous de 1ppt, le diamètre des grains dépend fortement de l'addition d'inoculant. Pour des valeurs plus élevées, la taille de grain tend vers une valeur limite. D'autre part, une bonne corrélation entre la taille de grains obtenue par le modèle et celle mesurée expérimentalement a été observée. Sur la figure II-5, les mesures de taille de grains de Spittle et Sadli [Spi, 95] ont été reportées. Ces données ont été tracées en fonction du paramètre Q (avec $Q = m(k-1)C_0$) appelé coefficient de restriction de croissance (annexe I). Les expériences ont été toutes effectuées avec la même quantité d'inoculant ajouté et la même vitesse de refroidissement. Les prédictions du modèle reflètent bien les données expérimentales, reportées sur la même figure. Notamment pour les tailles de grains en dessous de 400μm. on retrouve bien que plus le coefficient de restriction de croissance est grand, à même quantité d'inoculant et à même vitesse de refroidissement. Cette comparaison a fait apparaître une corrélation basée sur Q est plus conforme que celle basée sur P (avec $P = \frac{Q}{k}$).

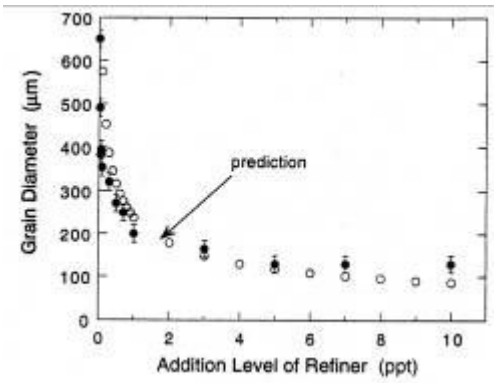


Figure II-4 : l'évolution du diamètre de grains en fonction du niveaux d'addition d'inoculant.

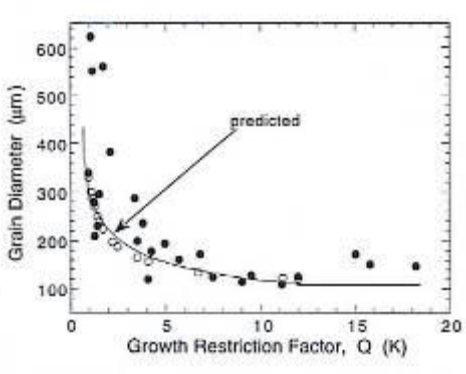


Figure II-5 : l'évolution de la taille de grains en fonction du paramètre de resctriction Q.

Dans cette partie, nous avons vu les différents mécanismes associés à la germination et à la croissance des cristaux dans la zone équiaxe. Ces mécanismes se produisent à une échelle microscopique ce qui nous pousse à nous interroger sur les conditions d'équilibre thermodynamique local entre le liquide et le solide à une interface.

II–3.2. Equilibre thermodynamique à une interface :

Parmi les grandeurs physico-chimiques qui régissent les conditions d'équilibre thermodynamique locales entre le liquide et le solide à travers une interface, se trouve la tension interfaciale liquide/solide. La tension interfaciale liquide/solide est isotrope, elle intervient dans une relation dite relation de Gibbs-Thomson reliant la température d'équilibre locale, Te, et la courbure locale de l'interface. Pour un corps pur, cette relation s'écrit :

$$T_e = T_f - \Gamma.\kappa \qquad \textbf{(II-5)}$$

$$\Gamma = \frac{\gamma^{s/l} V_m^s}{\Delta S_f} \qquad \textbf{(II-6)}$$

Avec :

- T_f température de fusion du corps pur ;
- V_m^s volume molaire de la phase solide ;
- ΔS_f entropie molaire de fusion ;
- $\gamma^{s/l}$ tension interfaciale liquide/solide ;
- κ la courbure locale de l'interface liquide/solide.

Pour le cas d'une sphère de rayon R, la relation (II-5) devient :

$$T_e = T_f - \frac{2\Gamma}{R} \qquad \textbf{(II-7)}$$

Pour un alliage, on peut considérer que la relation permettant de calculer la température d'équilibre à l'interface liquide/ solide, est la même que quand il s'agit d'un corps pur sauf que la température de fusion est remplacée par la température de liquidus.

Si on considère une pointe de dendrite d'un rayon de courbure R de l'ordre de 10^{-6} m, le coefficient de Gibbs-Thomson étant de l'ordre de 10^{-7} m.K, nous obtenons une surfusion par la relation (II-7) de l'ordre de 0,2K. Cette valeur est relativement faible. Cependant l'effet de courbure est important. Notamment les différences de courbure à l'échelle des bras secondaire de dendrites sont responsables du phénomène de maturation des structures (épaississement des bras de dendrites).

II–3.3. Bilan de masse et d'énergie à une interface solide/liquide :

La croissance cristalline s'accompagne d'un dégagement de chaleur latente et d'un rejet de soluté à l'interface. L'efficacité de l'évacuation de la chaleur latente et des éléments de soluté loin de l'interface par diffusion et par convection règle en grande partie la vitesse de cette interface.

Nous rappelons les équations de conservation de soluté et d'énergie à une interface solide/liquide :

- Equation de conservation de la masse de soluté :

$$\rho_s \overrightarrow{v_f}.\vec{n}^{l/s} \left[w^{l*} - w^{s*}\right] = D^s \rho_s \frac{\partial w^s}{\partial n^{l/s}} + D^l \rho_l \frac{\partial w^l}{\partial n^{s/l}} \qquad \textbf{(II-8)}$$

La diffusion de matière et d'énergie peut être caractérisée par la différence de concentration entre un point situé sur l'interface $\left(w^{\rho\mu}\right)$ et un point loin de l'interface w^{φ} et par des longueurs de diffusion. En introduisant ces différences de concentration et ces longueurs de diffusion pour les flux, l'équation (II-8) devient :

$$\rho_s \overrightarrow{v_f}.\vec{n}^{l/s} \left(w^{l*} - w^{s*}\right) = \frac{\rho_l D_l}{\delta_c^l}\left(w^{l*} - w^{l}{}_{\infty}\right) + \frac{\rho_s D_s}{\delta_c^s}\left(w^{s*} - w^{s}{}_{\infty}\right) \qquad \textbf{(II-9)}$$

- Equation de conservation de l'énergie :

$$\rho_s \overrightarrow{v_f}.\vec{n}^{l/s} \left[\Delta h_f\right] = \lambda_s \frac{\partial T}{\partial n^{l/s}} + \lambda_f \frac{\partial T}{\partial n^{s/l}} \qquad \textbf{(II-10)}$$

En introduisant le même concept pour l'évaluation des flux, l'équation (II-10) devient :

$$\left(h^{l*} - h^{s*}\right)\overrightarrow{v_f}.\vec{n}^{l/s} = \frac{S_v \lambda^l}{\delta^l_{th}}\left(T^{l*} - T^{l}{}_{\infty}\right) + \frac{S_v \lambda^s}{\delta^s_{th}}\left(T^{s*} - T^{s}{}_{\infty}\right) \qquad \textbf{(II-11)}$$

La prise en considération de ces couches limites permet de définir deux surfusions, une surfusion ΔT_{th} due au transfert thermique et l'autre ΔT_c due au transfert de matière :

- Pour le transport de chaleur, à la surfusion dite thermique ΔT_{th} est égale :

$$\Delta T_{th} = T^{l*} - T^{l}{}_{\infty} \qquad \textbf{(II-12)}$$

Avec :

- T^* température à l'interface solide/liquide ;
- $T^{l}{}_{\infty}$ température moyenne dans le liquide loin de l'interface.

- Pour le transport de masse de l'élément d'alliage i on définit l'écart de composition Δw_i et la surfusion chimique ΔT_c comme :

$$\Delta w_i = w^* - w^l_{i\infty} \qquad \textbf{(II-13)}$$

$$\Delta T_c = \sum_i m_i \left(w^l_{i\infty} - w^{l*}_i\right) \qquad \textbf{(II-14)}$$

Avec :

- w^* titre massique du liquide à l'interface solide/liquide ;
- $w^l_{i\infty}$ titre massique moyen dans le liquide loin de l'interface ;
- m_i pente de liquidus de l'élément d'alliage i ;

A l'interface, la composition est associée à la température par la relation suivante :

$$T^* = T_f + \sum_i m_i w^{l*}_i - \Delta T_{\Gamma} \qquad \textbf{(II-15)}$$

Avec :

- ΔT_{Γ} est la surfusion liée à la courbure de l'interface ;

Il est alors possible de définir la surfusion totale ΔT comme :

$$\Delta T = T_{liq} - T^l = T_f + \sum_i m_i w^l_{i\infty} - T^l \qquad \textbf{(II-16)}$$

T_{liq} est la température de liquidus de l'alliage dans la phase liquide loin de l'interface.

On peut voir à partir des relations II-14, II-15, II-16 que la surfusion ΔT est la somme de trois contributions :

$$\Delta T = \Delta T_c + \Delta T_{th} + \Delta T_{\Gamma} \qquad \textbf{(II-17)}$$

Pour nos applications, le plus souvent la surfusion chimique est la plus importante et l'on néglige la surfusion de courbure et la surfusion thermique. Après avoir étudié l'équilibre thermodynamique et le bilan de masse et d'énergie à une interface solide/liquide, nous allons étudier la croissance de la pointe d'une dendrite.

II–3.4. La croissance d'une pointe de dendrite :

Une pointe de dendrite a une géométrie qui est bien représentée par un paraboloïde de révolution. Le calcul de la vitesse d'une pointe de dendrite nécessite de connaître les champs de diffusion thermique et solutaux dans le liquide environnant. Une fois ce problème résolu, il reste à connaître le rayon de cette pointe.

Ivantsov [Ivan,47] a résolu l'équation de conduction de la chaleur dans un liquide surfondu supposé infini, autour d'un paraboloïde de révolution isotherme à la température T_f avançant à une vitesse constante dans la direction de son axe principal, figure II-6.

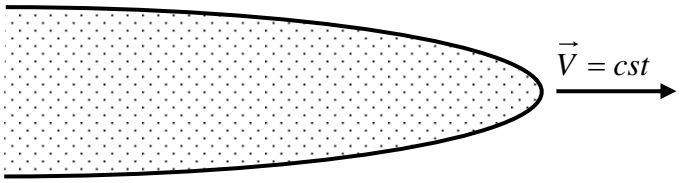


Figure II-6 : Pointe de dendrite.

La relation obtenue par Ivantsov est définie par :

$$\Delta = Iv(P_v) \qquad \textbf{(II-18)}$$

Avec :

- Δ la surfusion adimensionnelle du liquide à l'infini, elle est définie par la relation suivante :

$$\Delta = \frac{T_f - T^{\infty}}{L/cp^l} = \frac{\Delta T}{L/cp^l} \qquad \textbf{(II-19)}$$

Où :

- T_f température de fusion du corps pur à laquelle se trouve l'interface solide/liquide, les phénomènes interfaciaux ayant été négligés $(\Delta T \approx \Delta T_{th})$;

- T^{∞} température du liquide à l'infini ;
- L chaleur latente de fusion ;
- Cp^{l} capacité thermique du liquide.

- P_v le nombre de Péclet associé à l'avancée de l'interface paraboloïdale. Il est défini, dans le cas du corps pur par :

$$P_v = \frac{r_p V_p}{2D_{th}^l} \qquad \textbf{(II-20)}$$

Où :

- r_p rayon de courbure à la pointe du paraboloïde ;
- V_p vitesse de la pointe du paraboloïde ;
- D_{th}^l diffusivité thermique du liquide.

- Iv est la fonction d'Ivantsov définie par :

$$Iv(x) = x\exp(x)E_1(x) \qquad \textbf{(II-21)}$$

E_1 est la première fonction exponentielle intégrale [Abr,65].

Ces résultats ont été généralisés au cas d'un alliage binaire ou multiconstitué. Dans ce cas, la solution de l'équation de diffusion d'une espèce chimique dans le liquide relie, la sursaturation réduite Ω_i et le nombre de Péclet chimique P_{vi}, associés à l'élément d'alliage i :

$$\Omega_i = Iv(Pv_i) \qquad \textbf{(II-22)}$$

Avec :

- La sursaturation est définie par la relation suivante :

$$\Omega_i = \frac{w_i^{l*} - w_i^{l\infty}}{w_i^{l*}(1-k_i)} \; ; \qquad \textbf{(II-23)}$$

- w_i^{l*} titre massique à l'interface solide/liquide du côté liquide ;
- $w_i^{l\infty}$ titre massique du liquide à l'infini.
- k_i coefficient de partage pour l'élément i ;

- Le nombre de Péclet est défini par la relation suivante :

$$Pv_i = \frac{r_p v_p}{2D_i^l} \qquad \textbf{(II-24)}$$

- D_i^l coefficient de diffusion de l'élément d'alliage i dans le liquide.

A l'échelle de la pointe de dendrite pour la gamme de vitesse de pointe correspondant à nos applications, ΔT_Γ et ΔT_{th} (II- 17) sont négligeables devant ΔT_c. ΔT_c est donc la force motrice principale de l'avancée de la pointe. La surfusion est alors donnée par la relation :

$$\Delta T \approx \Delta T_c = \sum_i m_i \left(w_i^{l\infty} - w_i^{l*} \right) \qquad \textbf{(II-25)}$$

Avec :

- m_i désignent les pentes de liquidus pour la composition du liquide loin de la pointe.

En utilisant la définition de la sursaturation et la solution d'Ivantsov, on obtient :

$$\Delta T = \sum_i m_i w_i^{l\infty} \left(1 - \frac{1}{1-(1-k_i) Iv(Pv_i)} \right) \qquad \textbf{(II-26)}$$

La solution d'Ivantsov se présente sous la forme d'un ensemble infini de couples (r_p,v_p) pour une surfusion donnée. Ainsi, elle ne donne qu'une relation entre la force motrice ΔT et le produit du rayon et de la vitesse de la pointe ($r_p.v_p$) via le nombre de Péclet P_{vi}. Afin de lever cette indétermination, plusieurs recherches ont été menées.

Pour un alliage binaire, Langer et Muller-Krumbhaar [Lan, 77] énoncèrent que le rayon de la pointe d'une dendrite paraboloïdale en régime de croissance stationnaire contrôlée par la diffusion de la chaleur dans le liquide est très proche de la longueur d'onde de stabilité marginale ls d'un front plan avançant dans les mêmes conditions que la dendrite. Ce résultat se traduit par la relation suivante :

$$r_p = \frac{l_s}{2\pi\sqrt{\sigma^*}} \qquad \textbf{(II-27)}$$

σ^* étant une constante de stabilité dont la valeur a été déterminée numériquement :

$$\sigma^* = 0{,}025 \pm 0{,}007 \qquad \textbf{(II-28)}$$

En supposant nuls les coefficients, et les termes croisés dans les équations de diffusion, Bobadilla et coll [BoB, 88] reprirent le principe de calcul de l_s développé par Coates et coll [Coa, 68], afin de généraliser le critère de stabilité marginale pour le cas des alliages multiconstitués. Pour cela, ils ont déterminé l_s et les résultats obtenus ont été remplacés dans la relation d'Ivantsov, ce qui a permis d'obtenir l'expression du rayon de la pointe de dendrite en fonction du nombre de Péclet :

$$r_p \approx \frac{\Gamma}{\sigma^*} \left\{ \sum_i 2P_{vi} m_i (k_i - 1) \frac{w_i^{l\infty}}{1-(1-k_i) Iv(P_{vi})} \xi(P_{vi}) \right\}^{-1} ; \qquad \textbf{(II-29)}$$

$$\xi(P_{vi}) = \frac{P_{vi} - \sqrt{P_{vi}^2 + 4\pi^2}}{P_{vi} - 2k_t P_{vi} - \sqrt{P_{vi}^2 + 4\pi^2}} \qquad \textbf{(II-30)}$$

II– 3.5. Croissance des branches secondaires :

Les bras secondaires se développent derrière la pointe de dendrite d'un bras primaire du fait à nouveau d'une déstabilisation de l'interface liquide/solide. Lorsqu'une dendrite est soumise à la convection, les interactions entre les branches secondaires s'amoindrissent. Les couches limites de transfert autour de chacune d'elles sont diminuées par le passage du fluide contribuant ainsi à une croissance individuelle plus importante. Ceci se traduit par une relation linéaire entre l'amplitude des branches et leur distance à la pointe de la dendrite primaire.

Plusieurs recherches expérimentales ont été réalisées afin de déterminer une loi d'échelle qui relie la longueur des branches secondaires actives et la distance z de leurs racines à l'extrémité de la pointe, figure II-7. Une branche est dite active lorsqu'elle est plus grande ou de taille égale à la branche active la plus proche du côté de la pointe primaire. D'après Huang et coll [Han, 81], cette loi traduit la croissance compétitive des branches, ce qu'on appelle la maturation dynamique. Le champ de température des plus grandes perturbe celui des proches voisines jusqu'à les empêcher de se développer.

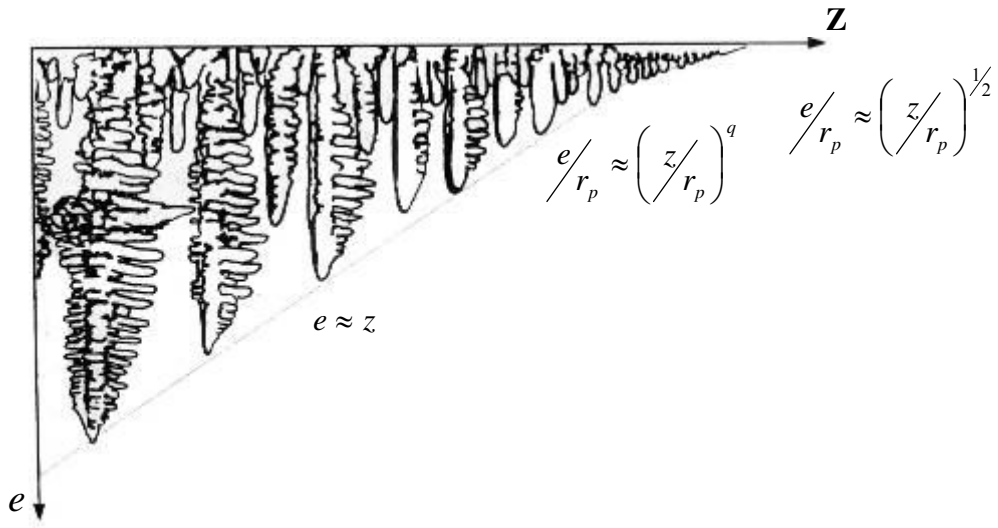


Figure II-7 : dendrite de succinontrile croissant par diffusion de chaleur dans un liquide surfondu de 0,515°C [Hua, 81]. L'enveloppe en trait fin relie les branches secondaires actives [App, 00].

L'étape qui suit la croissance dendritique est la solidification du liquide interdendritique. Les branches de dendrites formées derrière la pointe le long de la branche, vont s'épaissir et les plus petites vont disparaître au profit des plus grosses (ce qu'on appelle la maturation). Dans la partie suivante nous allons présenter le mécanisme de la maturation.

II–3.6. La maturation :

De nombreux modèles ont été développés afin de décrire la maturation. Ils permettent de décrire l'évolution de la distance moyenne entre deux branches secondaires adjacentes λ_2. Expérimentalement, il a été observé que λ_2 tend à augmenter au cours du temps, ceci est dû à la minimisation de l'énergie interfaciale provoquant aussi un réarrangement morphologique de la structure dendritique. Les variations de courbure de l'interface solide/liquide dans la zone intragranulaire induisent des gradients de température et de concentration, et par conséquent des flux de chaleur et de soluté. Ces flux entraînent une redissolution des parties solides aux interfaces les plus convexes (petit rayon de courbure) en faveur de la croissance des parties solides dont les interfaces sont moins convexes (grand rayon de courbure).

Certains auteurs ont essayé de généraliser les modèles statiques qu'ils avaient développés afin de décrire la maturation de zones pâteuses composées de sphères au cas de zone pâteuses dendritiques en introduisant une autre grandeur caractéristiques S_v, la surface spécifique des interfaces solide/liquide. Ces études ont aboutis à des relations de la forme suivante :

$$\lambda_2^3 = K_{mat}\left(T, \overline{w}^d, g_i\right)t + \lambda_2^{03} \qquad \textbf{(II-31)}$$

Avec:

- $K_{mat}\left(T, \overline{w}^d, g_i\right)$ est la constante de maturation dépendant de la température T du système, du titre massique moyen $\overline{w}^d$ du liquide intragranulaire pour les alliages binaires, et dans certains cas de la fraction volumique de solide g_i. L'ordre de grandeur de la constante de maturation est de $10^{-14}m^3/s$, soit une variation de l'ordre de la dizaine de microns par seconde;
- t: le temps qui s'est écoulé depuis l'instant initial auquel les branches secondaires étaient espacées de λ_2^0.

B. Appolaire [App, 00] a étendu le modèle de maturation de Mortensen [Mor, 91] à un alliage multiconstitué. La relation suivante a été établie en régime de diffusion pure pour un alliage multiconstitué [App, 00] :

$$\frac{d}{dt}\left(\lambda_2^3\right)=\frac{27}{4g_i\left(1-g_i^{1/2}\right)}\frac{\Gamma}{\sum_i^n\left(m_i\left(k_i-1\right)\frac{w_i^{l*}}{D_i^l}\right)} \qquad \textbf{(II-32)}$$

L'augmentation de l'espacement moyen λ_2 contribue notamment à une variation de la perméabilité du cristal agissant alors sur l'hydrodynamique. Nous rappelons que le phénomène de maturation ne modifie pas la valeur de la fraction interne.

Dans ce paragraphe, nous avons vu une description des phénomènes élémentaires liés à la germination et à la croissance d'un grain équiaxe. Dans le paragraphe suivant nous traiterons le principe d'un modèle prenant en compte la germination et la croissance de grains équiaxes.

II–4. Le principe d'un modèle prenant en compte la germination et la croissance de grains équiaxes :

II–4.1. Modèle de croissance :

Rappaz et Thévoz [Rapp, 87] ont proposé un modèle de croissance d'un grain équiaxe. Pour cela, les auteurs ont considérés trois zones définissant un grain, ces zones correspondent à :

- La phase solide ;
- La phase liquide interdendritique ;
- La phase liquide extradendritique.

Une enveloppe du grain est définie comme étant une sphère composée par les deux premières zones. La phase liquide est définie comme étant la réunion des deux dernières zones. La fraction de grain est définie comme le rapport du volume du solide et de la phase liquide interdendritique compris à l'intérieur de l'enveloppe au volume total du système. La diffusion du soluté dans la phase solide a été négligée par les auteurs. La composition du liquide interdendritique est supposée uniforme (diffusion parfaite dans cette phase). En raison de la diffusion thermique importante pour les alliages métalliques, le système a été supposé

uniforme en température, la loi de variation de l'enthalpie moyenne du système en fonction du temps est supposée connue. Les auteurs ont ensuite développé deux méthodes de résolution :

- Une première méthode où le transfert de soluté dans le liquide extradendritique par diffusion est calculé numériquement en résolvant la deuxième loi de Fick.
- La deuxième méthode est une simplification de la méthode précédente, le gradient de soluté dans le liquide extradendritique à l'interface entre l'enveloppe et ce liquide est estimé. Pour cela, une longueur de diffusion égale à D_i / V^* est utilisée. Cette approche a permis aux auteurs de retrouver des phénomènes observés expérimentalement comme la recalescence et d'étudier l'influence des paramètres sur la recalescence.

Du fait de sa taille, la température d'un cristal est pratiquement homogène. Pour une quantité de solide formé fixée, la température du grain ne peut qu'être supérieure à la température obtenue par l'équilibre thermodynamique complet entre les phases solide et liquide. La valeur d'enthalpie moyenne d'un système fermé contenant un ensemble de grains équiaxes en supposant les densités et les chaleurs spécifiques égales et constantes en cours d'évolution, est donnée par :

$$\frac{\partial \bar{h}}{\partial t} = C_p \frac{\partial T}{\partial t} - L \frac{\partial f^s}{\partial t} \qquad \textbf{(II-33)}$$

Soit encore:

$$C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial \bar{h}}{\partial t} + L \frac{\partial f^s}{\partial t} \qquad \textbf{(II-34)}$$

Le premier terme du membre de droite de l'équation (II-34) correspond à l'échange de chaleur avec l'intérieur, dans le cas le plus courant en solidification, ce terme est négatif. Le deuxième terme du membre de droite correspond au dégagement interne de chaleur latente. Dans le cas de la solidification, ce terme est positif. Ainsi dans le cas d'une situation "classique" de solidification, les deux termes du membre de droite de l'équation (II-34) sont de signes opposés. C'est pourquoi, même à l'équilibre thermodynamique, la solidification s'accompagne d'une diminution de la vitesse de refroidissement (dérivée partielle de la température par rapport au temps).

Dans une situation où la germination joue un rôle, tant qu'un nombre suffisant de germe n'a pas été activé, la vitesse de refroidissement conservera une valeur proche de celle du système entièrement liquide. Ce n'est qu'une fois que les germes auront démarré leur

croissance que le deuxième terme du membre de droite de l'équation II-34 jouera un rôle. Du fait de ce retard à l'équilibre, la vitesse de refroidissement peut même devenir positive (avec la façon dont on l'a définie) ce qui correspond alors à une augmentation de la température. Ce phénomène est nommé recalescance.

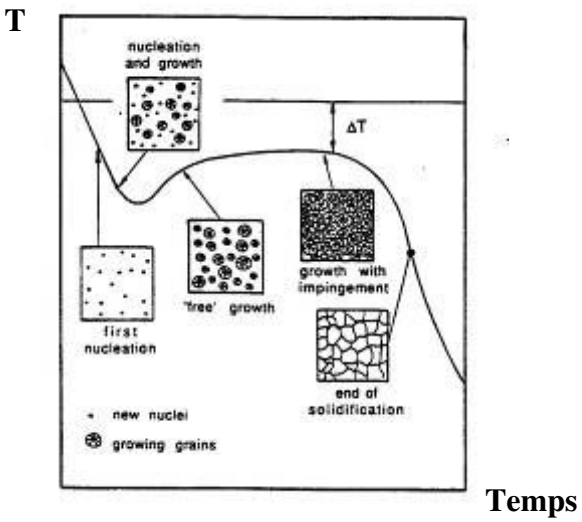


Figure II-8 : schéma présentant la courbe de température en montrant la recalescence ainsi que les différentes étapes de croissance suivant la courbe de température.

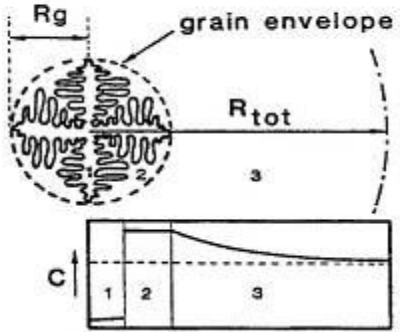


Figure II-9 : Représentation d'un grain équiaxe selon le modèle Rappaz et al. [Rap, 87], R_g est le rayon de l'enveloppe sphérique qui entoure les deux première zones.

Wang et al. [Wan, 93] ont proposé un modèle qui tient compte du mouvement des grains équiaxes. Le modèle permet de décrire deux modes de croissance, pour des grains équiaxes : globulaire et dendritique. En se basant sur le principe de ces modèles, Appolaire [App, 00] dans son modèle a pris en compte en même temps l'effet de la convection et de la nature multiconstitué des alliages industriels. Ce qui n'était pas le cas des deux modèles précédents (Rappaz, et Wang et al.). Le modèle de croissance d'un grain équiaxe développé par B.Appolaire est une base pour notre travail, c'est pourquoi nous lui avons consacré une partie pour sa description dans le chapitre III. Nous présentons ci-dessous les grandes lignes de ce modèle.

Le principe du modèle d'évolution d'un cristal repose sur les idées fondamentales suivantes [App, 00] :

- Un sous-système ouvert défini comme toute la matière comprise dans le volume délimité par une enveloppe fictive passant par l'extrémité des bras de dendrite. Cette enveloppe contient le squelette solide du cristal et le liquide situé entre les branches dendritiques (intragranulaire). Lorsque le liquide n'existe pas, les contours de l'enveloppe et du solide coïncident, le cristal est compact. L'échelle du cristal est définie par la taille de cette enveloppe.
- Des grandeurs géométriques sont définies comme la forme de cette enveloppe, son volume. Par ailleurs, des grandeurs moyennes sont introduites (fraction interne de solide, composition moyenne en soluté dans la phase solide et dans le liquide intragranulaire)

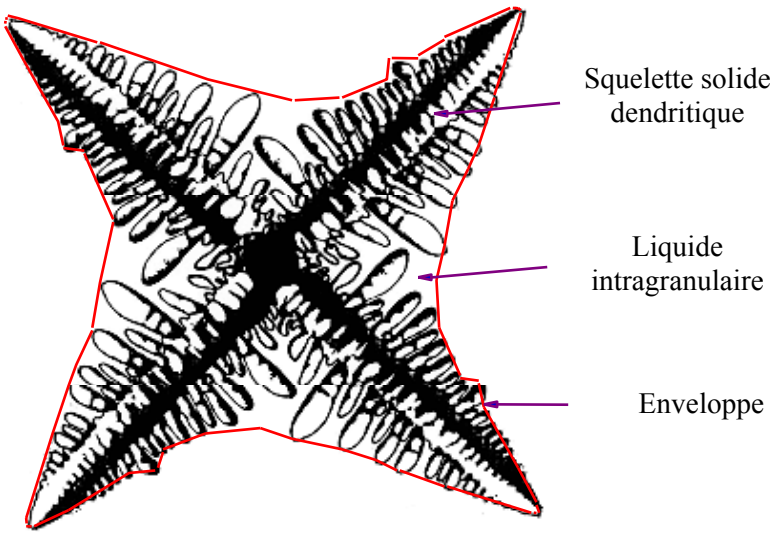


Figure II-9 : Définition du système ouvert considéré dans le modèle de B.Appolaire [App,00].

B.Appolaire [App, 00] a inclut une description des phénomènes microscopiques dans un modèle macroscopique afin de pouvoir réintroduire les échelles plus petites contenant les informations morphologiques nécessaires pour la résolution du problème. Son modèle se base sur des modèles évaluant les cinétiques des pointes de dendrites primaires et secondaires qui déterminent l'extension de l'enveloppe, et décrivant l'évolution de la structure du solide intragranulaire.

II–4.2. Modèle germination / croissance d'une population de grains équiaxes :

Nous présentons dans cette partie, le modèle de germination/croissance d'une population de grains équiaxes de Thévoz/Rappaz [Rap, 87]. Ce modèle dont le principe est présenté sur la figure II-10 est basé sur l'hypothèse que différentes classes de germes, actifs à différentes surfusions, sont présents dans le liquide. Dés que la surfusion d'une famille de sites de germination est atteinte, les sites sont actifs, instantanément. La figure II-10 montre une distribution de la densité des sites de germination comme une fonction de la surfusion sous forme d'une distribution gaussiènne. La densité finale des grains est fonction du maximum de la surfusion à la recalescence.

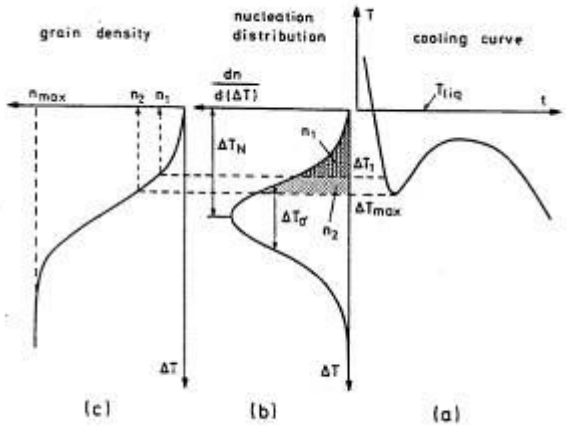


Figure II-10 : représentation schématique du modèle de germination. La distribution des sites de germinations : a)fonction de la surfusion, b) distribution gaussiènne, c) évolution de la température. D'après [Rap,87]

On considère un volume métallique V suffisamment petit. On peut supposer que sa température T est uniforme, et que la variation en temps dépendra du flux de chaleur Q_{ext}, quittant la surface S. L'équation de la chaleur est la suivante :

$$Q_{ext}\frac{S}{V} = c_p\frac{\partial T}{\partial t} - L\frac{\partial f_s}{\partial t} \qquad \textbf{(II-35)}$$

Avec :

- f_s : fraction solide ;
- cp : chaleur spécifique volumique ;
- L : chaleur latente.

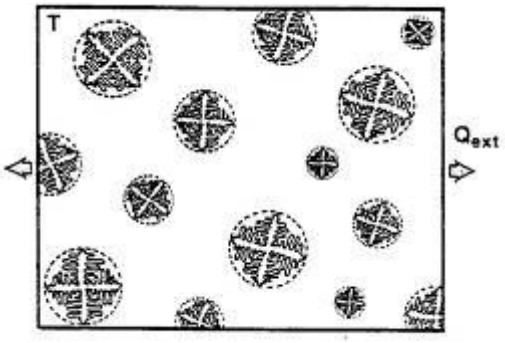


Figure II-11 : représentation schématique des volumes considérés durant la solidification équiaxe dendritique.

La figure II-11 représente schématiquement le volume V dans le cas d'une solidification dendritique équiaxe. Pour un tel volume, la fraction solide (structure dendritique équiaxe) à l'instant t est défini par :

$$f_s(t) = \int_0^t \dot{n}(\tau)\frac{4}{3}\pi R^3(t,\tau) f_i(t,\tau) d\tau \qquad \textbf{(II-36)}$$

Avec :

- $R(t,\tau)$: le rayon à l'instant t de grains ayant germé à l'instant τ ;
- $f_i(t,\tau)$: la fraction de solide interne d'un grain dendritique ;
- $\dot{n}(\tau)$: le taux de germination à l'instant τ.

La dérivé de la fraction solide en fonction du temps s'écrit comme suit :

$$\frac{\partial f_s}{\partial t}=\left[\dot{n}(t)\frac{4}{3}\pi R^3(t,0)f_i(t,0)+\int_0^t \dot{n}(\tau)4\pi R^2(t,\tau)\frac{\partial R(t,\tau)}{\partial t}f_i(t,\tau)d\tau+\int_0^t \dot{n}(\tau)\frac{4}{3}\pi R^3(t,\tau)\frac{\partial f_i(t,\tau)}{\partial \tau}d\tau\right]\phi(f_s)$$

(II-37)

Avec $\phi(f_s)$ est un facteur prenant compte de l'interaction entre les grains.

L'équation II-37 est complexe car elle demande de calculer une distribution de taille de grain. Pour éviter ce calcul, les auteurs ont considéré uniquement une taille moyenne des grains. Ainsi l'équation (II-36) se réduit à :

$$f_s=n(t)\frac{4}{3}\pi R^3(t)f_i(t) \qquad \textbf{(II-38)}$$

En négligeant le premier terme de la dérivée l'équation (II-37) se réduit à :

$$\frac{\partial f_s}{\partial t}=n(t)\left[4\pi R^2 f_i v(t)+\frac{4}{3}\pi R^3\frac{\partial f_i}{\partial t}\right]\phi(f_s) \qquad \textbf{(II-39)}$$

Avec :

- v : le taux de croissance équiaxe avec $v=\frac{\partial R}{\partial t}$;
- Dans le cas de grains dendritiques, la cinétique de croissance qui est donnée par celle des pointes de dendrite, le calcul de la diffusion de soluté couplé avec la conservation de soluté, permet de déterminer la fraction solide interne f_i

Dans le but de calculer la solidification équiaxe, il est nécessaire de coupler, l'histoire thermique (II-35) avec la variation de la fraction de solide décrite par l'équation (II-39). Pour cela, on peut coupler les modèles de germination, croissance et les modèles décrivant les transferts (chaleur, masse, quantité de mouvement) à l'échelle du produit.

II–5. Les modèles micro/ macro :

Les modèles de croissance de grains que nous avons présentés dans la partie précédente peuvent être couplés avec un modèle de transfert de chaleur et de masse à l'échelle macroscopique. On désigne alors ce type de modèle sous le nom de micro/macro. Pour chaque point de maillage macro, le modèle micro est appliqué.

Thévoz et Rappaz ont été les premiers à développer ce type d'approche. Ils ont montré notamment, en appliquant leur modèle à un disque de frein, qu'il était possible d'expliquer la différence de taille de grains par l'influence de la vitesse de refroidissement locale. Plus la vitesse de refroidissement est grande, plus la taille de grains est petite car la surfusion atteinte

au moment de la recalescence est plus importante. Beckermann et Ni [Beck, 96] présentent dans leur étude les effets de la densité de germes et le mouvement de grains sur la distribution finale de la microstructure et de la macroségrégation.

Leur modèle est basé aussi sur le modèle Ni et Beckerman [Ni, 91]. Les grains sont supposés de morphologie globulaire. Il a été appliqué à un alliage Al-4%Cu. Le système étudié est constitué d'une cavité rectangulaire dont les parois sont imperméables et adiabatiques, excepté la paroi verticale gauche qui est refroidie avec un flux constant de chaleur de $10^6 W/m^2$ (voir la figure II-12).

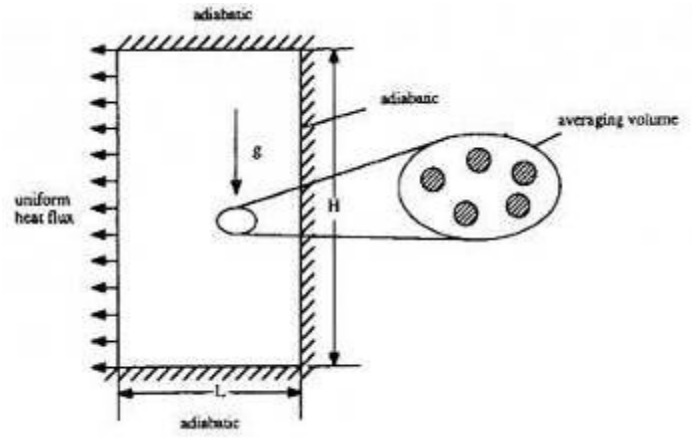


Figure II-12 : illustration du système physique employé par Ni et Beckerman [Beck, 91] pour modéliser la solidification d'un alliage Al-4%Cu

Dans cette étude, le modèle de germination est très simple : localement, tous les germes sont activés instantanément à la température de liquidus, leur diamètre initial est égal à 10^{-6}m. Trois simulations ont été menées. La première consiste à imposer une vitesse nulle pour tous les grains et un taux de germination de 10^{11} grains.m^{-3}.s^{-1}. Dans la deuxième et la troisième simulation, le mouvement des grains est pris en compte et la densité de germination est fixée respectivement à 10^{11} grains.m^{-3} et à 10^9 grains.m^{-3}.

La figure II-13 représente le champ de vitesse superposé aux isovaleurs de fraction solide pour la simulation 2. On observe qu'à l'instant t = 10s, le maximum de la fraction solide se trouve le long de la partie inférieure de la cavité indiquant que les cristaux sont transportés vers le bas.

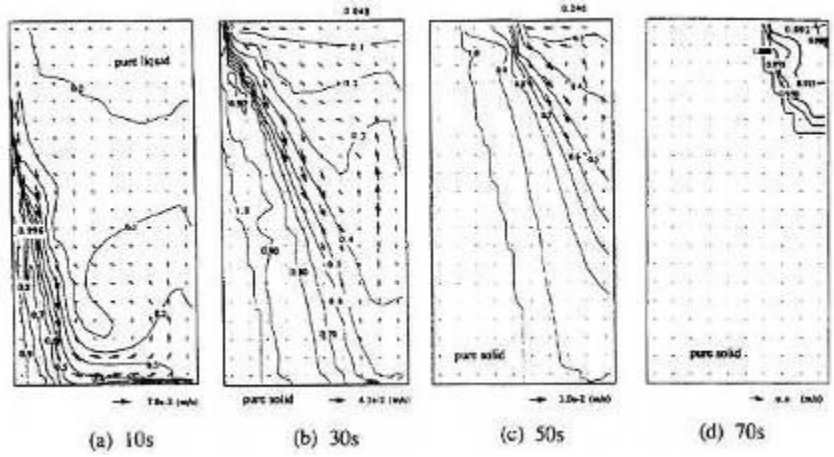


Figure II-13 : les champs de vitesse superposés aux contours de fraction solide pour la simulation 2.

A l'instant t = 30s les grains stationnaires sont les grains en mouvement qui occupent la pièce entière. A l'instant t = 50s, la partie supérieure du lingot est complètement liquide, ceci est dû à la sédimentation des grains solides vers le bas.

Les résultats de la troisième simulation sont présentés sur la figure II-14. On observe qu'une faible densité de grains résulte de la valeur plus faible de la densité volumique de germes. Les grains ont alors un rayon plus important et ils sédimentent plus rapidement que dans le cas précédent.

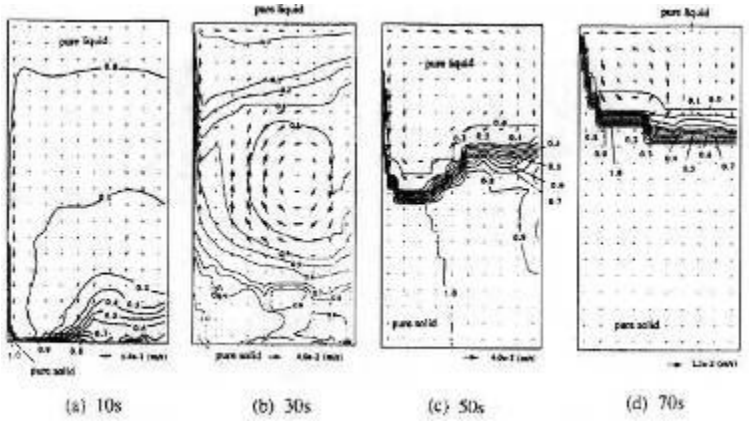


Figure II-14 : les champs de vitesse superposé aux contours de fraction solide pour la simulation 3.

A l'instant t = 10s, on observe une couche de grains sédimentés au fond du domaine. Un lit de grains globulaires entassés est observé dans l'angle inférieur droit du lingot et une

fine couche de solide attaché commence à se développer à partir du fond du lingot. Par la suite, les grains continuent de sédimenter, il en résulte une interface horizontale entre le solide accumulé et le liquide comme si la solidification a eu lieu en une seule dimension (mode vertical). Si on compare les deux cartes de rayon de grain de la figure II-15 pour les simulations 2 et 3 en fin de solidification on peut noter qu'une différence de taille et de répartition des grains pas lisible.

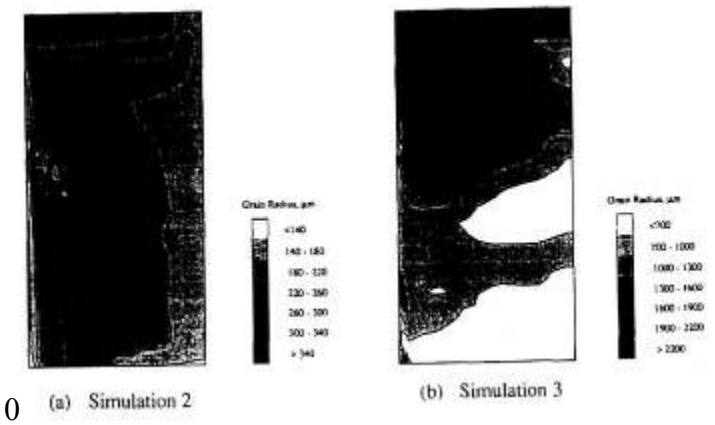


Figure II-15 : la distribution de rayon des grains pour : a) simulation 2 ; b) simulation 3.

On peut observer que pour la simulation 2 des petits grains sont présents dans la partie adjacente à la partie inférieure du refroidisseur et proche de l'angle inférieur à droite. On observe aussi des grains plus larges dans la partie supérieure une couche de grains fins le long de la partie inférieure du refroidisseur. L'effet de la sédimentation des grains est plus marqué dans le cas de la simulation 3, dans ce cas, le rayon des grains augmente considérablement en se dirigeant vers le haut. Cette étude montre l'influence de la germination et du mouvement des grains sur la structure finale du lingot. L'influence de la germination se prononce à travers la sédimentation des grains qui est contrôlée par la traînée.

Ainsi, il est possible de coupler un modèle de croissance de grains avec un modèle de transport à l'échelle macroscopique. Les modèles que nous avons présentés ne couvrent pas cependant l'intégralité du problème. Ainsi le modèle de Thévoz-Rappaz prend en compte une loi de germination élaborée, mais pas le mouvement des grains, tandis que c'est l'inverse pour le modèle de Wang et Beckermann. Enfin Greer et al., dont nous avons présenté les résultats dans la partie II.3.1 sont les seuls à calculer une distribution de taille de grains.

Dans la partie suivante, nous allons présenter les différents résultats observés pour une coulée semi-continue.

II–6. Les observations en coulée semi-continue

En coulée semi-continue, l'influence de différents paramètres sensibles a été étudiée :

- La surchauffe ;
- L'intensité du refroidissement ;
- Composition ;
- Brassage ;
- Vitesse de coulée.

Ces études ont montré que ces paramètres pouvaient modifier : la thermique, sur les structures de la solidification et les micro/macroségrégation. Dans cette partie, nous allons présenter quelques études afin d'essayer de relever les grandes tendances associées à ces différents paramètres.

Chu et Jacoby [Ch,90] ont réalisé une étude expérimentale sur la caractérisation de la microstructure et de la macroségrégation sur un lingot d'aluminium d'alliage Al-Zn-Mg-Cu, leur étude consiste en une comparaison entre deux lingots coulés par deux méthodes différentes :

- La première consiste à transférer le métal liquide directement vers le moule, c'est-à-dire remplir la lingotière directement depuis le four (figure II-16a) ;
- La deuxième méthode appelée (bi-level transfer method) : méthode de transfert à deux niveaux qui consiste à faire passer le métal liquide dans une réserve de métal avant d'arriver dans le moule, c'est-à-dire remplir la lingotière indirectement depuis le four par une réserve limitant la convection, figure II-16 b.

A ces deux modes de coulée, il doit correspondre un champ de vitesse du liquide très différent. Nous rappelons que l'alliage utilisé est de la série 7xxx, il s'agit d'un alliage Al-Zn-Cu. Le format des plaques coulées est rectangulaire de dimension 127cm x 40,6cm.

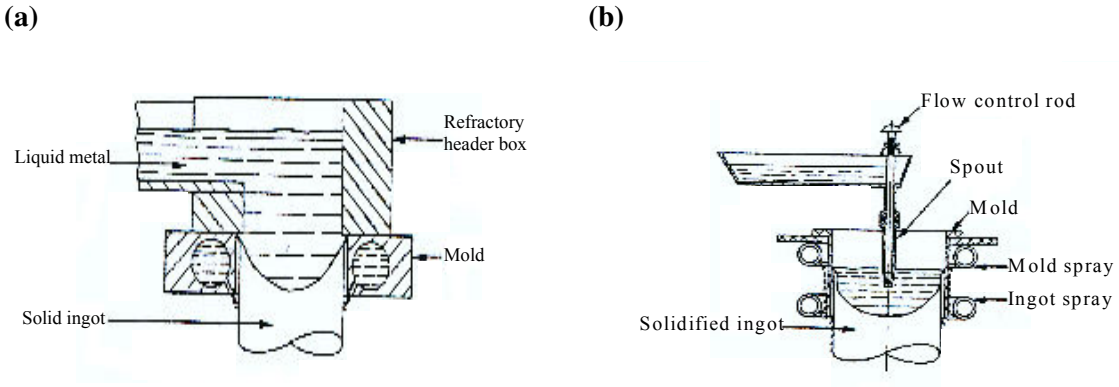


Figure II-16 : schéma des deux méthodes de coulées
(a) méthode à un seul niveau, **(b)** méthode à deux niveaux.

La figure II-17 (a) représente l'évolution de la taille des grains en fonction de la distance à partir de la surface du lingot en utilisant la première méthode de coulée. D'après la figure II-17, on observe que la taille des grains croît lorsqu'on s'éloigne de la surface à l'exception de la région adjacente à la surface dans laquelle la taille des grains décroît légèrement.

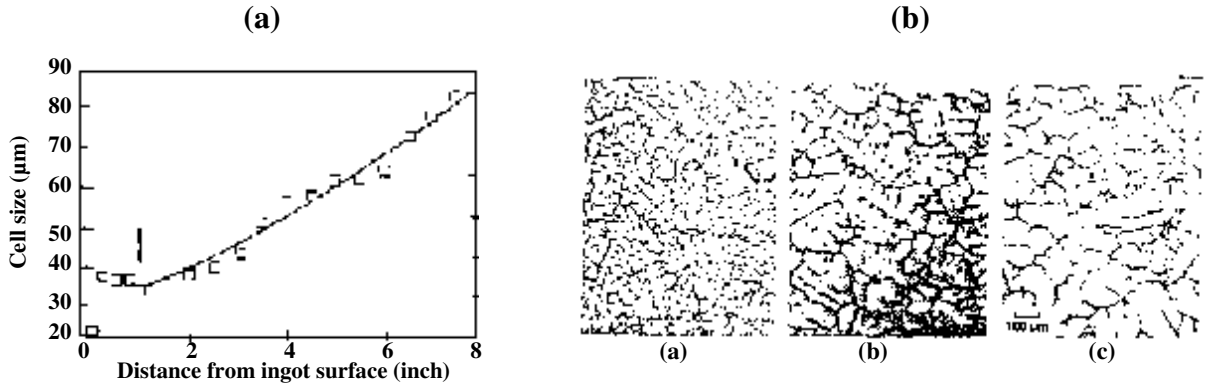


Figure II-17 : a) la taille des grains en fonction de la distance à partir de la surface du lingot en utilisant la 1ière méthode ; **b)** la microstructure pour trois position suivant la largeur L/16, 5L/16 et L/2.

La figure II-17 (b) présente la microstructure à trois positions repérées par L/16, 5L/16 et L/2 où L est la largeur du lingot final c'est à dire L/2 représente le centre du lingot. Deux types de grains sont rencontrés. Des grains globulaires de taille importante de l'ordre de 80µm vers le centre, et des grains composés de fines dendrites avec une taille moyenne de 40µm vers la peau.

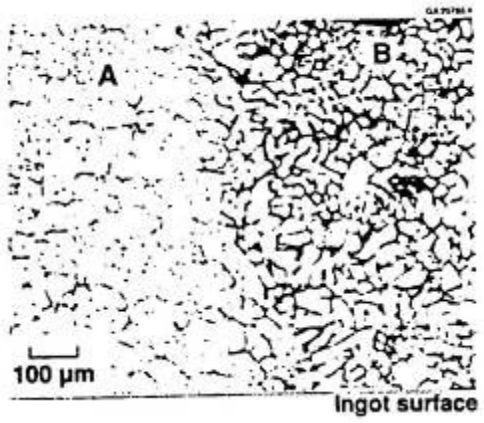


Figure II-18 : la microstructure observée dans la région adjacente à la surface du lingot.

La figure II-18 présente la microstructure dans la région adjacente à la surface du lingot coulée par la méthode « bi-level ». D'après cette figure nous observons que la région adjacente à la surface du lingot (zone B) est fortement enrichie en soluté, du fait de la forte proportion de phases secondaires. La microstructure dans cette région est composée de deux morphologies distinctes. La première est une structure équiaxe dendritique (désignée par région A sur la figure II-18). La deuxième structure est de type fin et dendritique entourée par une forte fraction d'eutectique (désignée par région B dans la figure II-18).

Dorward et Berntson [Dor, 90] ont déterminé les effets de la surchauffe, de la vitesse de coulée, et de l'intensité de refroidissement sur la macroségrégation et sur la microstructure pour la production de billettes d'alliage 2024 et de diamètre 40cm.
D'après cette étude les auteurs ont observé :

- Qu'une augmentation de la vitesse de coulée augmente la profondeur du puit liquide;
- Dans le cas d'un refroidissement avec un fort débit d'eau de refroidissement, une faible température de coulée conduit à un puit liquide isotherme en réduisant

légèrement sa profondeur, ce qui conduit à une croissance de dendrites primaires. La surchauffe influence peu la vitesse de solidification ;

La figure II-19 présente la microstructure obtenue au centre du lingot final pour deux cas de coulée, le premier en prenant la vitesse de coulée égale à 6.35cm/min et le deuxième en prenant la vitesse de coulée égale à 3.8cm/min. D'après cette figure, on observe que lorsque la vitesse du produit est élevée le lingot présente en son centre une structure duplex composée de grains globulaires et de grains dendritiques. Ainsi, lorsque la vitesse de coulée augmente, la microstructure au centre des billettes devient non uniforme.

a) **b)**

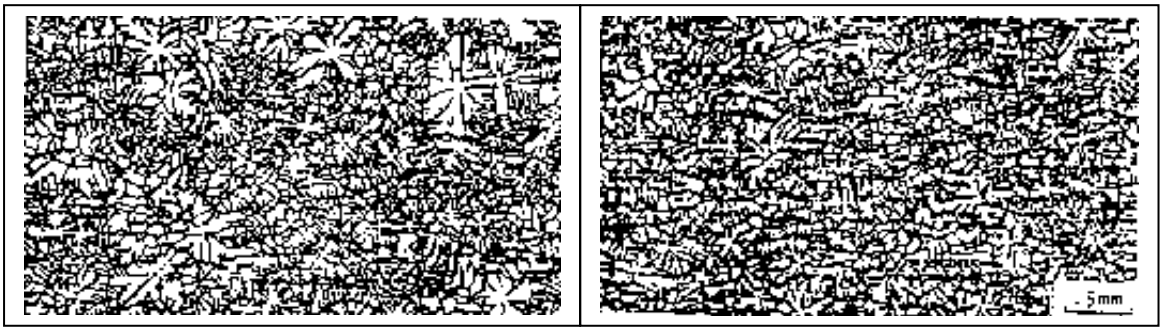


Figure II-19 : la microstructure obtenue au centre du lingot finale pour deux cas de coulée avec une vitesse de coulée égale : a) 6,35cm/min ; b) 3,5cm/min.

L'addition d'inoculants influence la microstructure des grains ainsi que la macroségrégation. Afin de déterminer ces influences, A.Joly et al. [Jol, 99] ont réalisé une étude expérimentale qui consistait à produire un lingot d'alliage 5182 dont la composition est présentée dans le tableau suivant :

Alliage	Mg	Mn	Fe	Si	Al
AA5182	4-4.5	0.35	0.25	0.1	Bal.

Tableau II-1 : composition de l'alliage en (wt%)

Les paramètres de coulée sont les suivants :

- Dimension : 1850x550mm² ;
- Vitesse de coulée : 60mm.min^{-1} ;

- L'inoculant : AlTi3%B1% (1kg/ton) ;
- Température de coulée : 705°C ;

Afin que l'on puisse étudier l'influence de l'inoculation, la première moitié du lingot a été coulée en ajoutant l'inoculant (1 kg/ton).

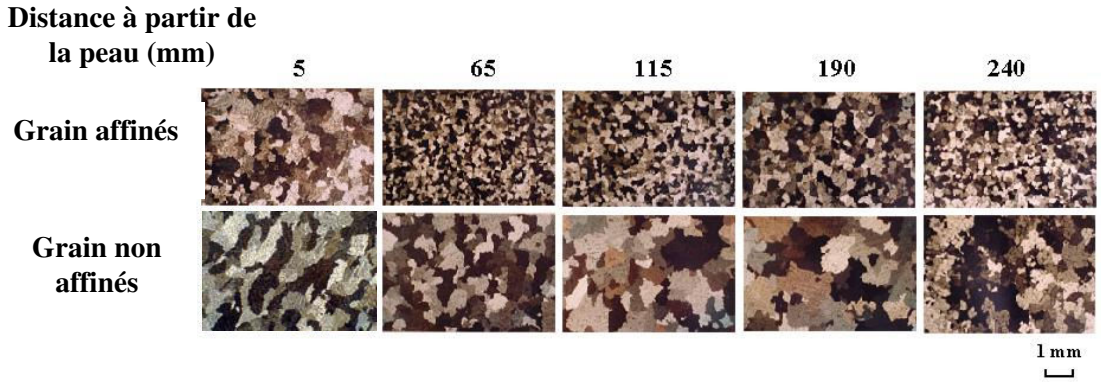


Figure II-20 : La microstructure pour les grains affinés et non affinés du lingot AA5182.

La figure II-20 représente l'évolution de la structure des grains dans les deux parties (partie avec et sans inoculation). Pour la partie affinée, on observe que la morphologie des grains évolue à partir de la peau vers le centre comme suit : une large structure dendritique, suivis de petits grains globulaires à dendritique suivis des petits grains globulaires, pour ce cas les mesures de DAS ne sont pas possibles. Pour la partie non affinée, on observe que la structure dendritique est plus prononcée, la zone colonnaire n'apparaît pas, et l'évolution de la taille des grains de la peau vers le centre consiste en une diminution suivie par une augmentation de cette dernière en formant des grains grossiers, suivis par une structure mixte qui apparaît au centre du lingot constitué de gros et de très petits grains. Les grains sont équiaxes grossiers. D'après les auteurs, on déduit que l'ajout de l'affinant transforme la structure équiaxe grossière à une structure équiaxe fine.

Afin d'étudier les résultats observés dans les lingots coulés en semi-continue, plusieurs modèles micro/macro ont été traités par différents auteurs en les appliquant sur la coulée semi-continue.

II–7. Application des modèles micro – macro à la coulée semi-continue :

Reddy et Beckermann [Red, 95] ont développé un modèle qui inclut la prise en compte du mouvement des grains équiaxes, afin de prédire la macroségrégation et la taille des grains. Deux cas de calculs ont été envisagés :

- Lorsque le mouvement des grains est pris en compte ;
- Lorsque les grains sont considérés stationnaires.

Les résultats du modèle ont été comparés avec les résultats expérimentaux de Finn et al [Fin,91].

- Le modèle utilisé est une version modifié d'un modèle à deux phases développé précédemment par Ni et Beckermann [Ni, 91].

Les résultats présentés contiennent une comparaison entre deux simulations :

- Avec transport du grain ;
- Sans transport du grain : dans ce cas la vitesse du solide est imposée égale à la vitesse de coulée.

La morphologie des grains est supposée globulaire, les grains sont en fait assimilés à des sphères. Il a été mis en œuvre afin de simuler la coulée semi-continue de deux billettes d'alliage Al-4,5Cu. Dans les deux cas, les conditions aux limites sont décrites sur la figure II-21.

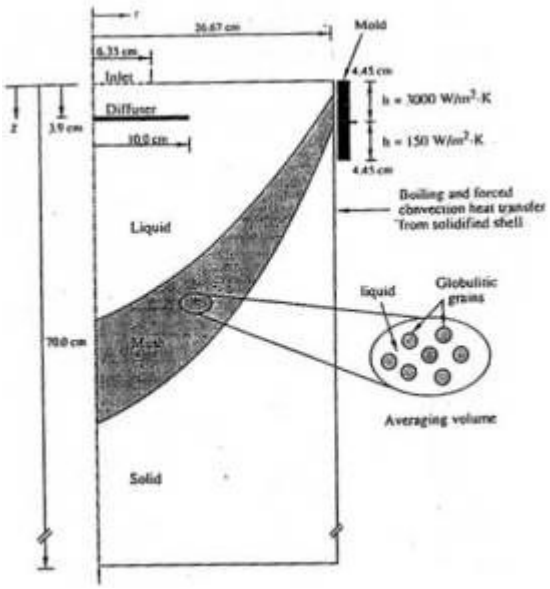
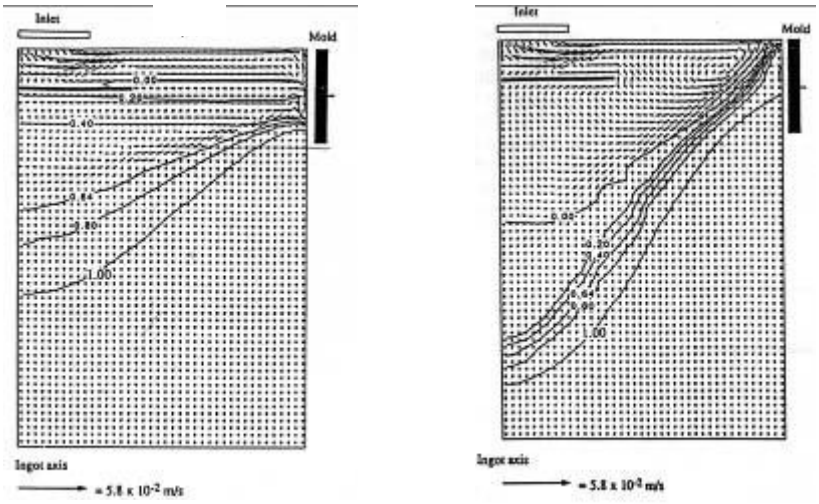


Figure II-21 : Illustration schématique de la coulée semi-continue employée dans l'expérience de Finn et al. [Fin, 92] et simulé par cette étude [Beck, 95].

Dans cette étude, il était supposé que les grains germent tous localement dès que la température de liquidus est atteinte si les grains se déplacent à la vitesse du produit. La densité de grains N_0 alors formés est uniforme. N_0 a été choisie afin que la taille moyenne des grains soit égale à 55μm qui correspond à la valeur moyenne mesurée dans l'expérience de Fin et al. [Fin,91]



(a) Avec mouvement de grain **(b) Sans mouvement de grain**

Figure II-22 : profiles de champs de vitesse et iso fractions solides pour les deux simulations : a) avec mouvement de grain, b) sans mouvement de grain.

Les figures II-22 a) et b) présentent le champ de vitesse dans la partie supérieure du domaine d'étude superposée à des iso-fractions solides, pour les deux simulations avec et sans mouvement des grains. D'après ces figures on observe :

- L'existence d'un mélange solide/liquide dans la région entière en dessous du diffuseur, avec une fraction solide qui augmente graduellement en se dirigeant vers le fond, lorsque le mouvement des grains est pris en compte ;
- Lorsque les grains sont stationnaires, la zone pâteuse est plus étroite, et le champ de vitesse de la phase liquide est différent du cas précédent. Prés du l'axe du lingot, on peut observer une région relativement grande de fraction solide en dessous de 0,2. le puits liquide est également plus profond dans ce cas.

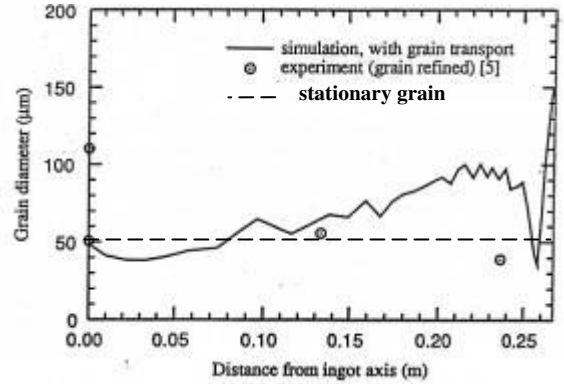


Figure II-23 : variation de la taille des grains pour les cas étudiés.

La figure II-23 représente la variation de la taille des grains prédite pour les deux cas étudiés, comparés avec les résultats expérimentaux obtenus avec Finn et al. Pour le modèle où le solide est uniquement advecté, la taille de grains est uniforme en fonction de la distance au centre du produit. Ce résultat traduit bien le fait que le modèle ne prend pas en compte une distribution de taille de germe et donc ne peut pas traiter une compétition germination-croissance. Lorsque le mouvement des grains est pris en compte, une variation de la taille de grain non monotone est obtenue. Les tailles de grain les plus faibles sont observées dans la région centrale. Le modèle ne permet cependant pas de rendre compte de la présence de structures duplex au centre du produit puisqu'il ne considère localement qu'une taille moyenne de grains.

A.Hakonson et D.Mortensen [Hak, 95] ont développé un modèle en 3D pour le calcul de la température et de l'écoulement du liquide pour une coulée semi-continue en prenant en comptant, la convection naturelle et la turbulence. Ils utilisent alors le champ de température de leur solution pour calculer une distance entre bras secondaire de dendrites (DAS) à partir d'un temps local de solidification (tps). Leur loi est de la forme :

$$DAS = \alpha t_{ls}^{n} \qquad \textbf{(II-40)}$$

Cette loi est une loi de maturation des bras secondaires de dendrites. Les résultats obtenus pour la température et le DAS ont été comparés avec des valeurs mesurées.

Cas de comparaison :

L'alliage utilisé dans cette étude est du type AA5005 (tableau-2) :

Eléments	Mg	Fe	Si	Mn
[wt%]	0.77	0.40	0.10	0.02

Tableau II-2 : composition d'alliage AA5005.

Cet alliage a été utilisé afin de produire des plaques de dimension 1.650 x 0.600m², coulés à une vitesse de 0.0011m/s.

La figure II-25 montre la variation du DAS en fonction de différentes positions le long de la largeur et de l'épaisseur du lingot.

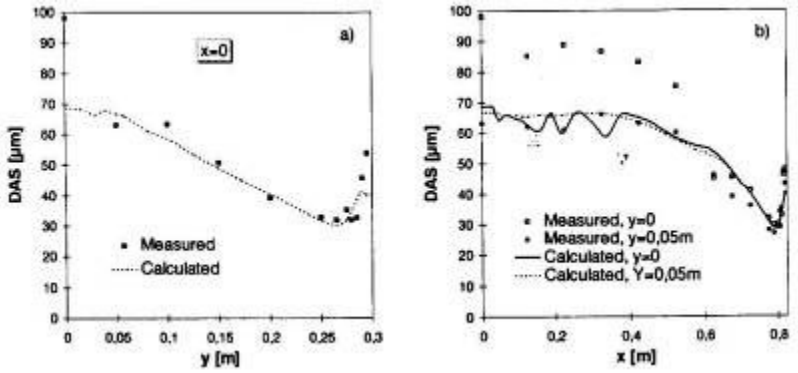


Figure II-25 : variations du DAS en fonction de différentes positions le long de la largeur et de l'épaisseur.

On observe un bon accord entre les résultats mesurés et les résultats calculés, à l'exception du centre du lingot (y= 0), le DAS mesurée augmente alors soudainement. Ce phénomène peut être expliqué par le mouvement des cristaux dans la direction du fond du puits liquide. Ce modèle ne prend pas en compte le mouvement des grains ce qui peut être la raison de l'augmentation du DAS au centre du lingot.

Dans une autre étude, Hankson et al. [Hak, 99] ont développé un modèle de germination-croissance. Les auteurs ont étudié :

- Deux modes de croissances des pointes de dendrite : hémisphérique en considérant que la dendrite est cylindrique et que sa pointe est hémisphérique, et parabolique en considérant que la point de dendrite a une forme parabolique.

- La distribution des tailles ;
- La comparaison entre les résultats de leur modèle, DAS mesuré et la taille de grains en variant l'ajout de l'inoculant.

Description du modèle :

Plusieurs lingots ont été coulés à une vitesse de 130mm/min, à différents niveaux de l'affinage (avec l'ajout de Al-3Ti-1B) et différentes compositions de titane (Al-6Ti). La dimension du lingot est de 300 x 900 mm². Le tableau II-3 présente les paramètres et les compositions chimiques expérimentales des coulées.

Essais	B[wt%]	Ti[wt%]	Ti[wt%]	Fe[wt%]	Si[wt%]
A	0.0007	0.0154	0.0133	0.49	0.16
B	0.0014	0.0182	0.0138	0.49	0.16
C	0.0025	0.0276	0.0188	0.49	0.16
D	<0.0001	0.0091	0.0081	0.53	0.15
E	0.0003	0.0156	0.0146	0.52	0.15

TableauII-3 : paramètres et compositions chimiques expérimentals de la coulé.

Dans ce modèle, le chemin de solidification utilisé est celui de Scheil/Gulliver. Les grains sont considérés sphériques avec une fraction solide interne de 0,9 et la variation de la fraction solide interne en fonction du pas de temps est calculée suivant la relation suivante :

$$\Delta f_s = N \times 4\pi \times R_g^2 \times V \times f_{Int} \times \Delta t \qquad \textbf{(II-41)}$$

Avec :

- N : la densité de grains ;
- R_g : la taille moyenne de grains ;
- V : la vitesse de croissance ;
- f_{int} : la fraction solide interne ;
- Δt : le pas de temps.

La vitesse de croissance de l'enveloppe est donnée par la vitesse de croissance de la pointe de dendrite pour chaque équilibre. Trois lois de germinations ont été étudiées :

- Une loi classique : qui est une relation exponentielle entre la densité des grains et la surfusion :

$$\dot{N} = K_1 C_B \exp\left[-\frac{K_2}{T \times \Delta T^2}\right] \qquad \textbf{(II-42)}$$

Tel que :

- K_1 , K_2 sont des constantes égales respectivement à 3.10^{15} [s.m^3.w%]$^{-1}$ et 500 [K^3];
- C_B : la concentration en bore [wt%].

La quantité des grains affinés est indiquée dans la constante représentant la concentration en bore.

- Une loi de puissance : qui est une fonction de puissance qui relie la densité de grains et la surfusion :

$$\dot{N} = P_1 \times C_B \times \Delta T^n \qquad \textbf{(II-43)}$$

Tel que :

- P_1 et n sont des constantes égales respectivement à 3,2 10^{14} [s.m^3.w%]$^{-1}$ et 3,5;

- Une loi Gaussienne : qui est une relation entre la densité de grains finale et la surfusion :

$$\frac{dN}{d(\Delta T)} = G_1 \times C_B \times \exp\left[-\frac{(\Delta T_{UC} - G_2)^2}{2G_3^2}\right] \qquad \textbf{(II-60)}$$

Avec :

- $G_1 = 8{,}1.10^{16}$ [s.m^3.w%]$^{-1}$;
- $G_2 = 5$ [K] ;
- $G_1 = 1{,}6$ [K] ;

Cette loi est différente des deux dernières car elle relie la densité de germes finale à la surfusion au lieu de relier le taux de germination à celle ci.

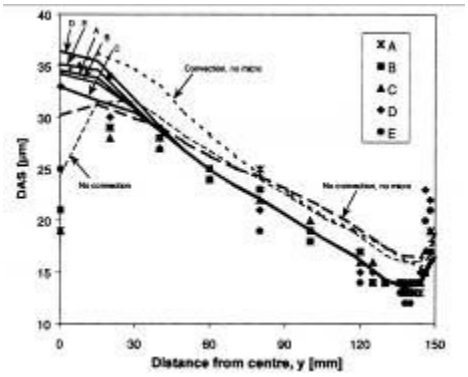


Figure II-26 : L'évolution du DAS calculé et mesuré en fonction de la distance à partir du centre du lingot.

La figure II-26 présente les valeurs de DAS mesurées avec les valeurs calculées :

$$DAS = 9 \times t_{ls}^{1/3} \ (\mu m) \qquad \textbf{(II-44)}$$

Ces valeurs ont été utilisées afin de vérifier les champs thermiques comme ils reflètent le temps de solidification.

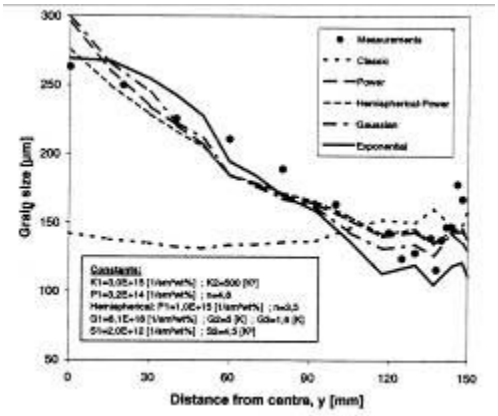


Figure II-27 : l'évolution de la taille des grains en fonction de la distance du centre du lingot.

La figure II-27 représente l'évolution de la taille de grains en fonction de la distance au centre du lingot. On observe un bon accord entre les prédictions obtenues avec les différentes lois de germination à l'exception de la loi classique, et les résultats expérimentaux.

La modélisation de la taille de grains est très sensible aux choix de la loi de germination (la loi classique et la Gaussienne donnent des résultats proches des résultats obtenus

expérimentalement). Contrairement à la croissance hémisphérique, la croissance parabolique influence le calcul de la taille de grains, par contre, la même taille moyenne de grains reste possible en accordant la loi de germination.

II–8. Relation entre les microstructures et la macroségrégation en coulée semi-continue :

Les ségrégations peuvent être classées suivant deux dénominations micro et macroségrégation :

- On entend par microségrégation les différences locales de concentration telles que celles que l'on peut trouver dans les dendrites et les grains ;
- Les macroségrégations correspondent aux variations globales de composition entre le centre et la périphérie d'un lingot.

Avant de présenter quelques observations concernant la macroségrégation dans la coulée semi-continue d'aluminium, nous allons présenter les deux modèles les plus simples (scheil et bras de levier) de microségrégation.

II–8.1. La microségrégation (Scheil, bras de levier) :

Lors de la solidification, la phase liquide se transforme en une ou plusieurs nouvelles phases solides. La composition de cette phase formée n'est généralement pas la même que celle du liquide. Si l'on considère la solidification d'un petit élément de volume fermé rempli de métal liquide, le solide qui se forme ne peut contenir en solution qu'une partie des éléments d'alliage présents dans le liquide qui lui a donné naissance. Le surplus est rejeté dans le liquide restant ou dans le solide déjà formé en enrichissant ce dernier. Par conséquent, la phase liquide se retrouve avec une concentration plus élevée que la concentration nominale de l'alliage coulé. D'autre part, la concentration nominale est supposée constante (ne change pas), et le volume considéré est fermé, ce qui implique qu'aucune quantité de matière n'a pu sortir.

Si on considère un système (à une dimension et de longueur L) en cours de solidification, la modélisation de la microségrégation d'un soluté passe par l'écriture de la conservation de la masse pour ce soluté. L'interface en cours de solidification se trouve à chaque instant à l'équilibre thermodynamique. Le transport solutal dans le liquide est infiniment rapide (homogénéité chimique parfaite).

Suivant la prise en compte ou pas de la diffusion chimique dans le solide, le bilan de matière à l'interface solide/liquide s'écrit différemment. Dans cette partie nous allons présenter différents modèles qui ont été développés en considérant généralement des systèmes binaires fortement dilués. Leur application à des alliages multiconstitué se fait sans émettre d'hypothèses supplémentaires.

II–8.1.1. Modèle de bras de levier :

Le modèle de bras de levier présente le cas le plus simple, pour lequel les phases liquide et solide sont en équilibre thermodynamique complet.

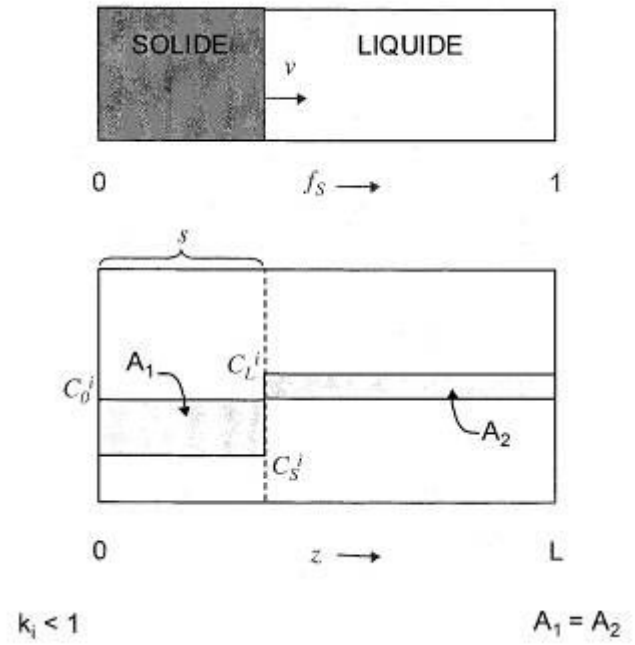


Figure II-28 : profil de concentration en cours de solidification dans les conditions d'équilibre, modèle du bras de levier.

L'équation de conservation du soluté i au niveau du système (figure II-28) s'écrit à chaque instant :

$$f_s\, w^s + (1 - f_s) w^l = w^0 \qquad \textbf{(II-45)}$$

L'équilibre thermodynamique des phases solide et liquide impose par ailleurs :

$$T = T_m + mw^l \qquad \textbf{(II-46)}$$

$$w^s = kw^l \qquad \textbf{(II-47)}$$

Soit pour k constant, cette équation (II-45) se réduit à :

$$w^s = \frac{k\, w^0}{1 - f_s(1-k)} \qquad \textbf{(II-48)}$$

Le modèle du bras de levier sert généralement à représenter la redistribution de solutés pour les éléments de type interstitiel. En effet, pour de tels éléments, les coefficients de diffusion dans la phase solide sont élevés. Dans le cas d'éléments de soluté de type substitutionnel, la diffusion limitée à l'état solide nécessite de nouvelles hypothèses et conduit à l'établissement de profils de concentration différents.

II–8.1.2. Modèle de Gulliver-Scheil :

Contrairement au modèle précédent (bras de levier), le modèle de Gulliver-Scheil suppose un D_S^i égal à zéro, ce qui signifie une absence totale de diffusion à l'état solide. La figure II-29 présente schématiquement le profil de concentration s'établissant dans le système en cours de solidification dans le cas particulier où k<1. Ainsi l'équation de conservation du soluté à l'interface solide/liquide à chaque instant s'écrit :

$$\left(w^l - w^s\right)df_s = \left(1 - f_s\right)dw^l \qquad \textbf{(II-49)}$$

Les équations (II-48) et (II-49) traduisent l'équilibre thermodynamique ne sont plus valables qu'à l'interface liquide/solide.

Pour un k constant, on obtient :

$$(1-k)\frac{df_s}{1-f_s} = \frac{dw^s}{w^s} \qquad \textbf{(II-50)}$$

En intégrant cette équation, on obtient :

$$w^s = \frac{k\, w^0}{\left(1 - f_s\right)^{1-k}} \qquad \textbf{(II-51)}$$

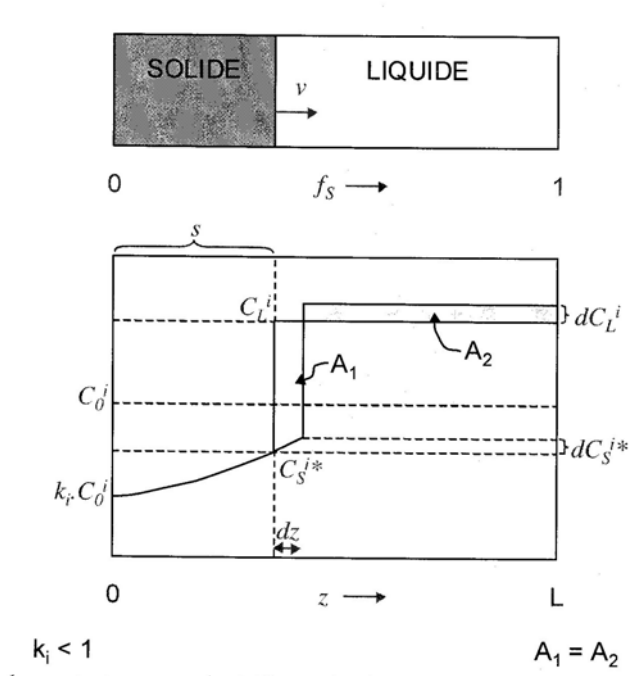


Figure II-29 : profil de concentration en cours de solidification dans les conditions d'équilibre, modèle de Gulliver-Scheil.

II-8.2. Observation en coulée semi-continue :

Dans cette partie nous allons présenter différentes études qui ont été éffectuées pour analyser les mécanismes responsables des macroségragtions. Tout comme pour la structure de grains, les macroségrégations peuvent être réduites en optimisant les conditions de coulée. Ces conditions peuvent être résumées comme suit :

- L'histoire thermique (refroidissement, vitesse de coulée, surchauffe);
- La composition chimique ;
- L'inoculation ;

Dorward et al. [Dor, 90] ont réalisé une étude expérimentale afin de déterminer les effets des différentes techniques de coulée en changeant les différents paramètres qui la contrôlent :

- Une faible vitesse de coulée diminue la macroségrégation centrale négative ;
- Une faible surchauffe conduit à une augmentation de la macroségrégation du fait que la profondeur du puits liquide diminue avec la surchauffe, favorise la formation de grains équiaxes mobiles (isothermes) pauvres en solutés responsable de la macroségrégation centrale négative ;
- Un faible débit d'eau de refroidissement conduit à une augmentation de la macroségrégation.

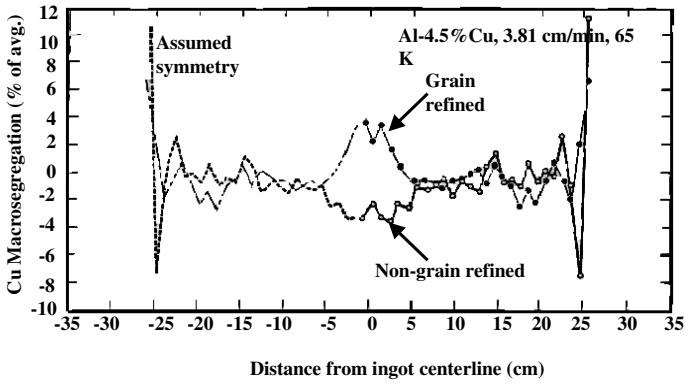
Finn, Chu et Benon [Finn, 92] ont étudié l'effet de l'affinage sur la macroségrégation pour une billette d'alliage binaire Al-Cu coulée avec et sans affinant. Les conditions de coulées sont reportées ci-dessous :

- Diamètre 53,34 cm ;
- Vitesse de coulée 3.81 cm/min ;
- Alliage est Al-4.5%Cu, grains affinés avec Al-5%Ti-0.2%B.

D'après leur étude, dans le cas affiné, les auteurs ont observé que la surface du lingot est riche en élément d'alliage, dû à la ségrégation inverse. Au centre du lingot, une ségrégation positive a été observée ce qui contredit les résultats de Droward et al. [Dor, 90].

Pour le cas non affiné les auteurs ont trouvé que :

- La surface du lingot est enrichie en élément d'alliage due à la ségrégation inverse ;
- Une ségrégation négative au centre du lingot a été observée.



FigureII-30 : les effets des grains affinés sur la macroségrégation.

Les résultats obtenus peuvent être dus à l'effet de la morphologie, des grains qui influencent fortement la perméabilité de la zone pâteuse.

Reddy et Beckermann [Red, 95] ont étudié l'effet de la convection thermosolutal, et de l'écoulement induit par le retrait sur la macroségrégation et sur la structure du lingot final. Cette étude a été réalisée pour une coulée semi-continue de billette pour un alliage Al-4,5%Cu. Le modèle utilisé dans la simulation est une version simplifiée du modèle de diphasique développé par Ni et Beckerman [Ni, 1991,1993], les grains sont supposés pleins et sphériques.

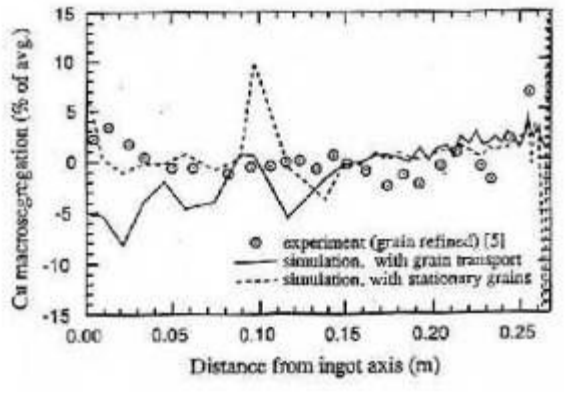


Figure II-31 : profils de la macroségrégation dans le lingot final.

La figure II-31 présente les profils de la macroségrégation dans le lingot final, pour les deux cas. D'après la figure II-31, on observe :

- Une ségrégation inverse dans le cas où les grains sont stationnaires ;
- L'absence de ségrégation inverse lorsque les grains ne sont pas stationnaires ;
- Une ségrégation négative au centre du lingot lorsque le mouvement des grains est pris en compte, dû au transport du soluté. Ce résultat est en bonne cohérence avec les résultats de Yu et Granger [Yu, 84], et Chu et Jacoby [Chu,90].
- Une ségrégation positive au centre du lingot lorsque les grains sont considérés stationnaires. Ce résultat est en bon accord avec celui de Finn et al [Finn, 92].

Reddy et Beckerman ont étudié l'effet du mouvement des grains, ils ont développé un modèle à deux phases qui décrit le transfert thermique, la distribution du soluté, la convection et le mouvement du grain sur une échelle microscopique. Ils ont conclu que le

mouvement des grains empêche la formation de la ségrégation inverse et conduit à une ségrégation négative au centre du lingot.

En 1997, les auteurs ont modifié ce modèle afin de simuler numériquement la macroségrégation pour une coulée semi-continue d'un alliage Al-4,5wt%. Trois simulations numériques (trois cas) ont été traitées afin d'étudier les effets de la perméabilité de la zone pâteuse, la convection thermo-solutal, et la contraction due à la solidification sur la macroségrégation :

1. Le premier cas relie inversement la densité des grains (considérée égale à $1{,}8.10^{11}$ (m^{-3})) à la taille de grain. Dans ce cas, les auteurs ont prédit une ségrégation positive au centre du lingot dû au flux induit par la convection thermo-solutale, transportant le liquide riche en soluté vers le centre du lingot. En comparaison avec les résultats de Finn et al. il était trouvé que les variations de la macroségrégation prédite par le modèle sont moins élevées que celle obtenues expérimentalement :

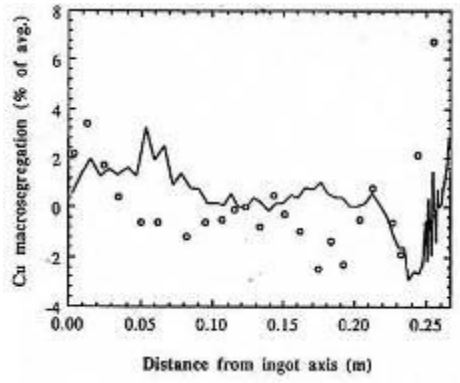


Figure II-32 : profils de macroségrégation dans le lingot final obtenus pour le premier cas.

2. Le deuxième cas, les auteurs ont converti la densité des grains (égale à 5.10^{12} (m^{-3})) en espacement, qui est proche du DAS moyen dans l'expérience de Finn et al pour les grains non affinés :

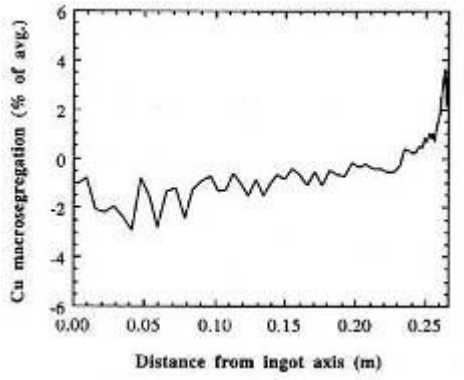


Figure II-33 : profiles de la macroségrégation dans le lingot final obtenus pour le deuxième cas.

Dans ce cas, la même ségrégation inverse obtenue dans le premier cas a été observés. En revanche le profil de la concentration décroît continuellement vers le centre, ce qui conduit à une ségrégation négative au centre. Ceci est dû aux deux flux opposés dans la zone pâteuse associée à la contraction et au retrait de solidification qui conduit à un flux transportant le liquide riche en soluté loin du centre du lingot vers la surface.

3. Le troisième cas, le retrait a été négligée, Les densités du solide sont égales à la densité liquide nominale (égale à 5.10^{12} (m^{-3})). Dans ce cas, en négligeant les effets de l'écoulement du à la contraction du lingot, la ségrégation inverse est absente. Le profil de concentration est non uniforme à cause d'une faible convection thermosolutale due à l'imperméabilité de la zone pâteuse :

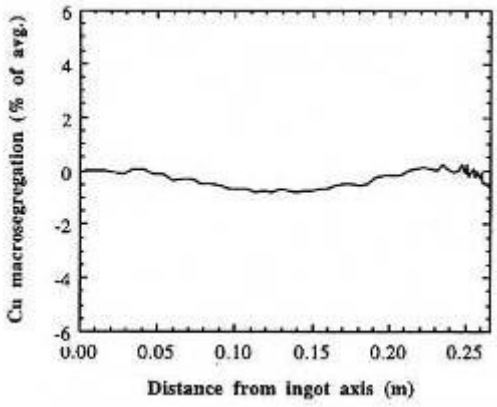


Figure II-34 : profiles de la macroségrégation dans le lingot final obtenus pour le troisième cas.

En général, les résultats présentés indiquent que la ségrégation au centre du lingot peut être positive ou négative, dépendant de la densité de grains et de la perméabilité de la zone pâteuse. La prise en compte de l'écoulement dû à la contraction n'influence pas la ségrégation inverse seulement, mais influence aussi la macroségrégation au centre du lingot. Finalement, les résultats prédisent par le modèle de macroségrégation et les résultats expérimentaux sont en bon accord.

L'addition des inoculants influence la microstructure des grains ainsi que la macroségrégation. Dans notre étude précédente, nous avons vu que A.Joly et al. ont réalisé une étude expérimentale afin de déterminer ces influences. Nous rappelons que leur étude consiste à produire un lingot d'alliage 5182 coulé en deux parties, la première affinée et la deuxième non affinée.

La figure II-35 représente les cartes de macroségrégation obtenues pour les deux parties (grain affiné et grain non affiné) du lingot. D'après les deux cartes on observe une ségrégation négative au centre du lingot plus marquée dans la partie avec grains affinés.

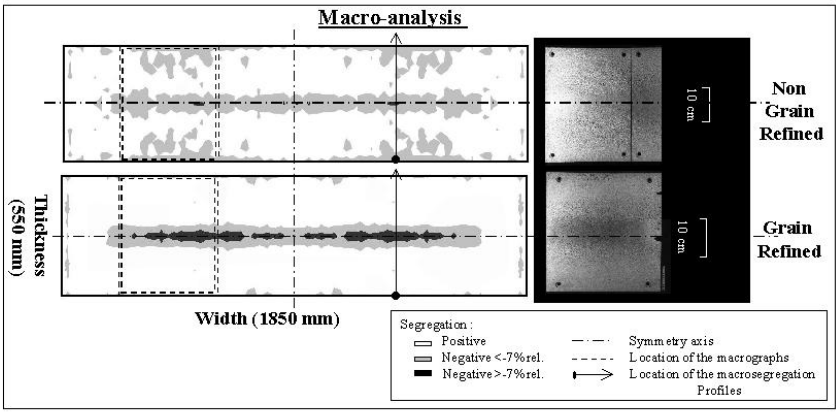


Figure II-35 : carte de ségrégation pour les deux cas°: grains affinés et non affinés.

La figure II-36 présente les profils de macroségrégation pour le magnésium le long de l'épaisseur au quart de la largeur. La déviation de l'élément d'alliage est d'environ 14% pour la partie affinée et 9% pour la partie non-affinée.

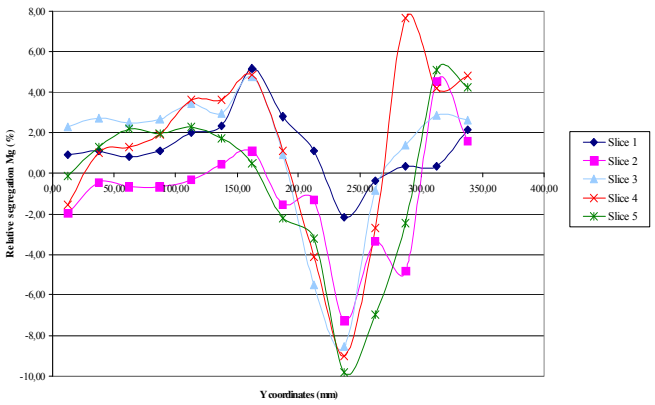


Figure II-36 : profils de ségrégation relative à Mg(%) suivant l'épaisseur (de la peau vers le centre, en mm).

II–9. Conclusion et objectifs de thèse :

La prédiction des structures de solidification est d'un grand intérêt pour le fabriquant d'aluminium. En effet, les propriétés mécaniques des alliages d'aluminium sont fortement dépendantes de ces paramètres. Dans le cas du processus de coulée semi-continue de l'aluminium, des phénomènes qui se produisent à différentes échelles influencent la formation des macro et micro structures :

- La germination ;
- La fragmentation des branches de dendrites ;
- La croissance de grains à l'échelle microscopique ;
- Le mouvement des grains et leur histoire thermique à l'échelle macroscopique.

D'après notre étude bibliographique, nous avons vu que Rappaz et al. [Rap, 87] ont proposé une approche originale de l'évolution d'une population de grains équiaxes permettant de rendre compte d'une compétition entre la germination et la croissance. Wang et al. [Wan,93] ont également développé un modèle de solidification applicable aux structures

colonnaires et équiaxes dans un système multiphasé. Ils ont utilisé les équations de conservation du soluté considéré par Rappaz et al. [Rap, 87] en améliorant leur modèle et en tenant compte de la diffusion du soluté dans le solide et de la morphologie non sphérique du grain. Aucune de ces études n'a traité à la fois l'effet de la convection et la nature multiconstituée des alliages industriels. Appolaire [App, 00] s'est basé sur les deux modèles afin de simuler l'évolution morphologique d'un cristal en tenant compte de son mouvement. Comme on a vu, le modèle d'Appolaire respecte bien l'alliance entre la réalité des produits industriels, la formation de la zone équiaxe dans les gros lingots d'acier et les prédictions des différentes morphologies observées (dendritique et compacte). Dans ce processus, les transferts de masse et de chaleur sont complexes, à cause de la nature turbulente de l'écoulement induit par convection naturelle et forcée, d'ailleurs une description convenable nécessite un modèle 3D. Cette complexité a limité la possibilité de développer un modèle qui permet de lier les modèles microscopiques de la croissance des grains avec un modèle macroscopique [Hak, 99], [Red, 95].

Dans le cadre du projet Vircast, nous avons développé un modèle de croissance et de mouvement de groupe de grains en se basant sur le modèle de croissance d'Appolaire [App, 00]. Le modèle a été simplifié mais en respectant le couplage entre les échelles micro et macro. Le mouvement et la croissance des grains sont calculés en utilisant les données d'entrées de l'extraction de la chaleur locale et des champs de vitesse calculée à partir de l'équation en 3D de chaleur, de conservation de la masse et la quantité de mouvement en coulée semi-continue. A l'échelle de la coulée nous avons choisis une description lagrangienne du mouvement des particules. La seconde loi de newton est appliquée au centre de la masse des particules où les forces exercées sont la gravité, la traînée entre les grains et le liquide. Les schémas d'intégration comme celui d'Euler, Runge-Kutta d'ordre 2 et 4, sont utilisés pour intégrer la loi de Newton, dépendant de la valeur de pas de temps.

Ce modèle prédit la distribution de la taille de grain, l'espacement des branches de dendrite secondaire et la morphologie au plan de sortie de la coulée. A la fois le phénomène de l'inoculation et de la fragmentation sont pris en compte :

- Par une loi de germination dans le volume de la particule, décrivant la germination hétérogène ;
- Par un flux régulier à travers la surface de la particule qui décrit la contribution de la fragmentation dans la structure dendritique de la zone pâteuse.

A partir de l'étude de trajectoire des grains, il est possible de prédire l'analyse de l'écoulement dans le processus et d'avoir une meilleure vue de l'histoire des grains durant

leur formation. Afin de tester le modèle nous l'avons appliqué à un réel processus de coulée semi-continue 3D.

Dans les chapitres qui suivent, nous allons présenter une description du modèle de croissance, le modèle mouvement et le couplage entre les deux. Nous allons aussi présenter les résultats obtenus avec la comparaison aux précédents travaux présentés dans cette étude bibliographique.

Chapitre III : MODELE DE GERMINATION/CROISSANCE DE GROUPE DE GRAINS EQUIAXES :

III.1. Introduction :

D'après Dustin [Dus, 86], les différentes étapes de la solidification, si on considère un petit élément de volume de température uniforme en train de se refroidir, sont :

1. Refroidissement du liquide au dessous de la température du liquidus ;
2. Germination ;
3. Croissance sphérique ;
4. Croissance dendritique ;
5. Solidification du liquide interdendritique, avec maturation et grossissement des dendrites ;
6. Solidification eutectique éventuelle, selon la composition de l'alliage, du dernier liquide interdendritique ;
7. Refroidissement du solide.

Nous rappelons que la germination est un phénomène très important en solidification équiaxe, puisqu'elle influence directement la microstructure finale des lingots, notamment la taille des grains. Le but de ce chapitre est de présenter un modèle de croissance de grains équiaxes en tenant compte des différentes étapes de solidification et en utilisant une loi de germination. Pour cela, nous allons rappeler le modèle de croissance d'un grain développé par B.Appolaire [App, 00], puis présenter l'extension de ce modèle pour prendre en compte la germination et la croissance d'une famille de germes. Finalement nous allons appliquer le modèle (germination/croissance) afin d'étudier l'influence des paramètres de loi de germination sur la croissance des grains.

III.2. Description du modèle de croissance d'un grain développé par B.Appolaire [App, 00] :

Le modèle de croissance, utilisé dans notre étude, a été développé par B.Appolaire [App, 00]. Ce modèle permet à partir de la connaissance de l'évolution en fonction du temps de l'enthalpie massique moyenne et de la composition en éléments d'alliage du liquide extradendritique de calculer à chaque instant la taille moyenne des grains, la fraction interne de la phase solide, les compositions moyennes dans la phase solide et dans le liquide interdendritique, et le DAS. Nous avons décrit brièvement dans le chapitre précédent le principe de ce modèle, nous allons maintenant le présenter plus en détail car il nous a servi de point de départ pour notre étude. Nous montrerons ensuite, comment ce modèle a été étendu pour prendre en compte la germination hétérogène.

Avant de commencer la description du modèle 3D, nous rappelons qu'un cristal équiaxe dendritique est une étoile à six branches perpendiculaires entre elles sur lesquelles se développent d'autres branches dites secondaires. Ainsi, il est possible de définir un système ouvert délimité par une enveloppe fictive, passant par toutes les pointes de dendrites du cristal (figure III-1).

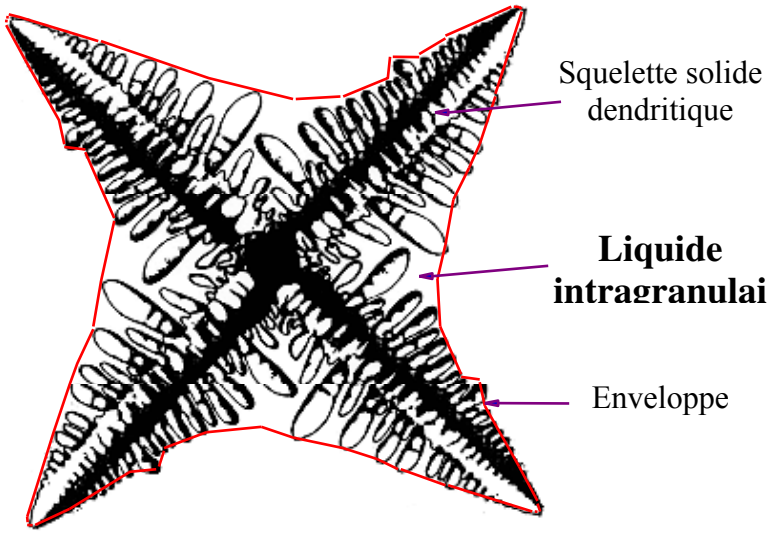


Figure III-1 : Définition du système ouvert considéré dans le modèle de B.Appolaire [App, 00]

L'évolution du grain est déterminée par la cinétique de l'enveloppe et par la solidification à l'intérieur de l'enveloppe. La prise en compte de ces deux phénomènes permet

de prévoir l'évolution de la morphologie d'un grain. Si la solidification à l'intérieur de l'enveloppe est plus rapide que la croissance de l'enveloppe, la morphologie du grain tend à être globulaire, sinon elle est dendritique. La morphologie d'un grain est caractérisée par la fraction interne de la phase solide présente dans l'enveloppe. La fraction interne de la phase solide est définie par :

$$g_i = \frac{V_s}{V_{env}} \qquad \textbf{(III-1)}$$

Avec :

- V_s : le volume de solide contenu dans l'enveloppe du cristal (m^3) ;
- V_{env} : le volume de l'enveloppe (m^3).

Plus g_i est proche de zéro et plus le grain est de morphologie dendritique, à l'inverse, plus g_i est proche de un et plus le grain est de morphologie globulaire. Dans les travaux de B.Appolaire, il n'a pas été défini de valeur de g_i délimitant le changement de la morphologie. Il s'agit en effet d'un problème complexe. La valeur de g_i indique surtout une tendance.

III.3. Modèle d'enveloppe et de structure :

Il s'agit de définir un modèle géométrique décrivant une enveloppe fictive, qui entoure le cristal. Elle est décrite d'une manière géométrique simple, de façon que chaque tronc primaire est représenté par une pyramide à base carrée. Les bras pyramidaux sont disposés sur un cœur en forme de dodécaèdre. Cette pyramide est définie par un rapport $\alpha = \frac{e_{base}}{l_1}$, tel que e_{base} est la longueur des branches secondaires à la base de l'axe primaire, et l_1 la longueur de celui-ci. Ce rapport nous donne une idée sur les conditions de croissance dans lesquelles on se situe. α doit être inférieur à 1 lorsque la convection n'est pas prise en compte, car dans le cas d'une croissance en diffusion pure, les branches secondaires sont en interactions fortes les unes avec les autres et ont par conséquent une vitesse de croissance plus faible que la pointe de la dendrite primaire supposée libre. On peut supposer α tend vers 1 lorsque la convection est prise en compte, les branches secondaires croissent alors indépendamment les unes des autres et à la même vitesse que les bras primaires.

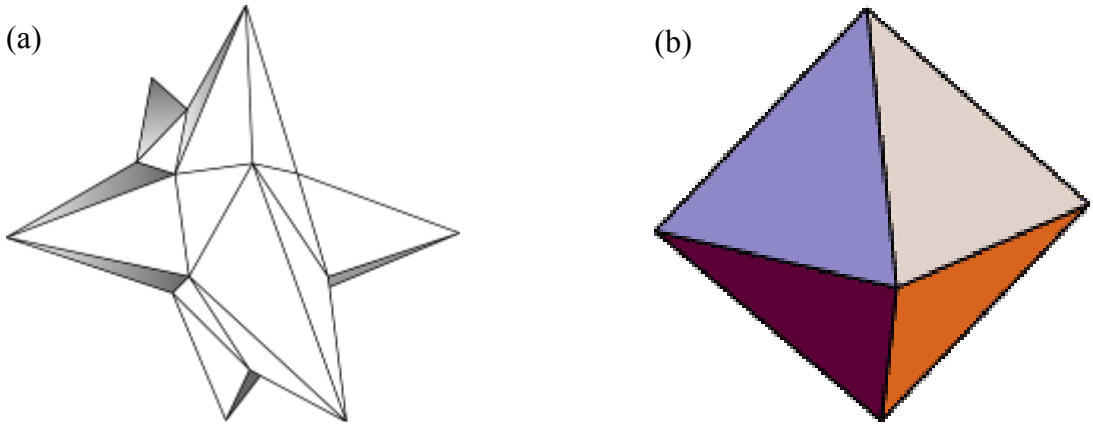


Figure III-2 : formes d'enveloppe de cristaux équiaxes suivant le rapport α : (a) α<1 et (b) α = 1 [App, 00].

Avec le modèle géométrique adopté, le rapport α et la longueur des bras primaires (l_1) suffisent à caractériser la forme générale d'un cristal équiaxe dendritique. Ainsi, ces deux paramètres permettent d'évaluer le volume V_{env} et la surface S_{env} de son enveloppe :

$$V_{env} = \left(1 + \frac{5}{3}\alpha\right)\frac{4\alpha^2}{(1+\alpha)^3} l_1^3 \qquad \text{(III-2)}$$

$$S_{env} = \left(\alpha\sqrt{3} + 3\sqrt{2+\alpha^2}\right)\frac{4\alpha}{(1+\alpha)^2} l_1^2 \qquad \text{(III-3)}$$

D'après ces deux relations, on définit un diamètre équivalent (deq) correspondant à une sphère de même volume que l'enveloppe :

$$deq = \left(\frac{4}{\pi} V_{env}\right)^{1/3} \qquad \text{(III-4)}$$

$$deq = \left[\frac{24}{\pi}\alpha^2 + \left(1 + \frac{5}{3}\alpha\right)\right]^{1/3} \frac{l_1}{1+\alpha} \qquad \text{(III-5)}$$

Dans le modèle de B.Appolaire, α est ensuite considéré égal à 1. La forme de l'enveloppe est donc alors un octaèdre. Les expressions du volume V_{env} et de la surface S_{env} deviennent :

$$V_{env} = \frac{4}{3} l_1^3; \qquad S_{env} = 4\sqrt{3}\, l_1^2; \qquad deq = \frac{2}{\sqrt[3]{\pi}} l_1 \qquad \text{(III-6)}$$

Un modèle géométrique s'avère indispensable pour décrire la structure dendritique de la phase solide. En effet, si des bilans moyens de matière et d'énergie permettent de prédire l'évolution du volume de solide V_s, ils ne délivrent aucune information sur sa distribution morphologique au sein de l'enveloppe. Notamment, la connaissance de la surface S_s des interfaces liquide/solide à l'intérieur de l'enveloppe est une donnée importante car elle influe notablement sur l'efficacité des transferts entre les phases solide et liquide intragranulaire.

Wang et al. [Wan,93] ont employé la relation (III-7) afin de déterminer l'évolution de la surface d'une interface libre, en considérant que les branches dendritiques comme des plaques infinies espacées d'une distance moyenne λ_2 :

$$S_S = \frac{2}{\lambda_2} V_{env} \qquad \text{(III-7)}$$

D'après Wang et al. [Wan, 93], lorsque la structure dendritique disparaît, la surface du solide n'est pas égale à celle de l'enveloppe du cristal. L'espacement entre les bras secondaires est le seul paramètre qui intervient, sachant que de la même façon l'épaisseur le devrait aussi. Ainsi une relation similaire a été établie dans le cas de branches cylindriques :

$$S_S = 4\frac{d}{\lambda_2^2} V_{env} \qquad \text{(III-8)}$$

d étant le diamètre moyen des branches défini par la relation : $g_i = \left(\frac{d}{\lambda_2}\right)^2$, g_i est la fraction interne de la phase solide.

De plus, afin de prendre en compte la valeur limite de S_S lorsque le cristal n'est plus dendritique mais plutôt globulaire la relation (III-8) a été modifiée de façon à tendre vers la surface de l'enveloppe pleine, soit :

$$S_s = \left(\frac{4}{\lambda_2} g_i^{1/2} V_{env}\right)\left(1 - g_i^m\right) + g_i^m S_{env} \qquad \text{(III-9)}$$

Avec :

- m : est un exposant strictement positif

B.Appolaire dans sa thèse préconise pour m la valeur 10, c'est cette valeur que nous avons adopté. L'évolution de l'enveloppe d'un cristal peut être décrite par l'équation (III-10). Reliant

la vitesse d'avancée des pointes de dendrite primaire (V_P) et la vitesse d'évolution de l'enveloppe:

$$\frac{d}{dt}\left(V_{env}\right) = \phi\, S_{env}\, V_p \qquad \text{(III-10)}$$

Avec

- ϕ est un paramètre lié à la forme de l'enveloppe: $\phi = \dfrac{(3+5\alpha)\alpha}{(1+\alpha)\left(\alpha\sqrt{3}+3\sqrt{2+\alpha^2}\right)}$;
- Dans notre cas $\alpha = 1$, La relation III-10 prend alors la forme :

$$\frac{d}{dt}\left(V_{env}\right) = 4{l_1}^2\frac{dl_1}{dt} = 4{l_1}^2 V_p \qquad \text{(III-11)}$$

III.4. La solidification des phases solide et liquide présentes dans l'enveloppe :

Après le développement du modèle d'enveloppe, il faut déterminer l'évolution de l'intérieur de l'enveloppe où les phases solide et liquide peuvent coexister.

Deux mécanismes sont responsables de son évolution :

1. La solidification intragranulaire qui est une solidification du liquide interdendritique contenu dans l'enveloppe, elle détermine l'évolution de g_i ;
2. Le phénomène de maturation, qui est une loi de croissance compétitive, c'est-à-dire les plus gros bras dendritiques croissent au dépend des petits, ce mécanisme s'effectue à fraction interne de solide g_i constante (voir chapitre II).

La solidification intragranulaire consiste à décrire comment le liquide contenu dans l'enveloppe se transforme en solide, en épaississant le squelette du cristal. La description fine des phénomènes locaux de transfert de chaleur et de masse déterminant son évolution, est un problème difficile. B.Appolaire a repris le principe des modèles de Rappaz et al. et de Wang et al. afin de les étendre au cas d'un alliage multiconstitué. Les hypothèses suivantes ont été considérées afin de simplifier le problème :

- A l'échelle du grain, la température est uniforme, les coefficients de diffusion de matière étant beaucoup plus faibles que ceux de la chaleur pour les métaux ;
- La diffusion des espèces dans le liquide intragranulaire est parfaite ;

- Les conditions interfaciales ont été supposées proches de celles qui s'établissent lorsque l'interface est plane et en équilibre thermodynamique local. Autrement dit, les effets de courbure locale sont négligeables sauf pour la maturation.
- Il est possible de décrire les phénomènes de diffusion, notamment de calculer les densités de flux aux interfaces solide/liquide intragranulaires (côté liquide) et (liquide intragranulaire)/(liquide extragranulaire) à partir de la différence de composition entre l'interface et la valeur moyenne dans la phase considérée. Cependant, les distances caractéristiques dépendent des paramètres de structure et des vitesses d'interface.
- Pour la phase solide, comme le coefficient de diffusion est généralement tel que le nombre de Fourier associé est petit devant 1, il est nécessaire de recouvrir à une méthode différente. Une méthode de collocation est mise en œuvre, elle consiste à approximer à chaque instant le profil de composition par un polynôme de degré 3.

Les titres massiques moyens dans le liquide à l'interface s/d $\overline{w}_i^{d*}$ sont liés à la température par le diagramme de phase linéarisée, En supposant l'équilibre thermodynamique à l'interface s/d, il vient :

$$T^* = T_f + \sum_i m_i \overline{w}_i^{d*} \qquad \text{(III-12)}$$

Afin de prédire l'évolution d'un cristal, il faut déterminer :

1) Les titres massiques moyens dans chaque zone (solide, liquide, intragranulaire, et liquide intragranulaire) ;
2) Son évolution thermique ;
3) Ses propriétés géométriques caractéristiques telles que la surface de l'interface liquide intragranulaire solide et ses longueurs caractéristiques ;
4) Les densités de flux de soluté moyennes dans chacune des phases au niveau des interfaces.

Des bilans en masse de soluté sont établis pour chaque élément d'alliage à l'interface de l'enveloppe et à l'interface solide/liquide à l'intérieur du grain. En négligeant les fluctuations locales vis-à-vis des grandeurs moyennes, les bilans moyens de masse pour chaque élément d'alliage à l'interface s/d s'écrit :

$$\rho_s \left(\overline{w}_i^{d*} - \overline{w}_i^{s*} \right) \frac{d}{dt}(V_s) = S_s \left(\overline{J}_i^{s*} + \overline{J}_i^{d*} \right) \qquad \text{(III-13)}$$

Avec :

- V_s : le volume de la phase solide dans la zone pâteuse ;
- ρ_s : la masse volumique de la phase solide ;
- S_s : la surface de l'interface s/d.

- Dans la phase solide, le bilan global de masse pour une espèce i s'écrit :

$$\rho_s \frac{d}{dt}\left(\overline{w}_i^s V_s\right) = S_s \overline{J}_i^{s*} + \rho_s w_i^{s*} \frac{d}{dt}\left(V_s\right) \qquad \text{(III-14)}$$

Avec $\overline{w}_i^s$ est le titre massique moyen dans le volume V_s du solide.

Avec l'hypothèse d'un liquide intragranulaire parfaitement homogène en composition (c'est-à-dire $\overline{w}_i^d = \overline{w}_i^{denv} = \overline{w}_i^{d*}$), si on combine le bilan global de masse de soluté avec les bilans de masse de soluté aux interfaces s/d et d/e, on obtient la relation suivante :

$$\rho_s\left(\overline{w}_i^d - \overline{w}_i^{s*}\right)\frac{d}{dt}\left(V_s\right) = S_s \overline{J}_i^{s*} + S_{env}\overline{J}_i^{lenv} + \rho_d\left(V_{env} - V_s\right)\frac{d}{dt}\left(\overline{w}_i^d\right) \qquad \text{(III-15)}$$

Les diffusivités thermiques sont importantes dans le liquide comme dans le solide. Il est donc possible de supposer que la température du cristal dans son ensemble (solide et liquide intragranulaire) est homogène. Le bilan moyen d'énergie sur l'ensemble du cristal en combinant les bilans dans le solide et dans le liquide intragranulaire, s'écrit :

$$\rho_s\left(\overline{h}^d - \overline{h}^s\right)\frac{d}{dt}\left(V_s\right) = S_{env}\overline{J}_{th}^{lenv} + \left(V_{env} - V_s\right)\rho_d \frac{d}{dt}\left(\overline{h}^d\right) + V_s\rho_s \frac{d}{dt}\left(\overline{h}^s\right) \qquad \text{(III-16)}$$

L : l'enthalpie massique moyenne de transformation, telle que : $L = \overline{h}^d - \overline{h}^s$, est supposée indépendante des compositions des phases. Si on exprime l'enthalpie en fonction de la température, on obtient :

$$\rho_s L \frac{d}{dt}\left(V_s\right) = S_{env}\overline{J}_{th}^{lenv} + \left[V_{env}\rho_d - V_s\left(\rho_s - \rho_d\right)\right]C_p \frac{d}{dt}\left(T^*\right) \qquad \text{(III-17)}$$

Avec :

- $\overline{J}_{th}^{lenv}$ est la densité de flux de chaleur moyen à la surface de l'enveloppe, dans le liquide extragranulaire ;

- Cp : capacité calorifique massique du matériau supposée égale dans les phases solide et liquide.

En admettant que les coefficients de diffusion D_i^{φ}, des espèces chimiques sont indépendants de la composition, la loi de Fick reliant la densité de flux massique de soluté par diffusion et le flux de concentration de soluté s'écrit°:

$$\overline{J}_i^{\varphi} = -D_i^{\varphi}\vec{\nabla}\left(\rho_{\varphi} w_i^{\varphi}\right) \qquad \text{(III-18)}$$

La densité de flux moyen à la surface de l'enveloppe s'écrit en fonction du titre massique moyen de soluté à la surface de l'enveloppe $\overline{w}^{l*}$, du titre massique moyen du liquide extradendritique $\overline{w}^{l}$ et de la longueur de transport δ_l :

$$\overline{J}^{lenv} = D^l \rho_l \frac{\left(\overline{w}^{l*} - \overline{w}^{l}\right)}{\delta_l} \qquad \text{(III-19)}$$

Pour le transfert de chaleur dans le liquide extérieur, la densité de flux moyen en fonction de la température moyenne du cristal $\overline{T}^{*}$, de la température moyenne $\overline{T}^{l}$ du liquide extérieur et d'une longueur de transport d'énergie δ_{lth} a pour expression:

$$\overline{J}_{th}^{lenv} = D_{th}^l \rho_l cp \frac{\left(\overline{T}^{*} - \overline{T}^{l}\right)}{\delta_{lth}} \qquad \text{(III-20)}$$

Suivant la géométrie considérée (plane, cylindrique pour les bras de dendrites ou sphérique), le bilan de masse local de soluté dans la phase solide s'exprime par la relation suivante :

$$\frac{\partial w_i^{\varphi}}{\partial t} = \frac{1}{r^n}\frac{\partial}{\partial r}\left(D_i^{\varphi} r^n \frac{\partial w_i^{\varphi}}{\partial r}\right) \qquad \text{(III-21)}$$

Avec :

- n = 0, pour un domaine de l'espace délimité par 2 plans infinis parallèles ;
- n = 1, pour un domaine de l'espace délimité par un cylindre infini ;
- n = 2, pour un volume délimité par une sphère.

La résolution de cette équation sert à estimer les gradients normaux moyens de soluté aux interfaces solide-liquide côté solide qui apparaissent dans les bilans moyens de masse de soluté. Pour cela, une méthode de collocation est mise en œuvre. Le profil de composition dans le solide est approximé par le polynôme suivant, [Comb, 96] :

$$w_i^s(r) = a_i + b_i r^2 + c_i r^3 \qquad \text{(III-22)}$$

Les coefficients sont déterminés en fonction des titres massiques :

- $\overline{w_i}^{s*}$ à l'interface s/d ;
- $\overline{w_i}^{s}$ la valeur moyenne dans le volume de solide ;
- $\tilde{w}_i^{s*}$ la valeur moyenne dans un sous-domaine du solide.

Après avoir rappelé le modèle de croissance d'un grain, et les différentes étapes de la solidification équiaxe, nous allons présenter leur intégration dans le modèle de germination/croissance.

III.5. Principe du modèle de germination/croissance :

Dans notre étude bibliographique, nous avons présenté différentes études traitant la germination et la croissance. Nous avons vu ainsi que l'addition d'inoculant influence la taille finale des grains, cette dernière décroît lorsqu'on augmente le niveau de l'addition.

Beckermann fut parmi les premiers à proposer un modèle tenant compte du mouvement de la phase solide. Son approche basée sur une prise de moyenne des équations de transport sur les phases solide et liquide, conduisant alors à une description eulérienne du mouvement de la phase solide. Rappaz et al. [Rap,88] ont proposé une approche originale de l'évolution d'une population de grains permettant de prendre compte une compétition entre la germination et la croissance. Aucune des ces études n'a traité à la fois l'effet de la convection et la nature multiconstituée des alliages industriels. Appolaire s'est inspiré des deux modèles et il a simulé l'évolution morphologique d'un cristal en tenant compte de son mouvement.

Le modèle germination/croissance simule l'évolution morphologique d'un groupe de grains en tenant compte à la fois des phénomènes de l'inoculation et de la fragmentation par :

1. Une loi de germination dans le volume de la particule, décrivant la germination hétérogène ;
2. Un flux régulier à travers la surface de la particule qui décrit la contribution de la fragmentation dans la structure dendritique de la zone équiaxe.

Le but de cette partie est de présenter une description du modèle croissance/germination :

III.5.1. Description :

Le domaine d'étude considéré est un cylindre ou une sphère de section quelconque, décomposé en tranches horizontales régulières. Chacune des tranches représente une maille, et chaque maille est assimilable à un milieu liquide dans lequel évoluent en suspension des groupes indépendants de cristaux.

III.5.2. Notion de groupes de grains :

Traiter l'évolution d'un groupe de cristaux au lieu d'un cristal unique, permet d'étendre la validité du modèle à une échelle plus grande afin de prendre en compte l'ensemble des phénomènes, depuis les échelles les plus petites que celle que nous venons d'étudier jusqu'à l'échelle du lingot. Pour pouvoir déterminer l'évolution morphologique d'un groupe de cristaux, il faut changer certains éléments dans le modèle d'évolution d'un cristal solitaire afin de prendre en compte l'influence de la présence de plusieurs cristaux. L'évolution de plusieurs cristaux dans un même environnement liquide en modifie la composition moyenne beaucoup plus rapidement que ne le ferait celle d'un seul cristal. Les équations de transport de soluté ont été conservées en changeant seulement les longueurs de transport δ_{li}, pour tenir compte de l'influence de l'écoulement relatif du liquide entre les cristaux.

La croissance des pointes de dendrite est considérée non affectée par la présence de plusieurs cristaux. La variation d'enthalpie massique pour chaque groupe de grains i s'exprime en fonction de la variation d'enthalpie massique moyenne du volume V_0 dans lequel se trouve le groupe de volume V(i) et de densité N(i).

Pour chaque groupe i, le volume V(i) est calculé en utilisant l'équation suivante :

$$V(i) = \frac{N(i)V_g(i)}{\alpha} \qquad \text{(III-23)}$$

Avec :

- $V_g(i)$ est le volume de grain dans le groupe i ;
- α est une constante définie en utilisant la relation suivante :

$$V_0 = \sum_{i=1}^{n} V(i) \text{ ce qui donne } \alpha = 1 - g_e^l \qquad \text{(III-24)}$$

- g_e^l : la fraction liquide extragranulaire du système étudié.

En déterminant le volume de chaque groupe de grain i, la variation de l'enthalpie pour chaque groupe i est obtenue en fonction la variation d'enthalpie moyenne du système ΔH par la relation suivante :

$$\Delta H(i) = \Delta H \frac{V(i)}{V_0} \qquad \text{(III-25)}$$

III.5.3. Modèle de croissance de l'enveloppe :

Dans la figure III-4, nous présentons un grain équiaxe avec les données caractéristiques nécessaires pour déterminer sa croissance.

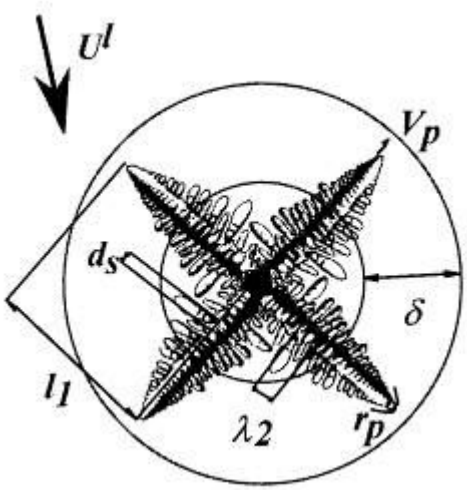


Figure III-4 : définition des données caractéristiques d'un grain équiaxe.

Nous rappelons que :

d_s : le diamètre moyen d'un bras de dendrite secondaire ;

λ_2 : la distance entre les bras secondaire (DAS) ;

V_p : la vitesse de croissance de la pointe de dendrite ;

r_p : le rayon de courbure de la pointe de dendrite ;

U_l : la vitesse du liquide extragranulaire.

La vitesse de la pointe de dendrite et le rayon de courbure sont des variables inconnues. Elles sont calculées en résolvant le système d'équations suivant :

$$\begin{cases} \Delta T = \sum_i m_i w_{i\infty}^l \left(1 - \dfrac{1}{1-(1-k_i) Iv(Pe_i)} \right) \\ r_p = \dfrac{\Gamma}{\sigma^*} \left(\sum_i 2 Pe_i m_i (1-k_i) \left(\dfrac{w_{i\infty}^l}{1-(1-k_i) Iv(Pe_i)} \xi(Pe_i) \right) \right)^{-1} \\ Pe_i = \dfrac{r_p V_p}{2 D_i^l} \end{cases} \qquad \text{(III-26)}$$

Nous rappelons que :

- ΔT :la surfusion ;
- m_i : la pente de liquidus pour l'élément i ;
- $w_{i\infty}^l$: la fraction massique de l'élément i dans le liquide extragranulaire ;
- k_i : le coefficient de répartition ;
- Γ : la constante de Gibbs-Thompson ;
- σ^* : la constante de stabilité, $\sigma^* = \dfrac{1}{4\pi^2}$.

En résolvant ce système d'équation, la vitesse de la pointe de dendrite est obtenue, ce qui permet d'obtenir le nouveau volume de l'enveloppe en intégrant l'équation (III-10).

III.5.4. Les principales équations résolues dans le modèle :

Les bilans d'énergie et de soluté sont écrits pour chaque tranche. Le tableau III-1 présente les différentes équations utilisées dans le modèle :

- L'équation de masse dans la phase solide :

$$\rho_s \frac{d}{dt}\left(\overline{w_i^s} V_s\right) = S_s \overline{J}_i^{s*} + \rho_s w_i^{s*} \frac{d}{dt}\left(V_s\right)$$

- L'équation de masse dans le liquide intragranulaire :

$$\rho_s \left(\overline{w}_i^d - \overline{w}_i^{s*}\right) \frac{d}{dt}\left(V_s\right) = S_s \overline{J}_i^{s*} + S_{env} \overline{J}_i^{lenv} + \rho_d \left(V_{env} - V_s\right) \frac{d}{dt}\left(\overline{w}_i^d\right)$$

- L'équation d'équilibre thermodynamique :

$$T^* = T_m + \sum_i m_i \overline{w}_i^d$$

- L'équation de chaleur à l'intérieur d'un groupe de grains :

$$\rho_s L \frac{d}{dt}\left(V_s\right) = S_{env} \overline{J}_{th}^{lenv} + \left[V_{env}\rho_d - V_s\left(\rho_s - \rho_d\right)\right] c_p \frac{d}{dt}\left(T^*\right)$$

- Le profil de composition dans le solide est approximé par le polynôme :

$$w_i^s(r) = a_i + b_i r^2 + c_i r^3$$

Tableau III-1 : bilans d'énergie et de soluté écrits pour chaque tranche.

III.5.5. Calcul du Das :

L'évolution du Das est calculée avec l'équation suivante :

$$\lambda^2{}_2 \frac{d\lambda_2}{dt} = AB \frac{4(b-1)(1+a(b-1))^2}{b^2 g_i \left(1-\sqrt{g_i}\right)} \qquad \text{(III-27)}$$

- g_i est la fraction du liquide extragranulaire (équation III-1) ;
- a est le rapport entre le nombre de bras qui croissent et le nombre de bras qui refond, $a = \frac{N_g}{N_d}$;
- b est le rapport entre le rayon du bras qui croissent et le rayon des bras qui fondent, $b = \frac{R_g}{R_d}$;
- AB est exprimé selon la relation suivante : $AB = \frac{-\Gamma}{\sum_i m_i (1-k_i) w_{i\infty}^{l*} / D_i^l}$.

III.5.6. Lois d'injection de grains :

L'injection des grains consiste à prendre en compte la germination et la fragmentation, le processus de celle-ci est présenté schématiquement dans la figure III-5. A intervalle régulier, les grains possédant les mêmes caractéristiques sont injectés en utilisant l'un des trois lois d'injection suivant :

1. Greer ;
2. Gaussiènne ;
3. Injection d'une densité de groupe de grains instantanément à partir de la température du liquidus.

La figure III-5 présente l'injection des nouveaux groupes de grains en fonction du pas de temps. Cette figure montre que lorsqu'on injecte des nouveaux grains, ils peuvent co-exister avec d'autres grains qui ont déjà commencé à croître dans le même groupe. Cette

information nous aidera à mieux comprendre les résultats obtenus dans les paragraphes qui suivent.

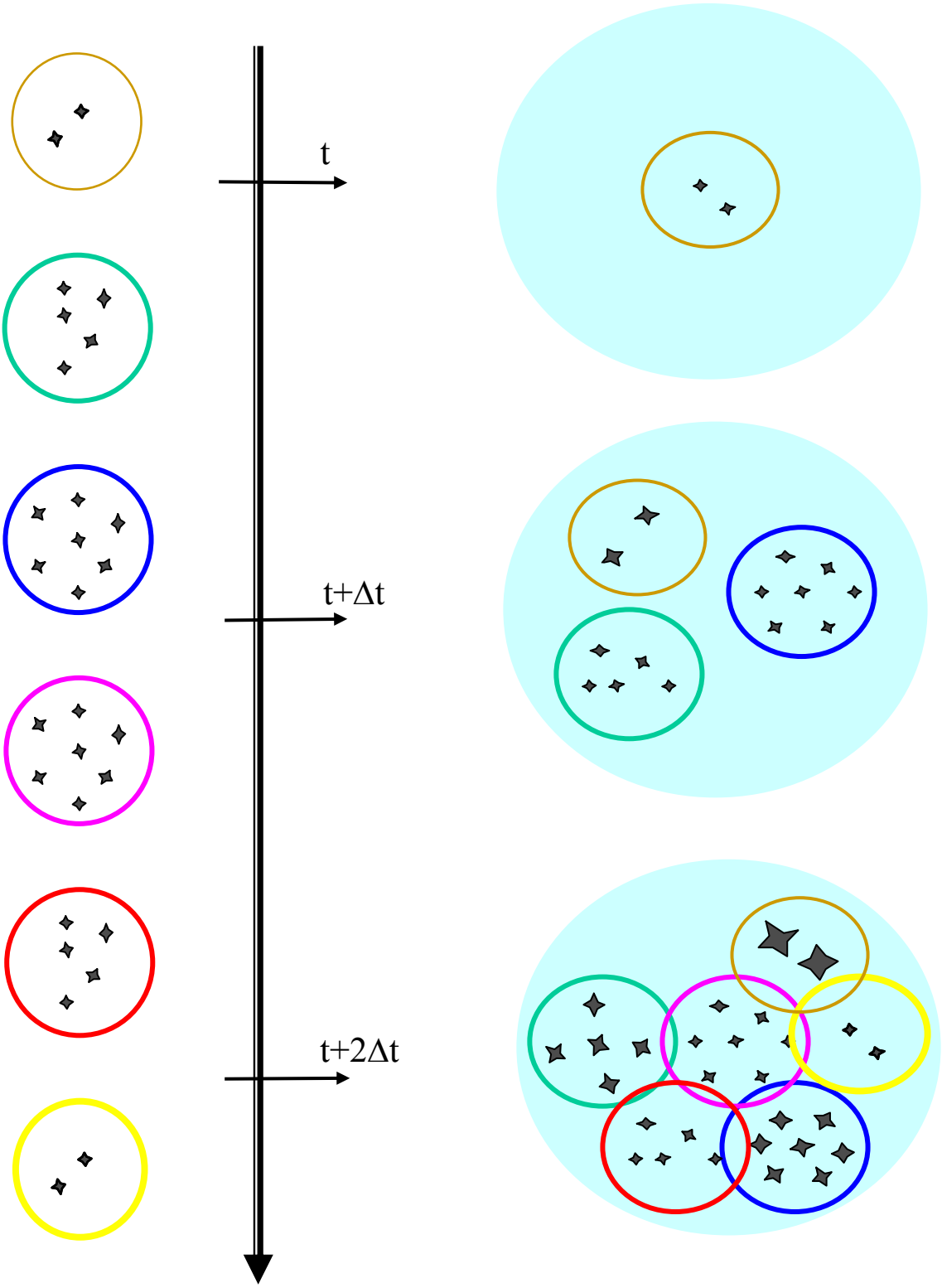


Figure III-5 : l'évolution de groupe de particules en fonction du temps.

III.5.6.1. Discrétisation de la distribution de tailles des particules d'inoculant mesurée par Greer pour un inoculant TiB2 :

Le principe de cette loi a été présenté dans la partie bibliographique. Nous rappelons qu'elle correspond à une distribution de la taille de grains mesurée expérimentalement. La description de la population de particules d'inoculants a été caractérisée suivant une distribution de Poisson :

$$y = y_0 \exp\left(-\frac{d}{d_0}\right) \qquad \text{(III-28)}$$

Avec

- $y_0 = 10^{18}$ (dans notre cas germes .m$^{-3)}$
- $d_0 = 0.71\,10^{-6}$ (m)

Pour discrétiser cette loi, 50 classes de taille de particules ont été définies pour des diamètres variant entre d_{min} à d_{max}. L'intervalle de taille $[d_{min},d_{max}]$ a été découpé en 50 intervalles réguliers. La densité de grains présents dans un intervalle est calculée par la relation :

$$N(d) = 10^{18} \exp\left(-\frac{d}{0{,}71.10^{-6}}\right) \qquad \text{(germes.m}^{-3}\text{) avec } 1 \prec d \prec 10 \text{ (µm)} \quad \text{(III-29)}$$

N est la population relative des particules de T_iB_2 de taille d. La surfusion correspondante à une croissance libre est liée au diamètre de germe par la relation suivante :

$$\Delta T = \frac{4\Gamma}{d} \qquad \text{(III-30)}$$

Avec :

- ΔT est la surfusion ;
- Γ est le coefficient de Gibbs-Thomson.

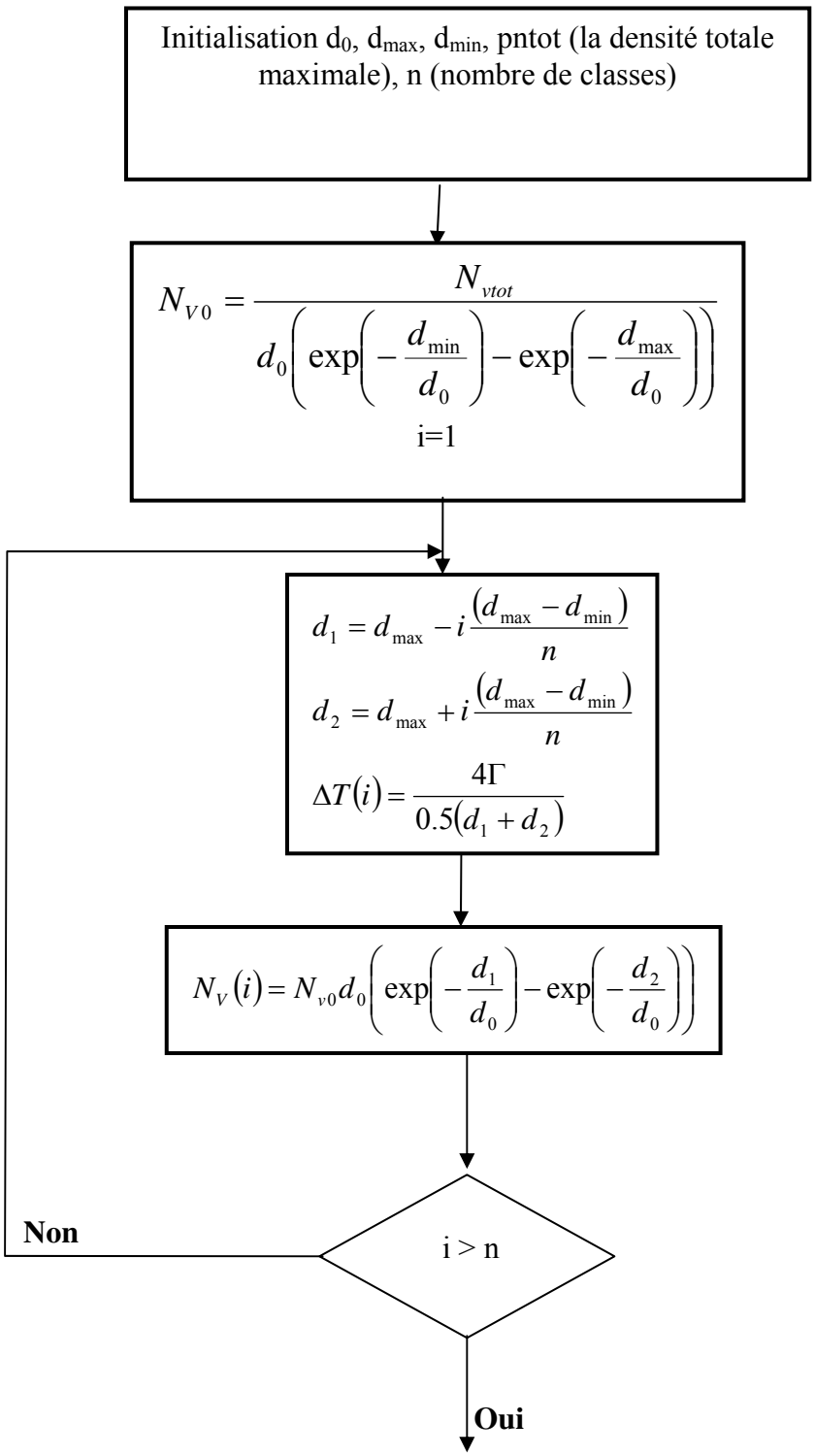


Figure III-6 : organigramme décrivant l'application de la loi de distribution de Greer.

Nous avons tracé sur la figure III-12 le nombre de germes activés en fonction de la surfusion pour la distribution de l'équation III-35. D'après cette figure on remarque que pour une surfusion de 0.5 K, 1.73 10^{11} germes.m^{-3} sont activés.

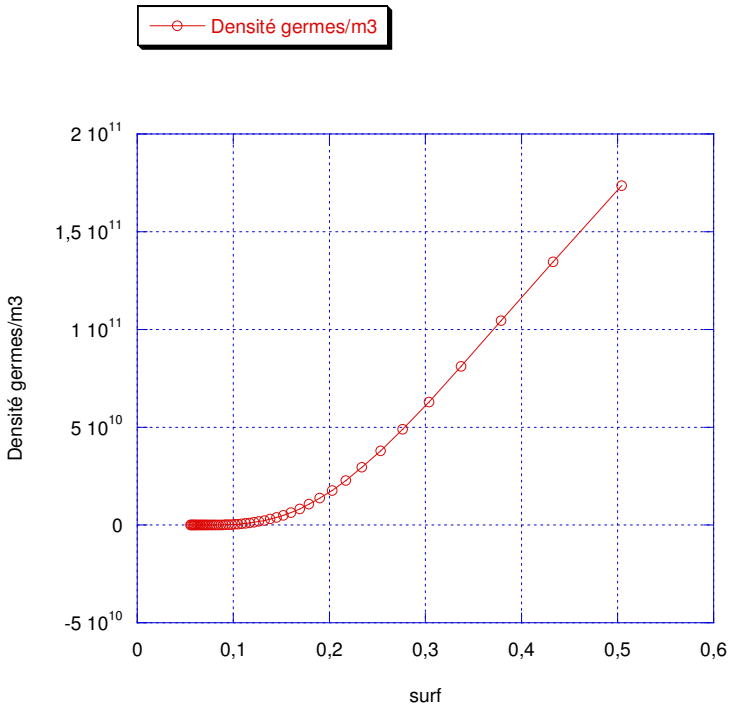


Figure III-12 : évolution de la densité en fonction de la surfusion, équation (III-35).

III.5.6.2. Loi de distribution Gaussienne :

Cette loi de distribution consiste à diviser le nombre total de germes en plusieurs classes selon la valeur de la surfusion. La figure III-7 présente l'évolution de la densité en fonction de la surfusion

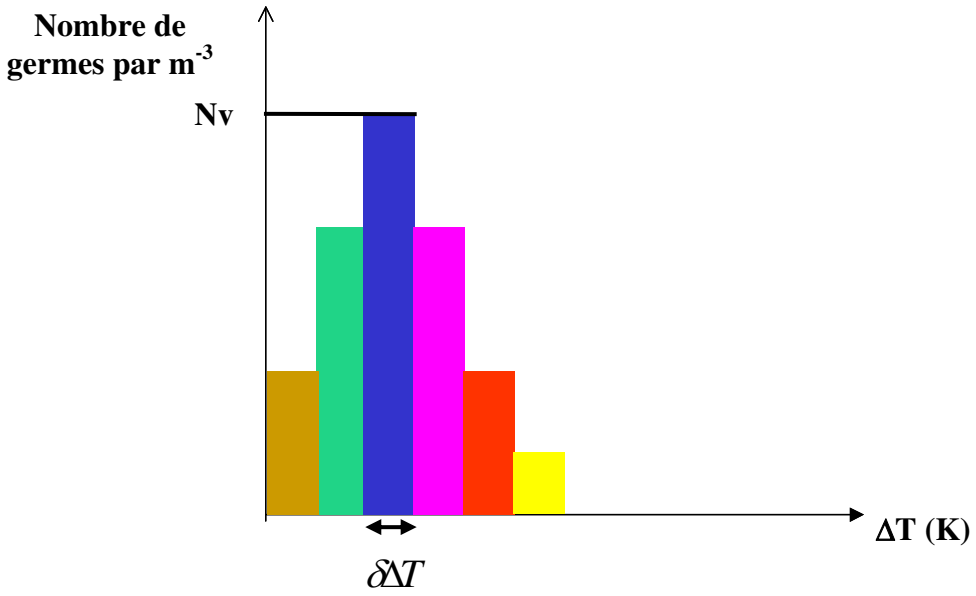


Figure III-7 : nombre de germes par m^3 en fonction de la surfusion.

La loi de distribution Gaussiènne s'exprime comme l'exponentielle d'une forme quadratiquent, équation III-30 :

$$N_v(\Delta T) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(\Delta T - m)^2}{2\sigma^2}\right) \qquad \text{(grains/m}^3\text{/K)} \quad \text{(III-30)}$$

Cette densité passe par son maximum lorsque x =m. Les points d'inflexion sont m+σ et m-σ, avec σ est l'écart type. Toute information est donnée directement par les paramètres m et σ

qui caractérise respectivement la valeur moyenne et la dispersion autour de cette valeur moyenne.

La figure III-8 présente l'organigramme résumant les différentes étapes contrôlant l'injection de germes en appliquant la loi de distribution gaussiènne. Pour chaque classe de n classes de taille de grains la densité de grains est calculée selon la relation suivante :

$$N_{Vn}(i) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\delta\Delta T\ N_{tot}\ \exp\left(-\frac{(\Delta T - \Delta T_N)^2}{2\sigma^2}\right) \qquad \text{(grains/m}^3\text{)} \qquad \text{(III-31)}$$

- ΔT_N est la surfusion moyenne ;
- σ est l'écart type ;
- N_{tot} est le nombre total de germes par unité de volume avec $N(\Delta T)$ est le nombre de germes activés par unité de volume à la surfusion ΔT :

$$N_{tot} = \int_0^\infty N(\Delta T)d(\Delta T) \qquad \text{(III-32)}$$

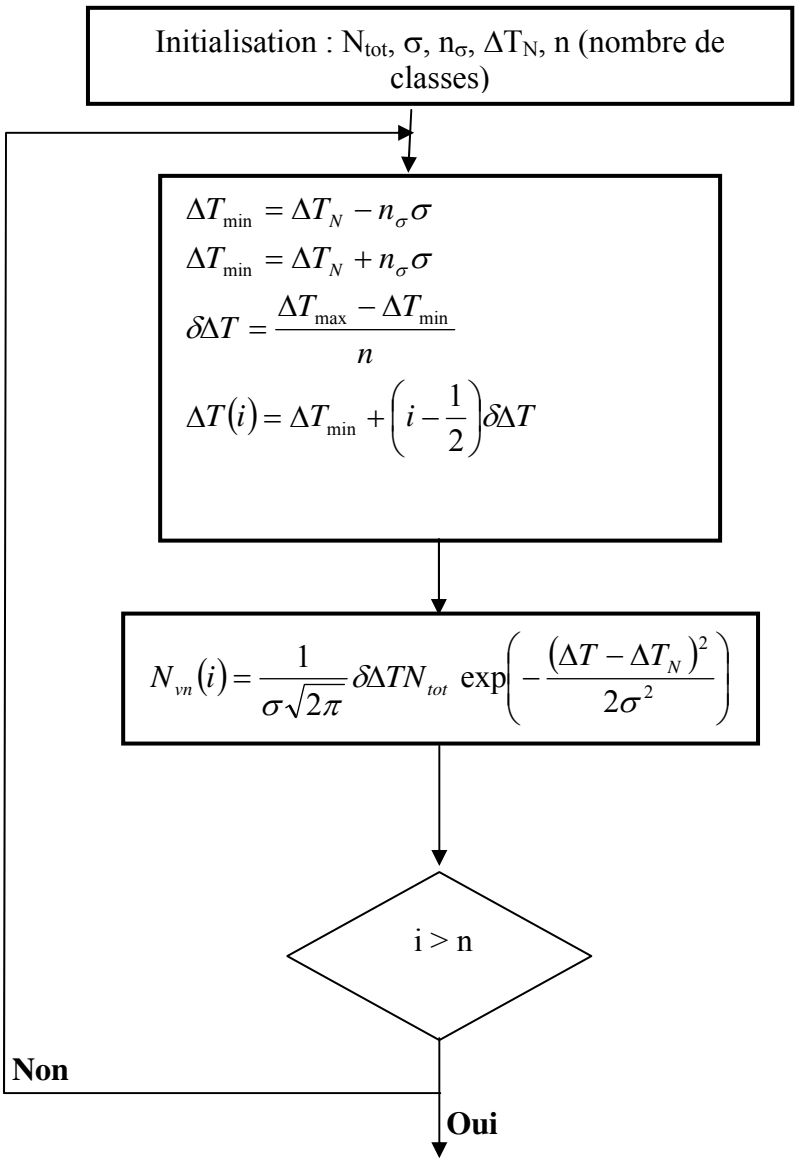


Figure III-8 : organigramme décrivant l'application de la loi de distribution de Gaussienne.

III.5.6.3. Loi d'injection de grains à la température de liquidus :

Cette loi consiste à définir un nombre maximal de cristaux compris dans un groupe, la densité de grains injectée par m^2 et par seconde est définie aussi. Lorsque la température de liquidus est atteinte, tous les grains sont injectés avec une valeur de densité N_{Vtot}. La figure III-9 présente l'organigramme résumant les différentes étapes de cette loi.

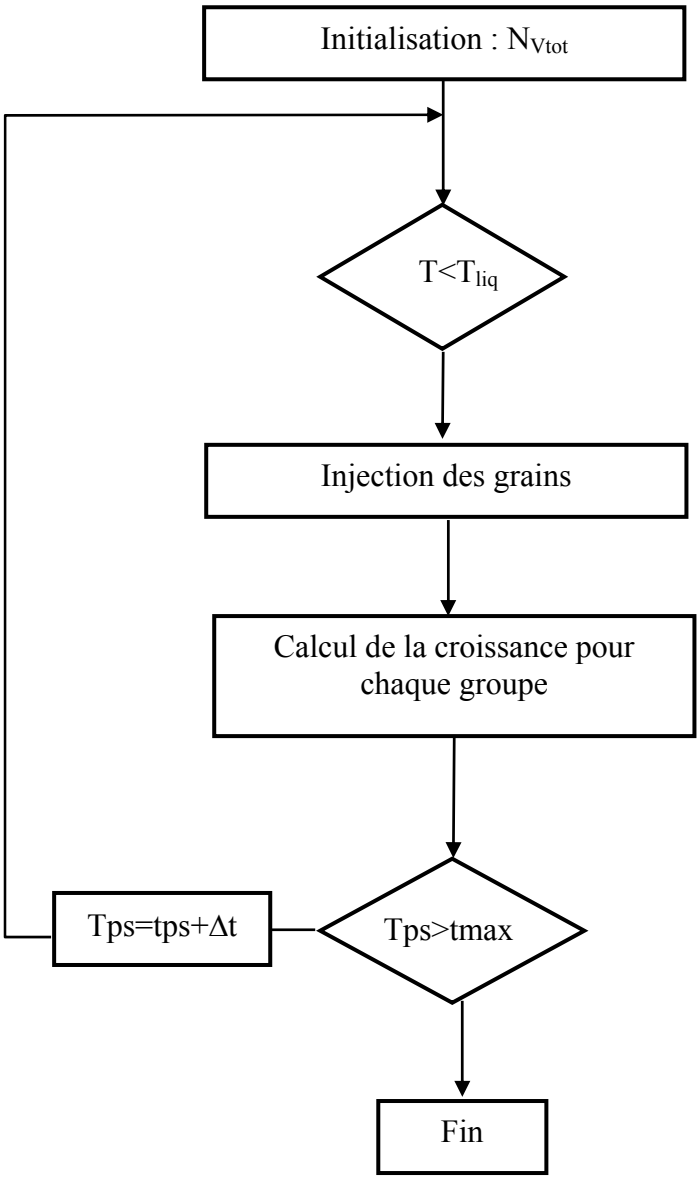


Figure III-9 : organigramme décrivant injection des germes à la température de liquidus.

Lorsque ce principe d'injection de grain par m² et par seconde est couplé avec une des lois de distribution d'injection présentée précédemment, il représente la prise en compte des grains détachés lors de la solidification (les fragments).

III.5.6.4. L'organigramme du modèle germination/croissance :

Nous avons présenté les différentes étapes du modèle germination/croissance en rappelant les équations qui ont servies à calculer la croissance et les différentes lois de germination utilisées dans ce modèle. Dans cette partie, nous allons résumer ces étapes dans l'organigramme présenté dans la figure III-10 :

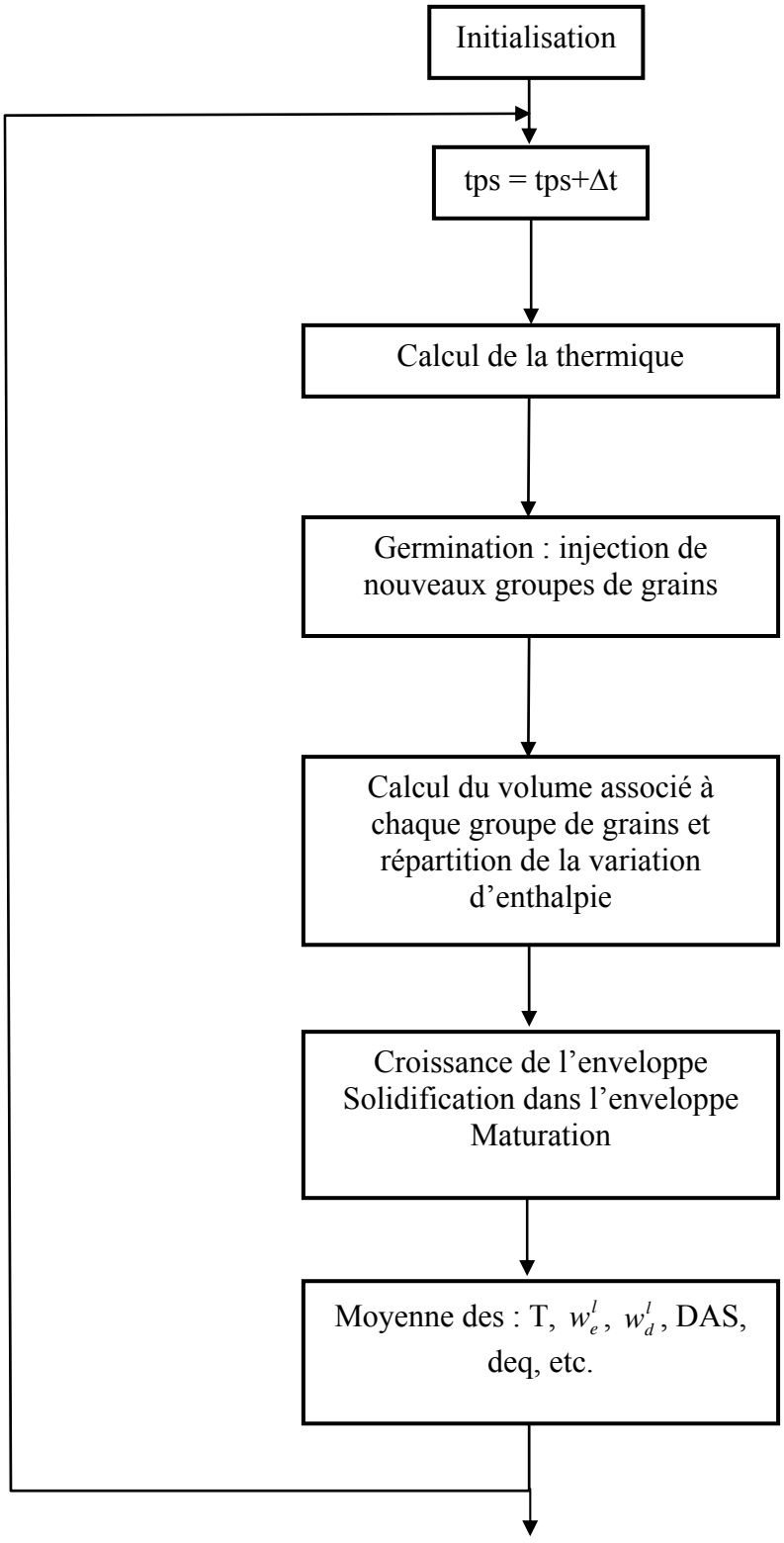


Figure III-10 : organigramme du modèle germination/croissance.

Après avoir décrit le modèle croissance/germination, nous allons étudier son application sur un alliage Al-4,7%Mg. Nous allons aussi étudier l'influence du choix de la loi de distribution sur la taille finale des grains et leurs morphologies. Une étude de sensibilité sera traitée.

III.6. Application du modèle de croissance :

III.6.1. Définition du système étudié :

Le but de cette partie est de montrer la capacité du modèle à prédire la formation des structures et notamment la densité, la taille moyenne des grains, leur morphologie dans le cas où les grains sont dendritiques. Nous avons également étudié l'influence de différentes lois de germination ainsi que l'injection de fragments et la combinaison des deux.

Nous avons appliqué le modèle d'un alliage Al-4,7%Mg. Cette composition correspond à la teneur en Magnésium de l'alliage 5182 employée lors des essais de la thèse de S.Sferdjella [Sfe, 04]. La température initiale du métal est égale à 944K. La température de liquidus est de 915K et nous considérons un eutectique à 771.55K. Le domaine d'étude est un cylindre dont la température est supposée uniforme à tout instant, son rayon est de 38mm et sa hauteur est de 100mm. Les données thermophysiques de l'alliage sont rapportées dans le tableau III-2 :

Quantités et unités	***Valeur***
La chaleur spécifique dans les phases liquide et solide (J/kg/°C)	1146
Coefficient de Gibbs Thompson (K.m)	$1{,}374\ 10^{-7}$
Chaleur latente (J/kg)	$0{,}39750\ 10^{6}$
La masse volumique des phases liquide et solide (Kg/m^{-3})	2450-2750
Magnésium :	
Coefficient de diffusion chimique dans la phase liquide (m^2/s)	$5{,}8\ 10^{-9}$
Coefficient de diffusion chimique dans la phase solide (m^2/s)	$5\ 10^{-13}$
La pente de liquidus (K/wt.pct.)	-6,15
Coefficient de partage	0,49
Composition nominale (%mass)	4,7

Tableau III-2 : propriétés thermophysiques de l'alliage.

Un flux de chaleur constant de -46000W/m² pour le cas de référence a été imposé sur la face latérale du cylindre (figure III-11). Le bilan thermique sur le cylindre dans le cas où il n'y a pas de changement de phase s'écrit :

$$\rho V c_p \frac{dT}{dt} = S\ Flux \qquad \text{(III-33)}$$

Avec :

- V est le volume du domaine égal à $\pi R^2 h$;
- S est la surface d'échange égal à $2\pi Rh$.

L'équation (III-33) devient :

$$\frac{dT}{dt} = \frac{2Flux}{\rho c_p R} \qquad \text{(III-34)}$$

Le flux de chaleur imposé correspond à une vitesse de refroidissement de -0.8K/s. Le temps total de calcul a été adapté pour aller jusqu'à une solidification complète (700s). Le pas de temps de calcul a été fixé à 10^{-2}s. Différents calculs avec le modèle de croissance ont été effectués afin de déterminer :

- L'influence de la loi de distribution de germes ;
- L'influence de la vitesse de refroidissement ;
- L'influence de l'injection de fragments par la paroi latérale.

Dans cette étude, les groupes de grains sont injectés avec un débit contrôlé soit par la surfusion (en atteignant la valeur critique) soit par une densité de germes constante, dans les zones où la fraction volumique de liquide extragranulaire est supérieure à une valeur critique (g^{l}_{glob}) en dessous de laquelle, nous considérons que les grains se touchent. C'est-à-dire qu'à partir de cet instant, les enveloppes des grains occupent tout l'espace et de nouveaux grains ne pourront plus se développer. De nouveaux groupes de grains apparaissent soit par germination hétérogène, soit par des fragments injectés par la face latérale du cylindre tant que la fraction volumique de liquide extragranulaire est supérieure g^{l}_{glob}, qui a été fixée pour ces calculs à 0,5.

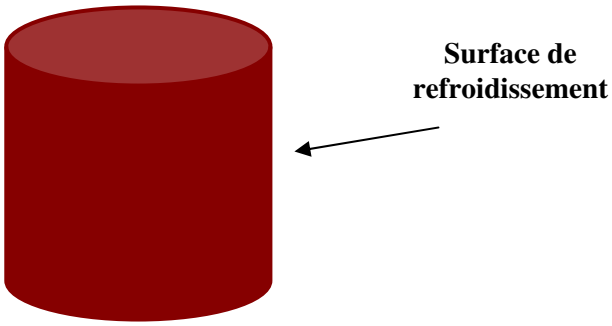


Figure III-6 : schéma du domaine d'étude : cylindre de rayon 38 mm et de hauteur 100mm.

III.6.2. Influence de la loi de germination :

Dans cette étude nous avons appliqué au modèle les différentes lois présentées dans la partie bibliographique :

III.6.2.1. Loi de Greer :

Nous rappelons la forme de la loi de distribution de densité de Greer :
La distribution de taille des particules de TiB_2 pour un affinant du commerce a été mesurée par Greer et al [Gre, 00] en utilisant la relation suivante :

$$N(d) = 10^{18} \exp\left(\frac{d}{0{,}71.10^{-6}}\right) \qquad \text{(germes.m}^{-3}\text{) avec } 1 \prec d \prec 10 \text{ (µm)} \qquad \text{(III-35)}$$

D'après l'analyse thermique simple au cours de la solidification d'un métal, la courbe d'évolution de la température en fonction du temps présente trois domaines distincts correspondants au refroidissement du solide. La figure III-13 présente l'évolution au cours du temps de solidification considéré égale à 700s, de la température obtenue numériquement. Cette figure montre un abaissement rapide de la température dans le puits liquide dû à l'évacuation du flux de chaleur suivi d'un refroidissement lent correspondant à la croissance de grains en libérant de la chaleur latente, suivi d'une décroissance due à l'enrichissement du liquide en soluté.

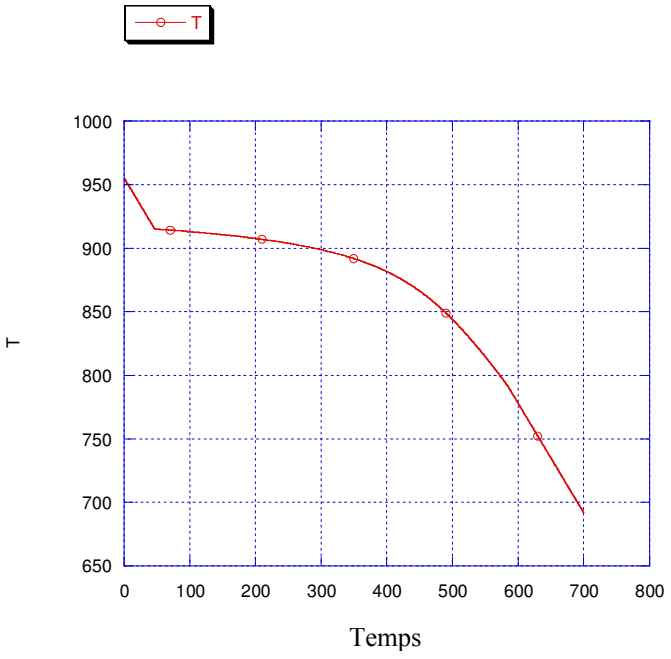


Figure III-13 : évolution de la température en fonction du temps.

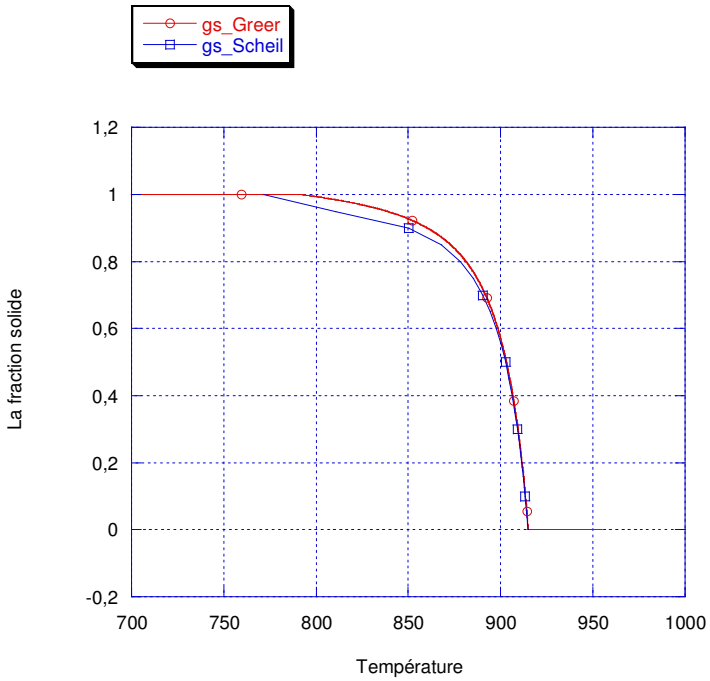


Figure III-14 : comparaison entre l'évolution de la fraction solide en fonction de la température obtenue numériquement avec le modèle de Greer et celle de Scheil.

Le modèle de Scheil donne une bonne approximation pour la relation entre la fraction solide et la température. La figure III-14 présente une comparaison entre le chemin de solidification (relation entre la fraction solide et la température) calculé et celui donné par le modèle Scheil. Les deux chemins sont très semblables pour des fractions solides comprises entre 0 et 0,8. Ils diffèrent au niveau de la fin de solidification, ceci est du à l'effet de la diffusion du soluté dans la phase solide.

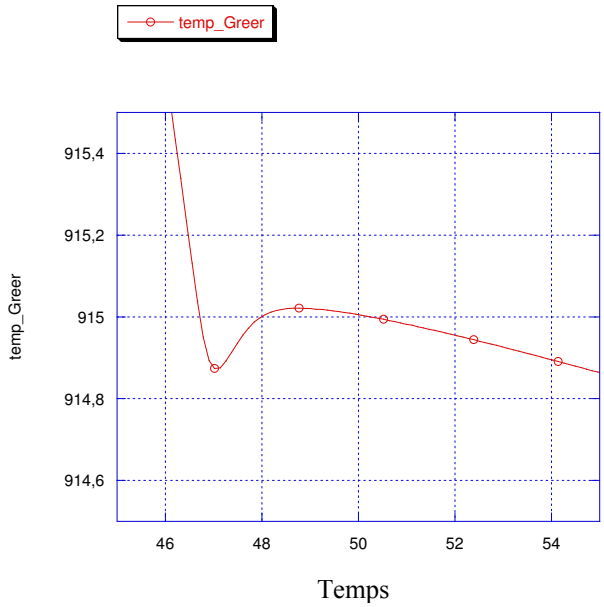


Figure III-15 : l'évolution de la température en fonction du temps autour du liquidus.

La figure III-15 présente l'évolution de la température autour de la température de liquidus. D'après cette figure, nous observons une faible recalescence ce qui est conforme à un début de solidification en retard par rapport à une situation où la germination procède instantanément à la température de liquidus. La figure III-16 présente l'évolution du diamètre équivalent des grains en fonction du temps. En fin de solidification, le diamètre équivalent des grains est de l'ordre de 250µm, avec un écart type de 0.1µm. Un faible écart type signifie que la taille des grains est similaire pour tous les groupes de grains. Ceci est du à la loi de germination utilisée. La figure III-17 présente l'évolution de la densité de germes injectés en fonction du temps, nous observons qu'en fin de calcul, nous obtenons une densité volumique de germes de 1.046 10^{11} germes.m^{-3}. Sur la figure III-12 nous avons vu que d'après la loi de germination employée, la densité maximale de germes activés est de 1.73 10^{11} germes.m^{-3}. La question qui se pose est : *qu'est ce qui a pu arrêter la formation de nouveaux grains, puisque la totalité des germes possibles de la distribution n'a pas été utilisée ?*

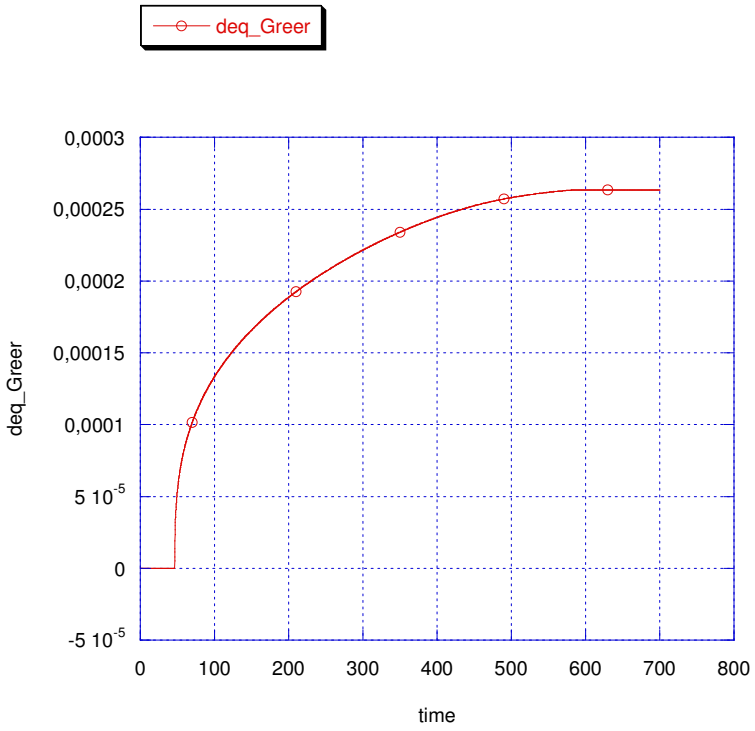


Figure III-16 : évolution du diamètre des grains en fonction du temps.

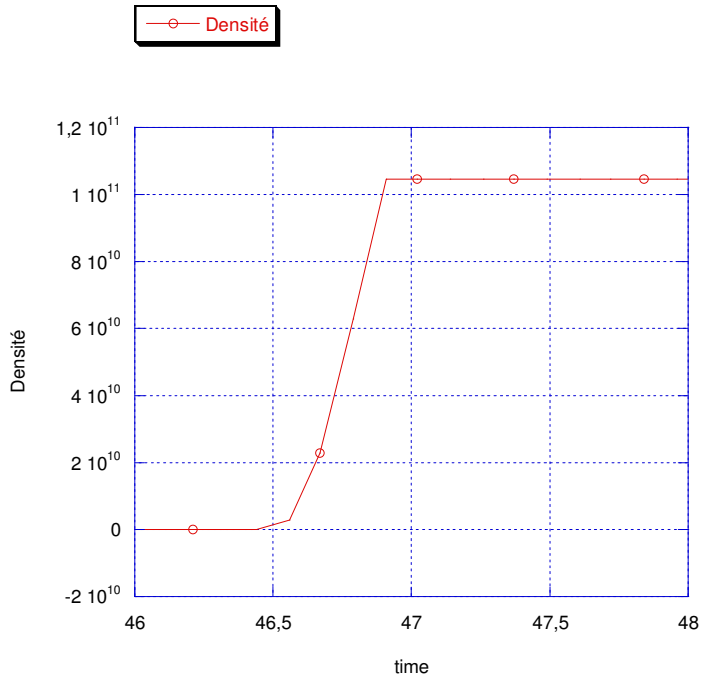


Figure III-17 : évolution de la densité de germes activée en fonction du temps.

Afin de répondre à cette question, nous rappelons que la création de nouveaux groupes de grains est contrôlée, soit par la surfusion, soit par la fraction volumique de liquide extragranulaire lorsqu'elle devient inférieure à une valeur seuil. Pour cela, nous avons tracé dans la figure III-18 l'évolution de la surfusion et de la composition du liquide extragranulaire (w_{Mg}^{l}) en fonction du temps. La surfusion est définie comme l'écart de température :

$$\Delta T = T_{liq}\left(w_{Mg}^{l}\right) - T$$

D'après cette figure et la figure III-17, nous observons que la germination totale se fait à 0.6 seconde pour un temps de solidification total de 500 secondes (ce qui explique le faible écart type du diamètre obtenu). Nous observons aussi que la surfusion maximale atteinte est de 0.4 K à l'instant 46,9 secondes, au même moment le liquide extragranulaire commence à s'enrichir.

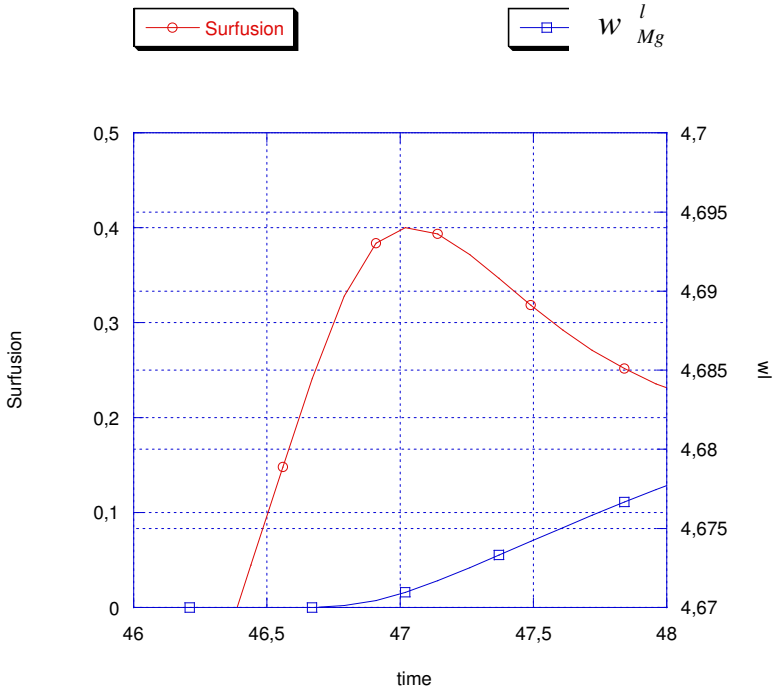


Figure III-18 : évolution de la surfusion et de la composition du liquide extragranulaire en fonction du temps. Dans le cas de la loi de germination de Greer.

Nous rappelons que plus les germes croissent, plus on rejette du soluté dans le liquide, l'enrichissement du liquide extragranulaire en soluté a limité la surfusion par l'abaissement de la température de liquidus et par la remontée de la température (recalescence). L'arrêt de l'activation de nouveaux germes est associé dans la littérature à l'instant où la recalescence débute. Notre raisonnement montre que cela n'est pas forcement le cas puisqu'il faut également considérer la variation de la température de liquidus. Ceci provoque l'arrêt de la germination.

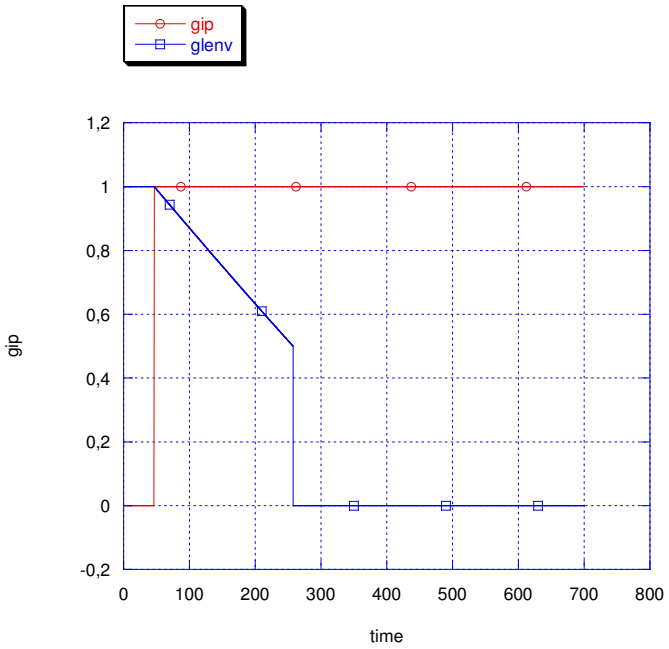


Figure III-19 : évolution de la fraction de liquide extradendritique et de la fraction interne de solide en fonction du temps.

La figure III-19 présente l'évolution de la fraction interne de solide, et de la fraction liquide extradendritique en fonction du temps. On voit sur cette figure que la fraction interne de la phase solide reste à la valeur 1 pendant toute la solidification. Cela signifie que les grains se sont développés avec une morphologie globulaire. Par ailleurs la valeur seuil de g^{l}_{env} est atteinte au temps 260 secondes, ce qui est bien supérieur au temps où la densité de grains devient constante. Donc l'arrêt de la germination n'est pas du au fait que les grains se touchent.

D'après ces résultats, nous concluons que l'activation de nouveaux germes a été arrêtée au moment où la surfusion était maximale. Nous avons vérifié que cet instant

correspond à l'instant où la température passe par un minimum local sur la figure III-15. Autrement dit, le maximum de la surfusion correspond à l'instant où la recalescence démarre. La remontée en température pendant la recalescence, combinée avec l'enrichissement en soluté du liquide extragranulaire dû à la solidification vont rapidement réduire la surfusion.

Comme dans l'étude de Greer [Gre, 00] présentée dans notre chapitre bibliographique, nous avons étudié pour la même loi de germination, la même condition de refroidissement, l'influence du coefficient de restriction de croissance Q (relation III-42) sur le diamètre équivalent moyen des grains en fin de solidification. La figure III-20 présente la variation du diamètre en fonction de Q. D'après cette figure, nous observons que lorsque Q croît, le diamètre des grains décroît.

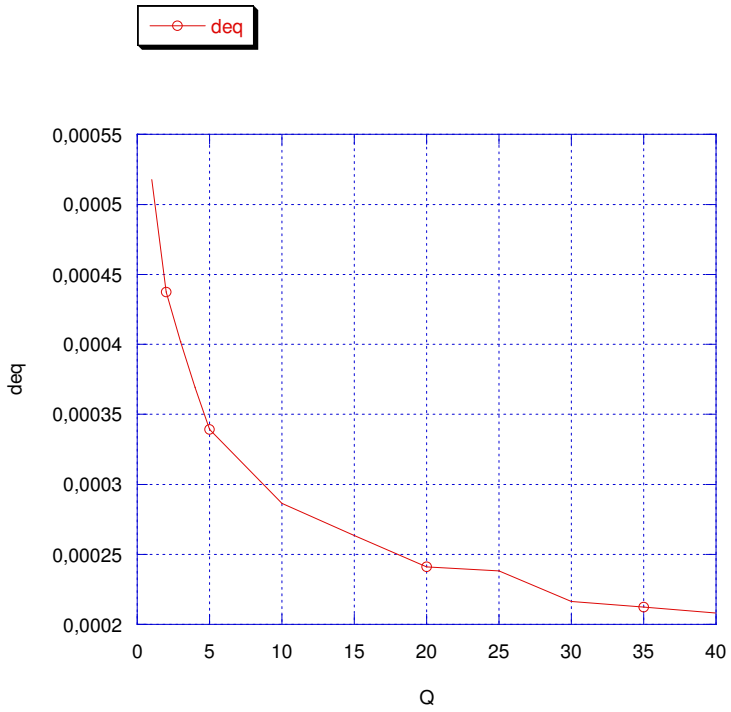


Figure III-20 : évolution du diamètre équivalent moyen en fonction du coefficient de restriction de croissance Q.

Nous rappelons que d'après le bilan de soluté à l'interface d'un cristal, la vitesse de croissance d'un cristal est inversement proportionnelle au coefficient de restriction de croissance ce qui explique le résultat obtenu. Ce résultat est conforme à celui obtenu par Greer et al. dans leur étude (chapitre II, figure II-5).

III.6.2.2. Loi de distribution de germes de type gaussienne :

Nous rappelons que notre but est d'étudier l'influence de la loi de distribution de germes sur la croissance de grains. Dans la partie précédente, nous avons étudié les résultats obtenus en appliquant la loi de distribution de Greer. Dans cette partie, nous allons étudier une loi gaussienne. Pour cette dernière, nous avons adopté différentes valeurs de densité, de surfusion moyenne et d'écart type. Le tableau III-3 présente les différentes valeurs adoptées :

Densités des grains	$1{,}73.10^{11}$	1.10^{10}	1.10^{9}
Surfusion moyenne (K)	3	1	5
Ecart type (σ (K))	1	0,5	0,1

Tableau III-3 : les différentes valeurs utilisées pour l'étude de sensibilité, d'une loi de distribution de germes de type Gaussiènne.

Nous avons considéré comme cas de référence les valeurs données par la première colonne du tableau. Les autres données du calcul sont les mêmes que celles de l'étude précédente.

III.6.2.2.1 L'influence de la densité :

Afin d'étudier l'influence de la densité, nous avons fixé l'écart type et la surfusion moyenne respectivement à 1 et 3K. Les trois valeurs de densité volumique de germes adoptées dans le calcul sont présentées dans le tableau III-3.

La figure III-21 présente l'évolution de la température en fonction du temps obtenue numériquement pour les trois valeurs de densité. Cette figure montre que les courbes de températures vues à cette échelle sont confondues. Pour les distinguer, nous avons tracé sur la figure III-22 l'évolution de la température (pour les trois valeurs de densités) autour du liquidus. D'après cette figure, nous observons une recalescence qui devient plus importante lorsque la densité de germes diminue.

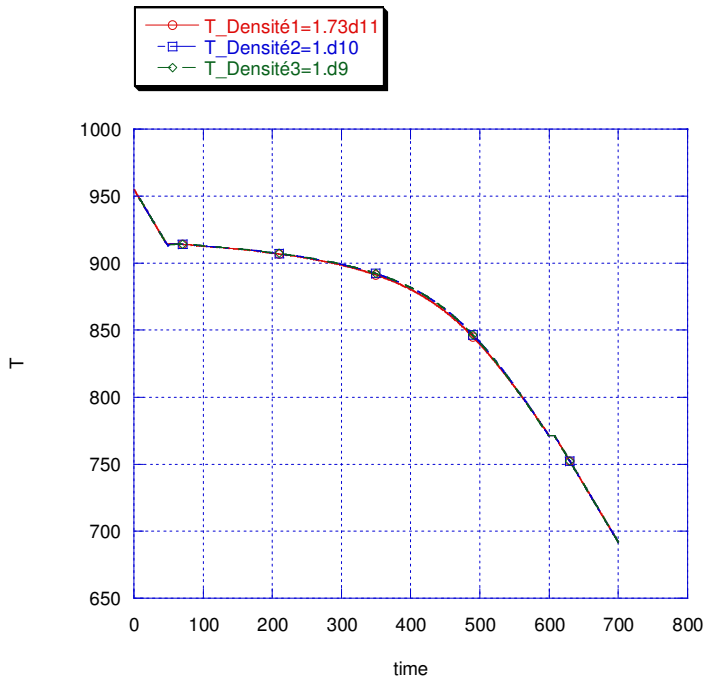


Figure III-21 : évolution de la température en fonction du temps.

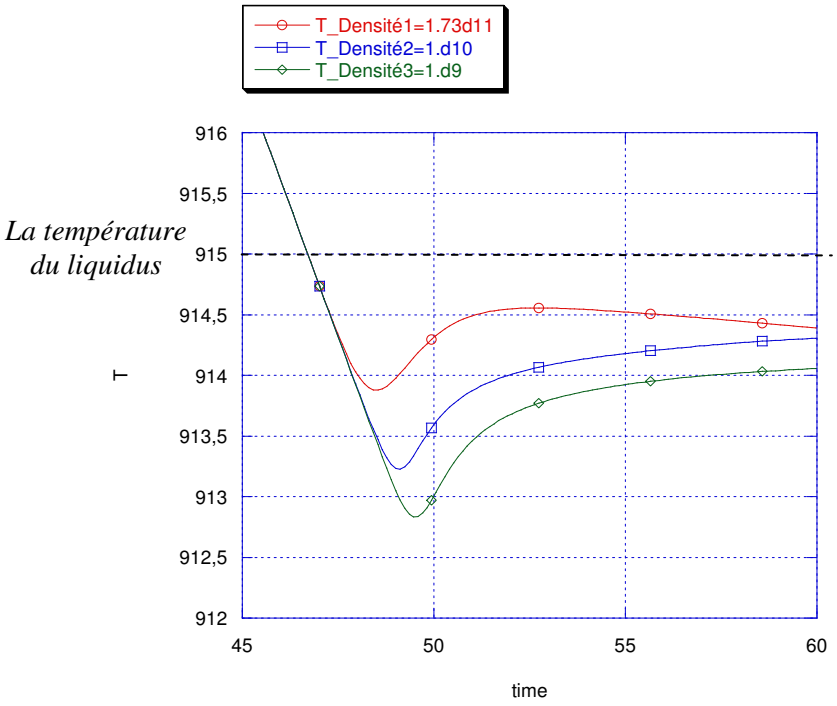


Figure III-22 : évolution de la température autour du liquidus en fonction du temps pour les trois densités adoptées.

Les valeurs du minimum de la température la recalescence ont été atteintes à des temps différents. Le tableau III-4 présente les valeurs de la surfusion maximale et l'instant t_{surf} correspondant pour chaque valeur de densité utilisée.

Densité (germes.m^{-3})	**1,73.10^{11}**	**1.10^{10}**	**1.10^{9}**
Surfusion maximale (K)	1,39	2,04	2,8
t_{surf} (s)	48,42	48,9	49,24
Temps d'activation de nouveaux germes (t_{inj} en s)	1,39	2,04	2,44
Densité de grains finale (grains.m^{-3})	1,006 10^{10}	1,6704 10^{9}	2,728 10^{8}

Tableau III-4 : les différentes valeurs obtenues pour l'étude de sensibilité en fonction de la densité totale de germes.

Les figures III-23, et III-24 présentent respectivement l'évolution de la densité et du diamètre équivalent moyen en fonction du temps de solidification pour les différentes valeurs de densité adoptées. D'après ces figures nous observons que le diamètre équivalent moyen des grains diminue en augmentant la densité. Dans le tableau III-4, nous avons présenté les valeurs du temps d'activation de nouveaux germes pour chaque densité. D'après ce tableau nous observons que plus la densité augmente. Plus un grand nombre de germes sont activés en un intervalle de temps plus court.

D'autre part, ce tableau nous révèle aussi que, pour les trois densités, tous les germes n'ont pas été activés. Ceci pousse à nous interroger sur le phénomène qui a pu arrêter la germination. Nous rappelons que la germination peut être arrêtée soit par la surfusion soit par la fraction volumique du liquide extragranulaire lorsque sa valeur est en dessous de la valeur seuil (dans notre calcul cette valeur est égale à 0,5).

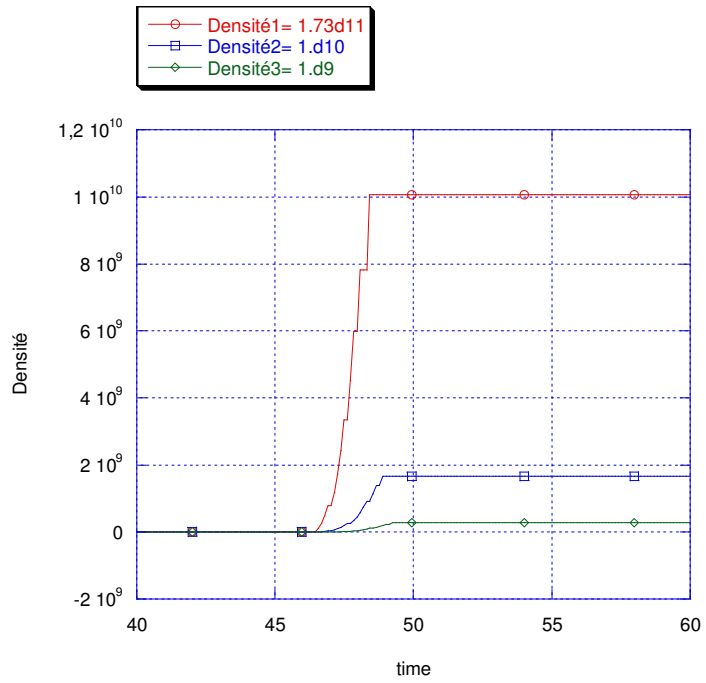


Figure III-23 : évolution de la densité de germes activée en fonction du temps, pour les trois valeurs de la densité maximale de germes adoptées.

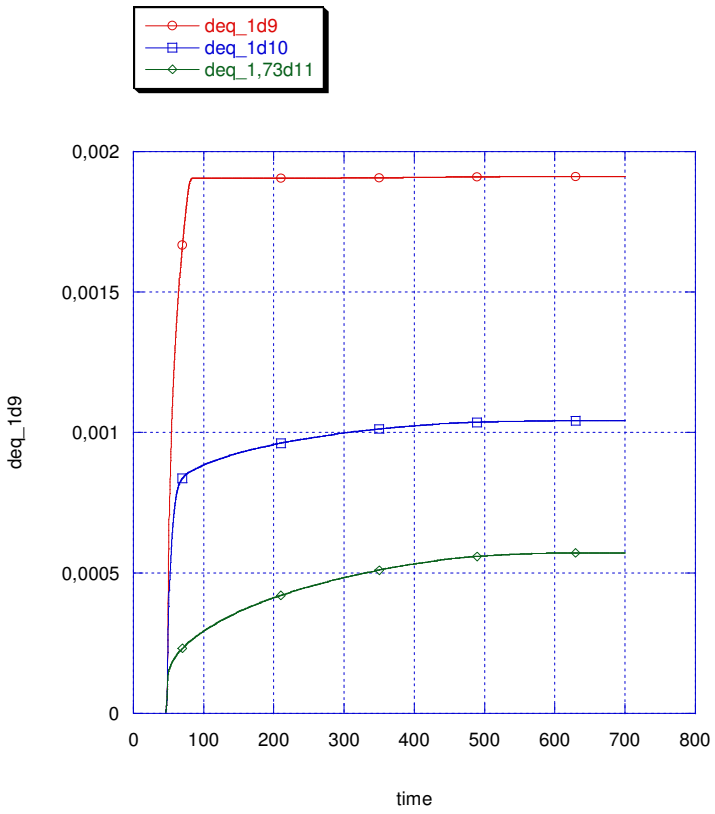


Figure III-24 : évolution du diamètre en fonction du temps pour les trois valeurs de densité adoptée.

La figure III-25 présente l'évolution de la fraction volumique du liquide extragranulaire en fonction du temps pour les trois valeurs de la densité. D'après cette figure, nous observons que la fraction volumique du liquide a atteint la valeur seuil à l'instant : 65s, 67,36s et à 258,33s respectivement pour les densités initiales de germes : 10^9, 10^{10}, et 1,73 10^{11} (germes.m^{-3}). Sur la figure III-23, nous avons vu que la densité a atteint son maximum aux instant (respectivement pour les trois densités 10^9, 10^{10}, et 1,73 10^{11}) 49,24s, 48,9s, et 48,49s. Ceci conduit à déduire que la création des nouveaux groupes de germes n'a pas été arrêtée par le fait que les grains se touchent. D'autre part, sur la figure III-26, nous avons tracé l'évolution de la surfusion et de la composition du liquide extragranulaire en fonction du temps. Cette figure nous montre que le temps correspondant à l'activation de création de nouveaux germes coïncide à nouveau avec le temps où le liquide extragranulaire en soluté. D'après ce résultat, nous déduisons que la surfusion a de nouveau limité l'activation de nouveaux germes.

Nous rappelons que plus la fraction interne de solide (g_{ipack}) des cristaux équiaxes (au moment où la croissance est arrêtée) est proche de 1 plus les grains sont globulaires. Le tableau III-5 présente les valeurs de g_{ipack}, du Das et de l'écart type du Das obtenus pour les trois valeurs de densités adoptées.

Densités	**10^9**	**10^{10}**	**$1{,}73.10^{11}$**
g_{ipack}	$0{,}49.10^{-2}$	$0{,}95.10^{-1}$	1
Das (µm)	185,6	198	Pas calculé
L'écart type sur le diamètre moyen (µm)	51,9	31,6	3,28

Tableau III-5 : les résultats obtenus pour différentes valeurs de densités.

D'après le tableau III-5 nous pouvons distinguer deux types de morphologie :

- Globulaire : pour le cas où la densité est égale à $1{,}73.10^{11}$;
- Dendritique : pour les deux autres cas (lorsque les densités sont de 10^9 et de 10^{10}).

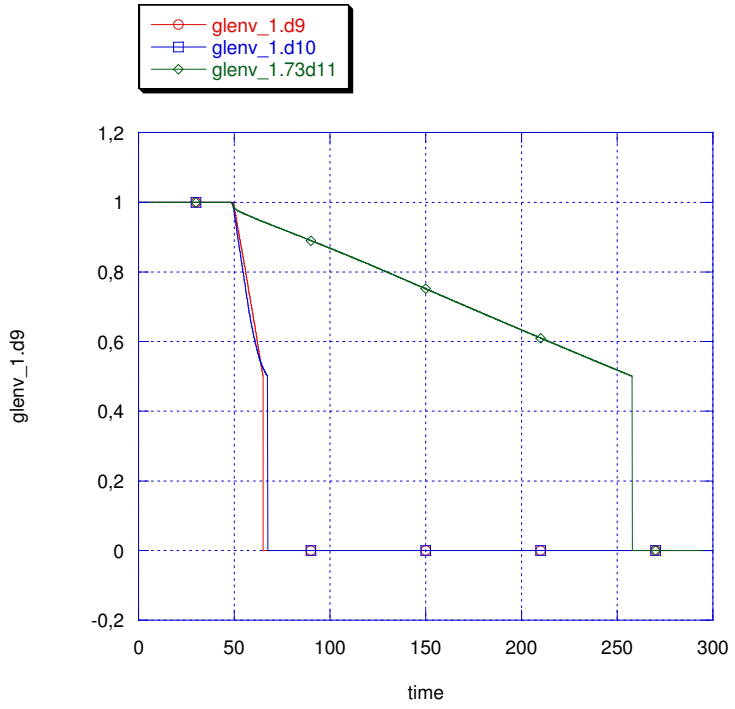


Figure III-25 : évolution de la fraction liquide extragranulaire pour les trois valeurs de densité.

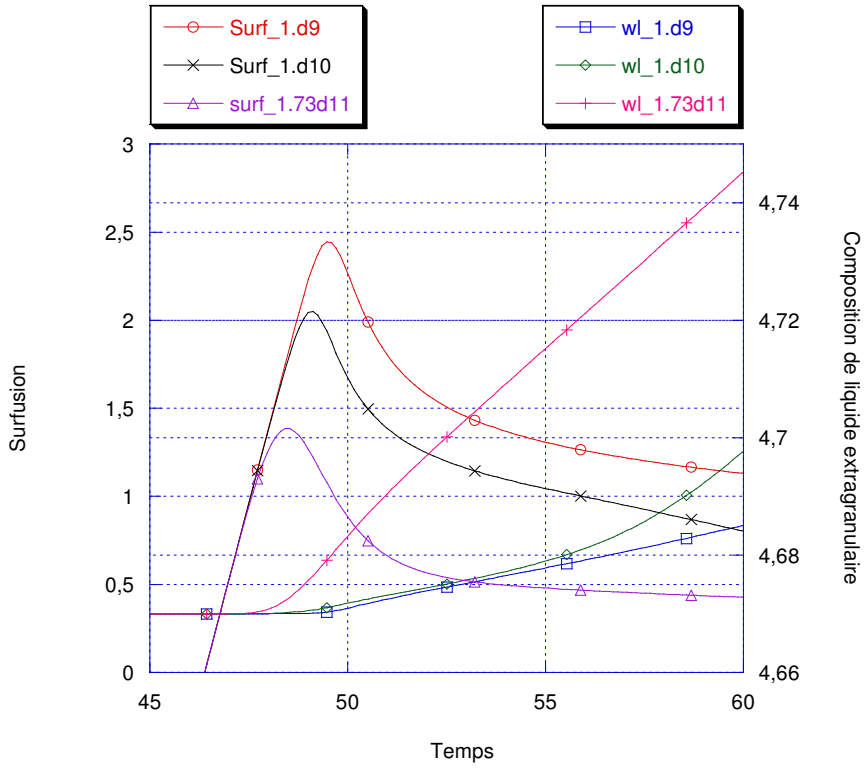


Figure III-26 : évolution de la surfusion et de la composition du liquide extragranulaire en fonction du temps.

On retrouve ainsi un résultat déjà observé par B.Appolaire [App, 00], plus la densité de germe est importante et plus les grains à thermique données auront tendance à présenter une morphologie globulaire.

III.6.2.2.2 L'influence de la surfusion :

Dans cette partie nous avons adopté trois valeurs de surfusion 1, 3, et 5K. La densité et l'écart type ont été fixés respectivement à $1{,}7310^{11}$ germes.m^{-3}, et 1K.

La figure III-27 présente l'évolution de la température en fonction du temps de solidification pour les différentes valeurs de la surfusion. Les courbes de température à cette échelle sont confondues. Pour les distinguer, nous avons tracé sur la figure III-28 l'évolution de la température autour du liquidus.

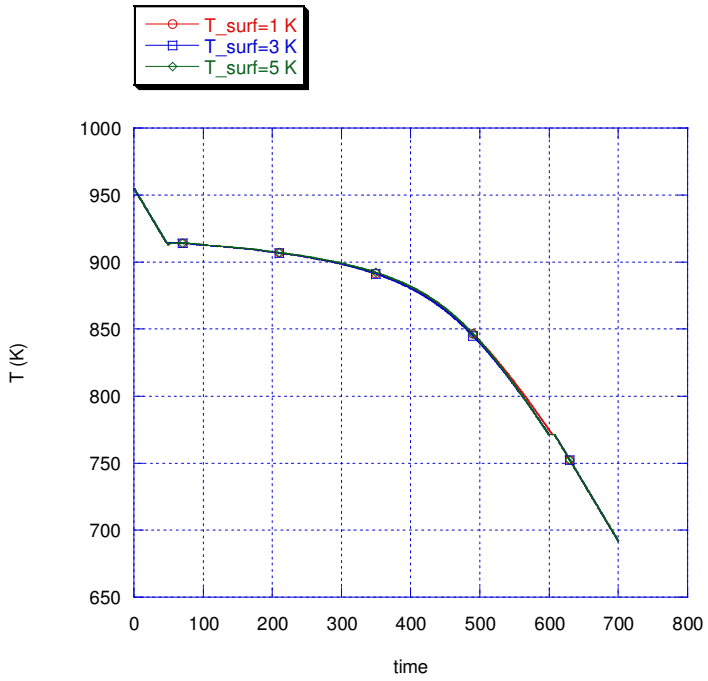


Figure III-27 : évolution de la température en fonction du temps, pour les trois valeurs de surfusions utilisées.

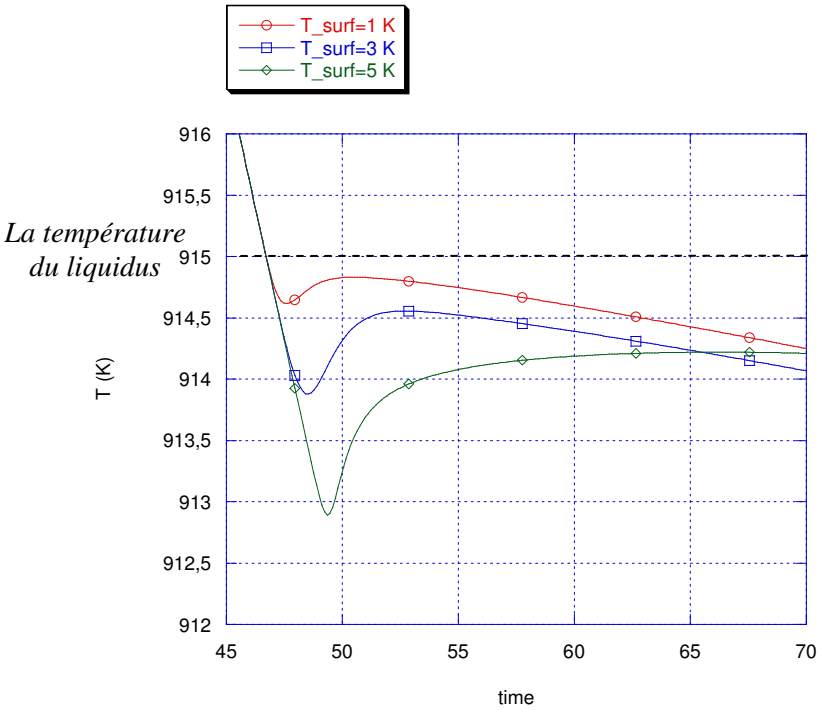


Figure III-28 : évolution de la température en fonction du temps autour du liquidus, pour les trois valeurs de surfusions utilisées.

D'après la figure III-28 nous observons une recalescence qui devient plus profonde lorsqu'on augmente la surfusion. Nous avons tracé sur la figure III-29 l'évolution de la densité de grains pour les trois valeurs de surfusion. Cette figure montre que lorsque la surfusion augmente la densité finale de grains diminue. Le tableau III-6 présente la densité finale de grains totale activée et le temps de leur activation :

Surfusion (K)	**1**	**3**	**5**
t_{surf} (s)	47,36	48,41	49,22
Temps d'injection (t_{inj} en s)	1,06	1,94	2,05
Densité de grains finale (germes.m^{-3})	$3,5\ 10^{10}$	$1,006\ 10^{10}$	$8\ 10^{8}$

Tableau III-6 : les différentes valeurs obtenues pour l'étude de sensibilité en fonction de la surfusion.

Nous avons tracé sur la figure III-30 l'évolution du diamètre de grains équivalent obtenue pour les différentes valeurs de surfusion. Cette figure confirme que lorsque la surfusion augmente, la densité de germes activés diminue, par conséquent le diamètre équivalent moyen de grain augmente.

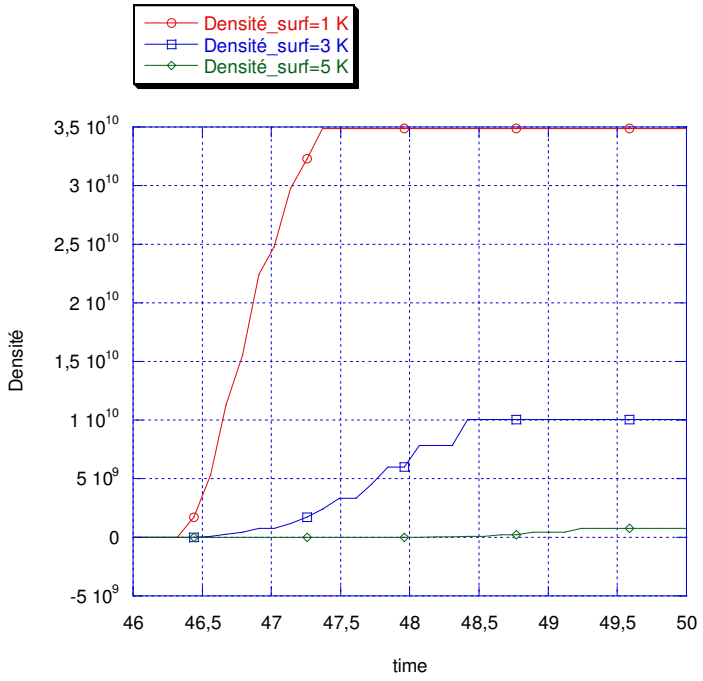


Figure III-29 : évolution de la densité de germes activée en fonction du temps, pour les trois valeurs de surfusions.

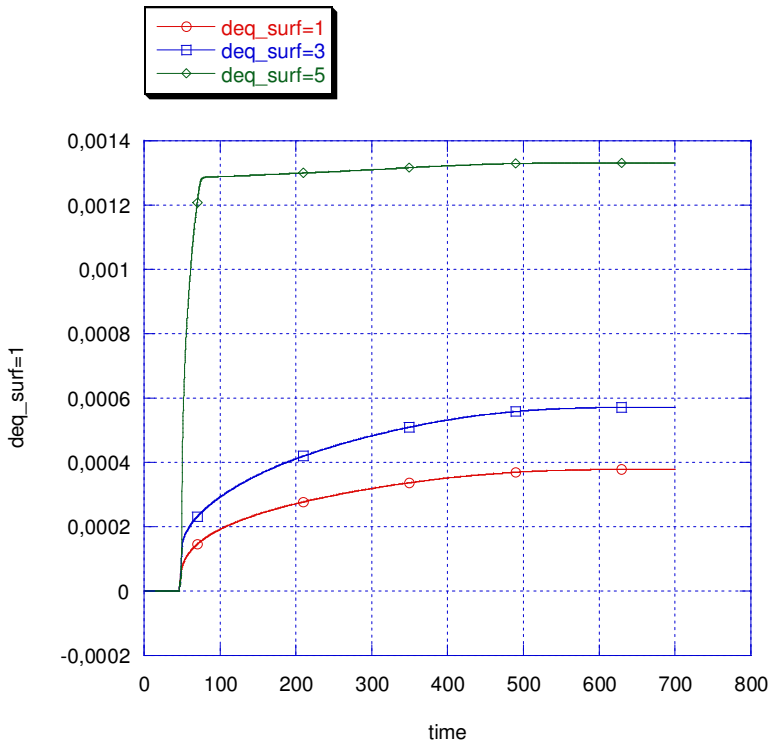


Figure III-30 : évolution du diamètre en fonction du temps pour différentes valeurs de surfusions.

Les valeurs de la densité totale des grains activée présentées dans le tableau III montre que la densité maximale de germes possibles (égale à 1,73 10^{11} grains.m^{-3}) n'a pas été injectée. Nous allons essayer de savoir ce qui a pu bloquer la germination.

Sur la figure III-31 nous avons présenté l'évolution de la fraction liquide extragranulaire correspondante aux trois valeurs de la surfusion adoptées. Sur cette figure nous observons que la fraction liquide extragranulaire a atteint la valeur seuil après l'arrêt de la germination. Ceci peut être traduit par : l'arrêt de l'injection des nouveaux germes n'a pas été dû au fait que les grains se touchent.

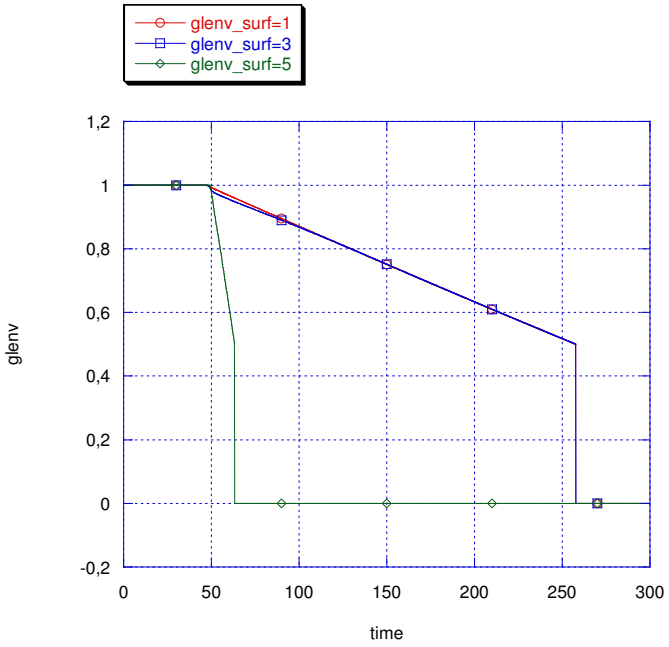


Figure III-31 : évolution de la fraction liquide extragranulaire en fonction du temps pour différentes valeurs de surfusions.

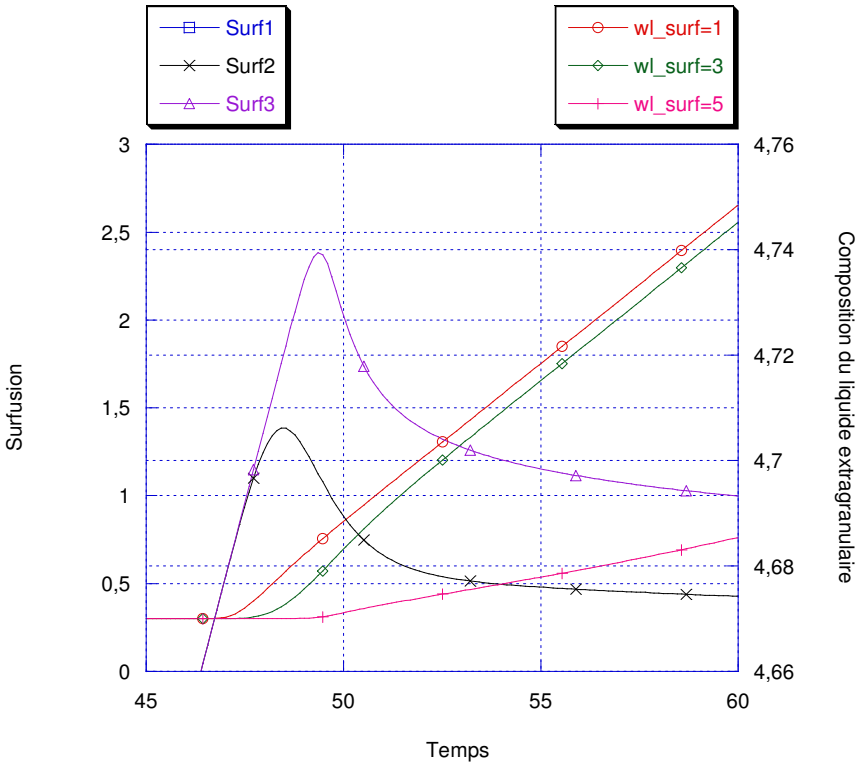


Figure III-32 : évolution de la surfusion et de la composition du liquide extragranulaire en fonction du temps.

D'autre part, sur la figure III-31, nous avons tracé l'évolution de la surfusion et de la composition en fonction du temps. Cette figure montre que lorsque le liquide extragranulaire commence à s'enrichir en soluté, la surfusion est limitée et l'activation de nouveaux germes est arrêtée.

Afin de déterminer la morphologie des grains, nous avons présenté les informations nécessaires dans le tableau III-6 pour les trois valeurs de la surfusion :

Surfusion (K)	**1**	**3**	**5**
$\mathbf{g_{ipack}}$	1	1	$0{,}72.10^{-1}$
Densité finale (grains.m^{-3})	$3{,}49.10^{10}$	1.10^{10}	8.10^{8}
Diamètre moyen final (μm)	378,7	571	1330
L'écart type sur le diamètre moyen (μm)	0.363	3.28	54

Tableau III-6 : les résultats obtenus pour différentes valeurs de surfusions.

D'après le tableau, on déduit que les grains ont une morphologie :

- Globulaire, lorsque la surfusion est égale à 1 et 3K ;
- Dendritique lorsque la surfusion est égale à 5K.

Pour les deux valeurs de surfusion, où nous avons obtenu des grains globulaires, l'écart type sur le diamètre équivalent moyen est très faible. On note que cet écart type devient plus important lorsque l'on obtient des grains de morphologie dendritique. Si la fraction de solide interne est égale à un à la fin de l'étape de germination, le rayon des grains est petit par rapport au rayon final ce qui n'est pas le cas pour les grains dendritiques.

III.6.2.2.3. L'influence de l'écart type :

Nous avons étudié deux paramètres essentiels dans la loi de distribution gaussienne. Dans cette partie, nous allons étudier l'influence de l'écart type sur la distribution de la taille moyenne finale des grains. Pour cela, nous avons fixé la surfusion à 3K, la densité à $1{,}73.10^{11}$, et nous avons adopté trois valeurs d'écart type : 0,1, 0,5, et 1K.

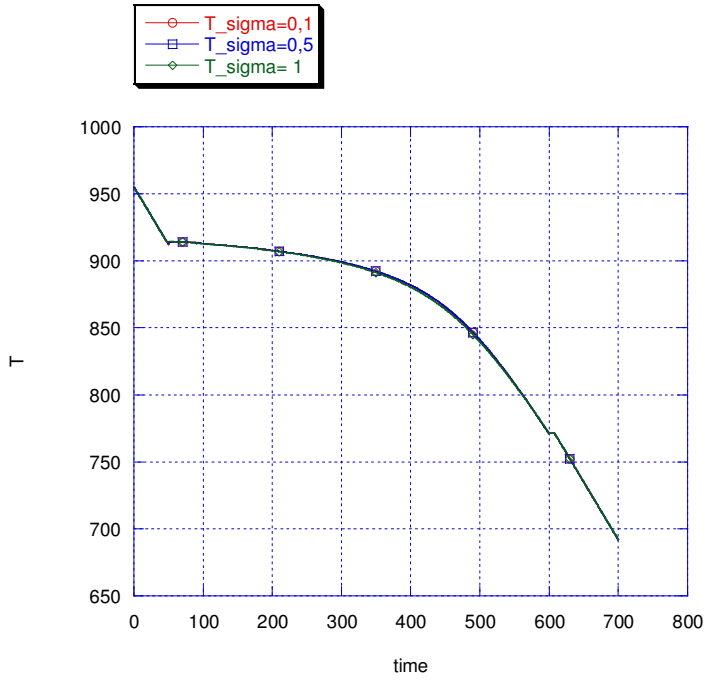


Figure III-32 : évolution de la température en fonction du temps, pour les trois valeurs de l'écart type adoptées.

La figure III-32 présente l'évolution de la température pour les trois valeurs de l'écart type. Les trois courbes sont à nouveaux confondues à cette échelle. Nous avons tracé sur la figure III-33 l'évolution de la température pour les trois valeurs de l'écart type autour de la température de liquidus. D'après cette figure, nous observons que lorsque l'écart type augmente, la surfusion maximale est moins importante.

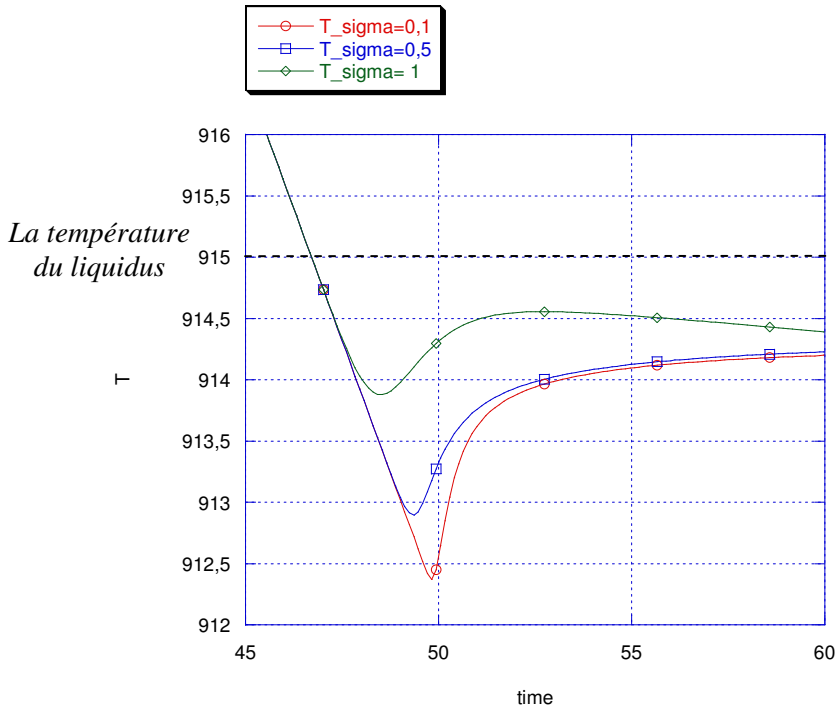


Figure III-33 : évolution de la température en fonction du temps autour du liquidus, pour les trois valeurs de l'écart type adoptées.

Sur la figure III-34 nous avons tracé l'évolution de la densité de germes activés en fonction du temps. Cette figure montre que lorsque l'écart type augmente, la densité de germes activés diminue ce qui explique l'augmentation de température obtenue autour du liquidus. D'autre part, nous observons sur cette figure que la densité totale de germes potentiels n'a pas été activée.

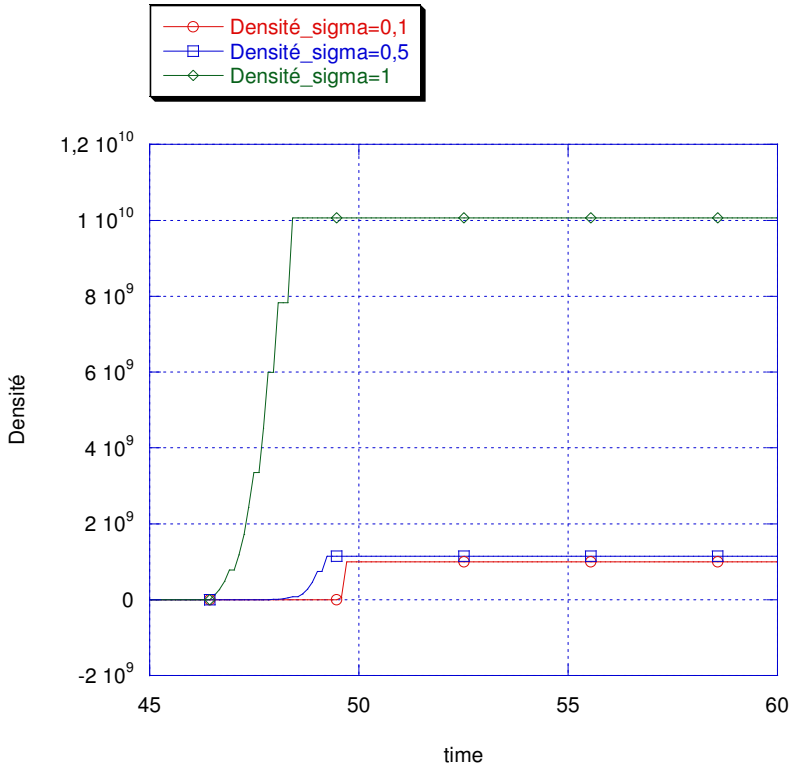


Figure III-34 : évolution de la densité de germes activés, pour les trois valeurs de l'écart type.

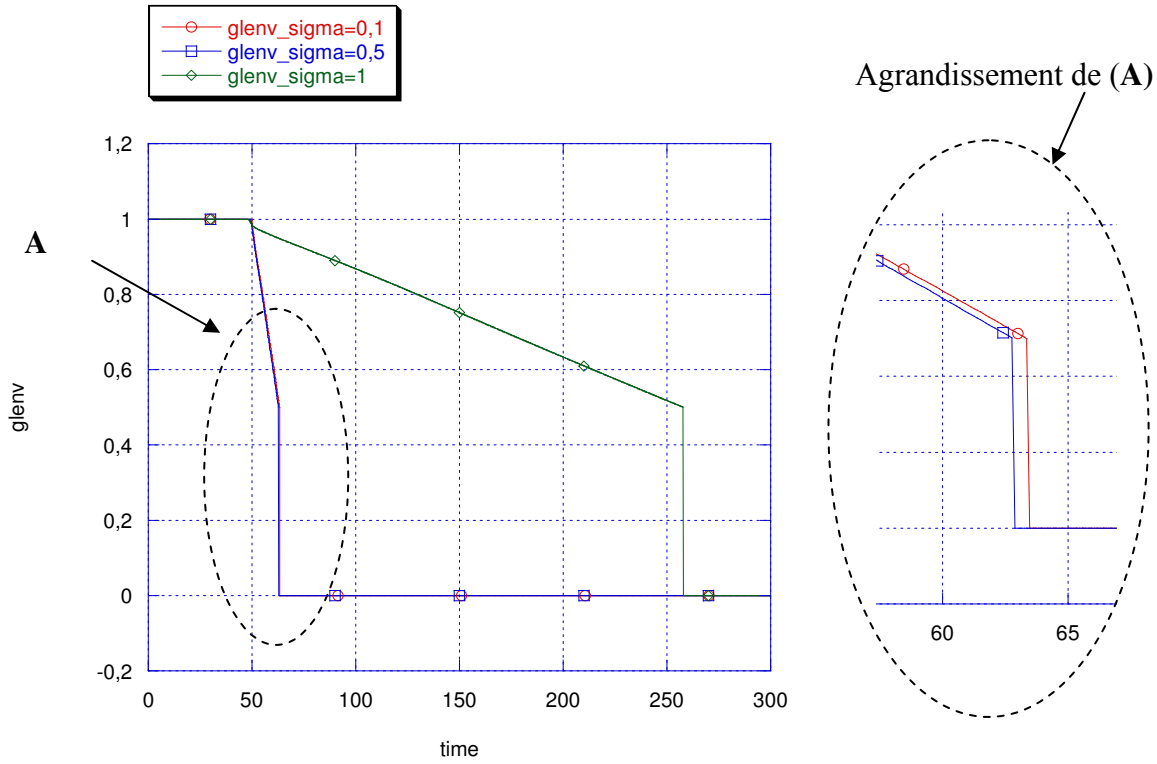


Figure III-35 : évolution de la fraction du liquide extragranulaire en fonction du temps, pour les trois valeurs de l'écart type.

La figure III-35 présente l'évolution de la fraction liquide extragranulaire en fonction du temps pour les trois valeurs de l'écart type. D'après cette figure, nous observons que la valeur de cette fraction passe en dessous de la valeur seuil à l'instant 62,77 s, 63,33 s et à 257,5 s correspondant respectivement à un écart type de 0,1, 0,5 et 1. D'autre part, l'activation des nouveaux germes a été arrêtée pour les trois valeurs de l'écart type (0,1, 0,5 et 1) respectivement à 49,7 s, 49,27 s, et 48,42 s. D'après ces résultats nous déduisons que l'arrêt de l'activation des nouveaux germes n'a encore pas été liée au fait que les grains se touchent.

Sur la figure III-36 nous avons tracé l'évolution de la surfusion et de la composition du liquide extragranulaire en fonction du temps. Cette figure montre que l'arrêt de l'activation de nouveaux germes a été à nouveau dû à la limitation de la surfusion.

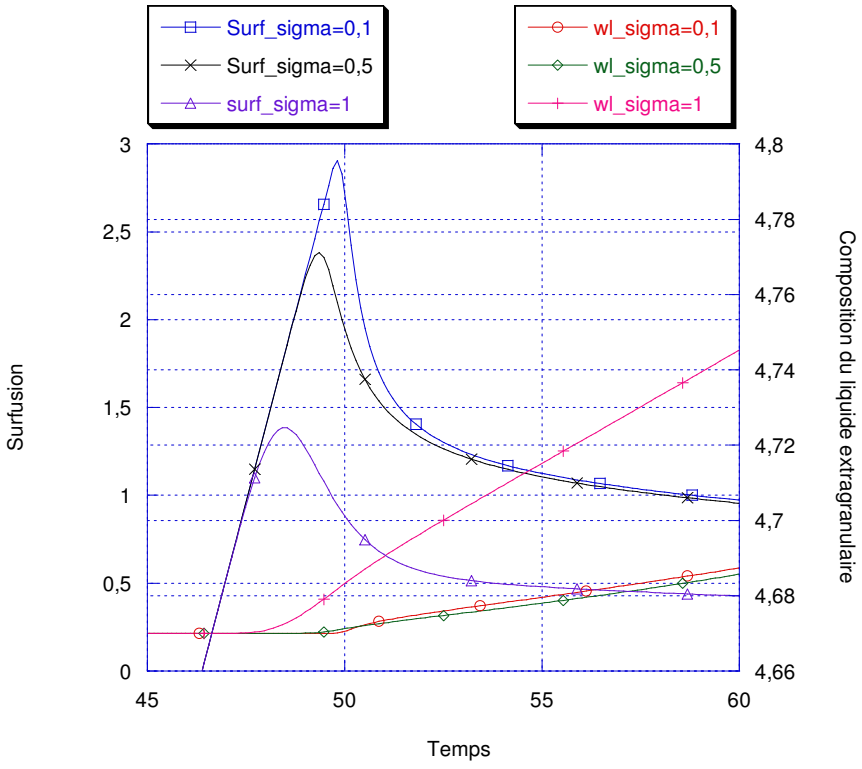


Figure III-36 : évolution de la surfusion et de la composition de liquide extragranulaire en fonction du temps.

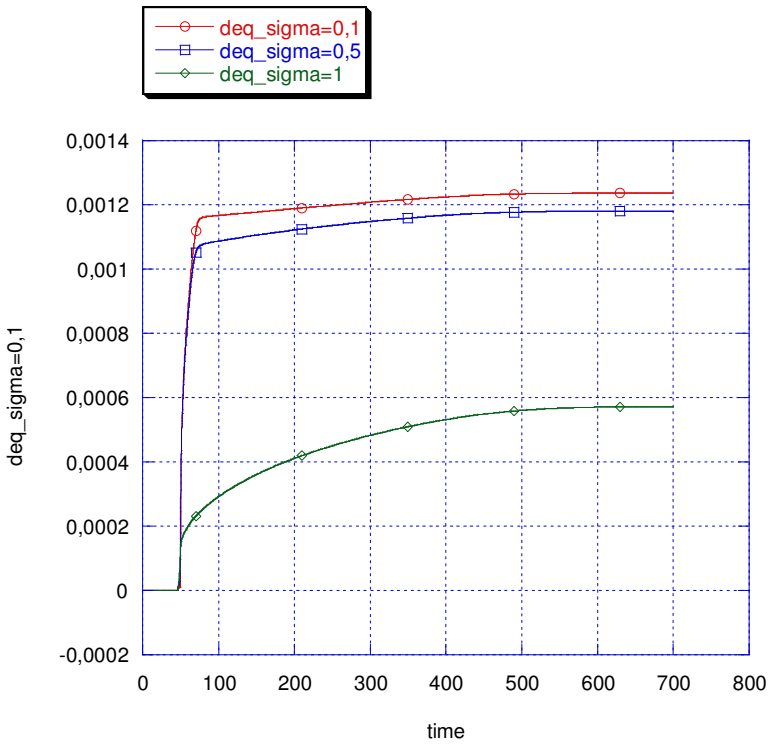


Figure III-37 : l'évolution du diamètre en fonction du temps pour différentes valeurs de l'écart type.

La figure III-37 présente l'évolution du diamètre équivalent moyen pour les trois valeurs de l'écart type. D'après cette figure nous observons que le diamètre décroît lorsque l'écart type croît.

La morphologie des grains est :

- Globulaire lorsque l'écart type est de 1 ;
- Dendritique pour les deux autres valeurs adoptées de l'écart type 0,1, et 0,5.

L'écart type	**0,1**	**0,5**	**1**
g_{ipack}	$0{,}61.10^{-1}$	$0{,}68.10^{-1}$	1
Densité finale (grains.m^{-3})	1.10^{9}	$1{,}15.10^{9}$	1.10^{10}
Diamètre moyen (µm)	1237	1181	571
L'écart type du diamètre moyen (µm)	11,6	5,55	3,28
Das (µm)	192	194	Non calculé

Tableau III-7 : les résultats obtenus pour différentes valeurs de l'écart type.

Le tableau III-7 présente les différentes informations obtenues, afin de déterminer l'influence de l'écart type sur la distribution de la taille moyenne finale des groupes de grains équiaxes possédant les mêmes caractéristiques. Sur ce tableau, nous observons que le Das moyen pour les deux premiers cas (lorsque l'écart type est égale à 0,1 et 0,5) est presque le même. La densité finale des grains pour ces deux cas est la même avec une différence de 0,15 10^9 grains.m^{-3}. Ces grains ont été activés dans un intervalle de temps de 0,43s pour un temps total de solidification de 700s ce qui explique les valeurs de DAS obtenues.

D'après cette étude, nous déduisons qu'en appliquant la loi gaussienne, et en étudiant l'influence de l'ajustement des paramètres qui la définissent nous obtenons les résultats suivant :

- Pour les cas étudiés, la surfusion est maximale au moment du début de la recalescence. C'est le facteur qui détermine le nombre de germes activés;
- Lorsque la densité moyenne des grains croît, la densité des germes activée croît aussi, et les grains ont tendance à être globulaire ;
- Lorsque la surfusion moyenne augmente, la densité de germes activée diminue, d'où les grains ont une morphologie dendritique ;
- Finalement, lorsque l'écart type augmente, la densité de germes activée augmente, les grains ont une morphologie globulaire.

III.6.2.3. Etude de l'injection de fragments :

Dans les paragraphes précédents, nous étudié les deux lois de distribution de germes : gaussienne et Greer. Nous avons vu leur influence sur la germination, sur la croissance et sur la morphologie des grains. Dans cette partie, nous allons étudier la loi d'injection de fragments de dendrite. Cette loi consiste à injecter des fragments avec une densité de flux de fragments. Cette densité de flux est appliquée sur la paroi latérale du domaine cylindrique (figure III-6). La grosse différence par rapport aux distributions de germes utilisées précédemment provient du fait que l'on suppose que quelque soit la surfusion locale, la taille des fragments est toujours supérieure au rayon critique correspondant. Autrement dit, dès qu'il y a surfusion, les fragments sont en situation de croissance. Pour notre exemple, ces fragments idéalisent des grains qui se formeraient sur la paroi du moule et seraient entraînés par les courants de convection dans la partie centrale du lingotin. Les fragments sont injectés tant que la fraction critique du liquide extradendritique n'a pas été atteinte. Le diamètre initial des fragments n'a de rôle dans le modèle que de valeur d'initialisation pour la partie croissance.

Dans cette étude nous avons étudié l'influence de la densité de flux de fragments. Les valeurs suivantes ont été testées: $5\ 10^6$, $15\ 10^6$ et $25\ 10^6$ grains.$m^{-2}s^{-1}$. La figure III-38 présente l'évolution de la température en fonction du temps pour les trois valeurs de densité de flux de fragments. Les trois courbes sont à nouveaux confondues. Sur la figure III-39, nous avons tracé l'évolution de la température autour de la température de liquidus. Cette figure nous montre que plus on injecte des grains et moins la recalescence devient forte.

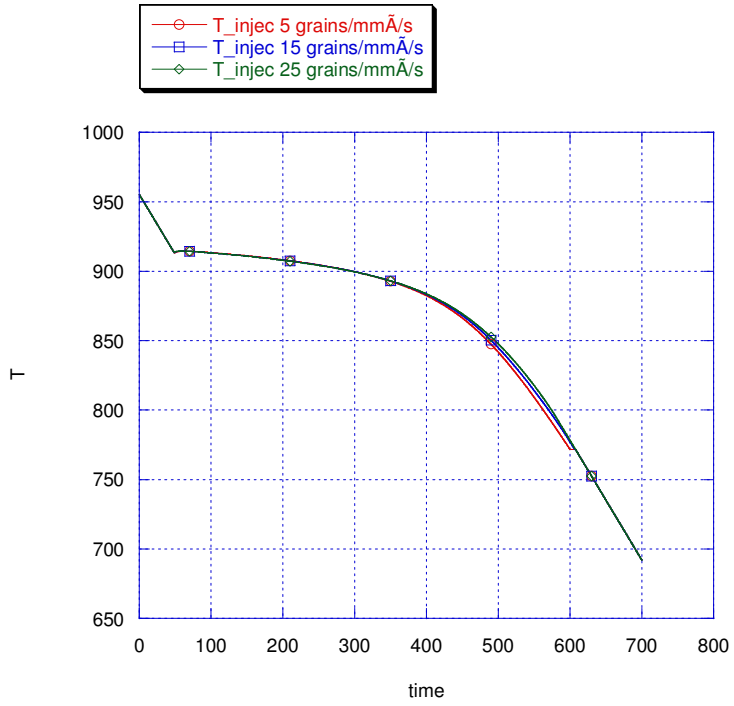


Figure III-38 : évolution de la température en fonction du temps.

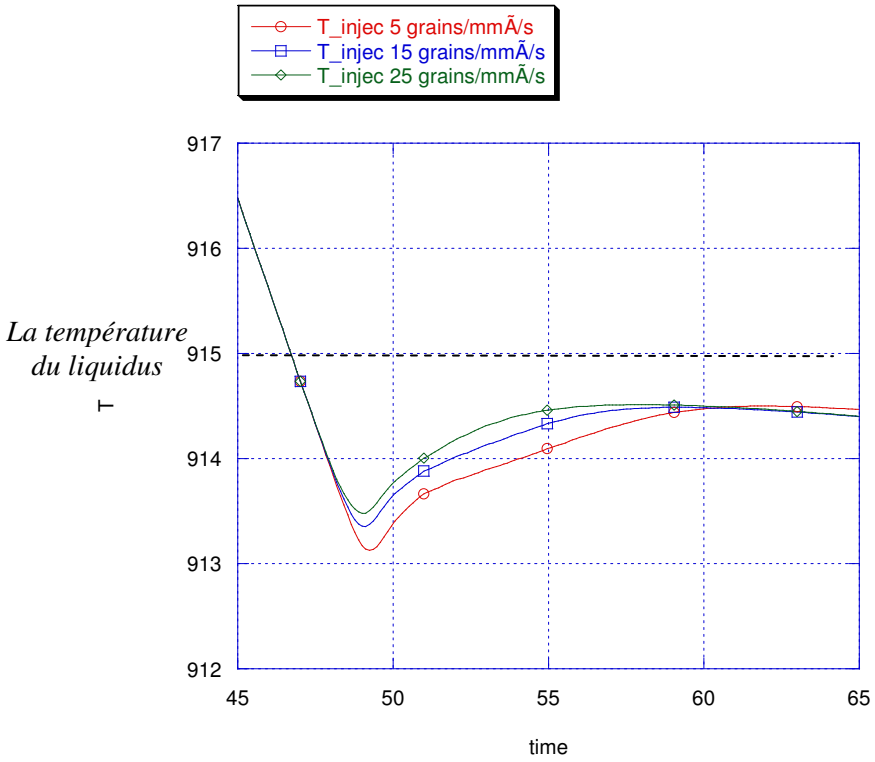


Figure III-39 : évolution de la température en fonction du temps autour du liquidus.

La figure III-40 présente l'évolution du diamètre équivalent des grains en fonction du temps. Sur cette figure, nous observons pour les cas où la densité de grains injectée sont de 15 10^6 et 25 10^6 grains.m^{-2}.s^{-1} une décroissance du diamètre équivalent (entre 50s et 200s) suivie d'une augmentation. Lorsque l'on injecte des nouveaux grains, leur diamètre étant faible, ils tendent à abaisser la taille moyenne des grains.

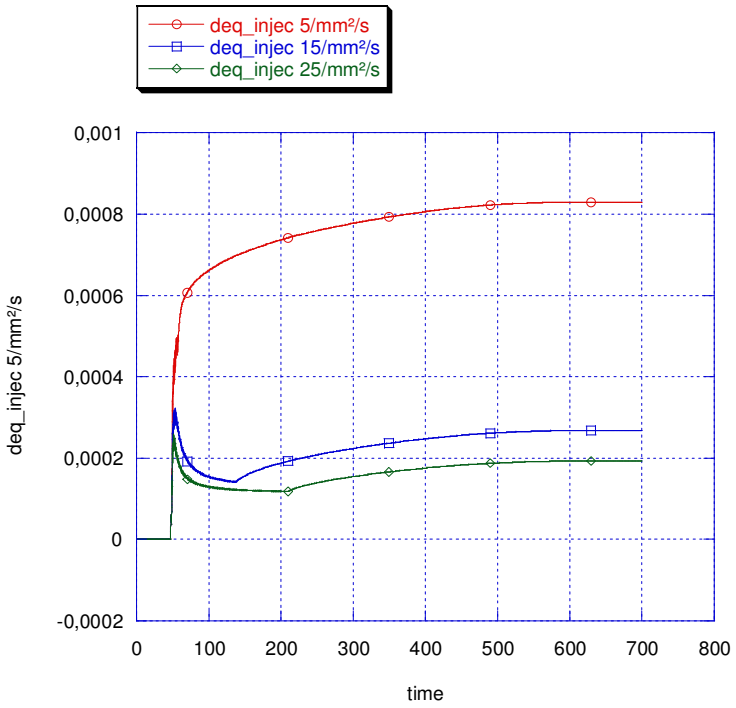


Figure III-40 : évolution du diamètre en fonction du temps (flux d'injection).

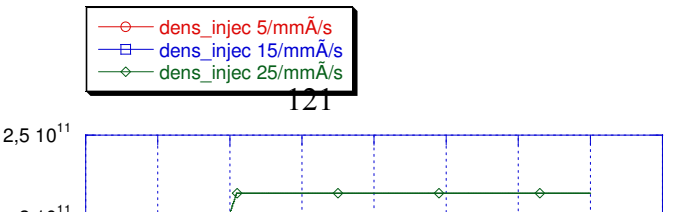


Figure III-41 : évolution de la densité en fonction du temps (méthode d'injection des particules).

La figure III-41 présente l'évolution de la densité totale des grains injectés en fonction du temps pour les trois cas étudiés. Dans le tableau III-8 nous avons résumé les différents résultats (la densité de grains, le diamètre équivalent moyen, l'écart type…) obtenus en fin de solidification :

Densité de grains injectée par m^2/s	**5**	**15**	**25**
g_{ipack}	0,26	0,97	0,99
Densité finale de grains ($grains.m^{-3}$)	$2,89.10^9$	$7,18.10^{10}$	$2,14.10^{11}$
Diamètre moyen (μm)	829,3	268	192
L'écart type du diamètre moyen (μm)	176,8	78,6	46,9
Das (μm)	160	5,35	Non calculé

Tableau III-8 : les résultats obtenus en utilisant l'injection des particules au liquidus.

Nous avons tracé respectivement sur la figure III-42 et la figure III-43 l'évolution en fonction du temps de la surfusion et la composition du liquide extragranulaire, et la fraction liquide extragranulaire pour les trois cas étudiés. Sur les figures, nous les cas numérotés 1, 2 et 3 correspondent respectivement à l'injection de fragments par m^2 et par seconde de : 5 10^6, 15 10^6, 25 10^6. D'après la figure III-42, nous observons que la surfusion a été maximale au temps 49s pour les trois cas. D'autre part, sur la figure III-41 nous observons qu'après ce temps (49s) la création de nouveaux grains ne s'est pas arrêtée (entre 57s et 200s de nouveaux grains se développent). Ceci veut dire que contrairement aux résultats précédents, la surfusion n'est pas responsable de l'arrêt de la germination.

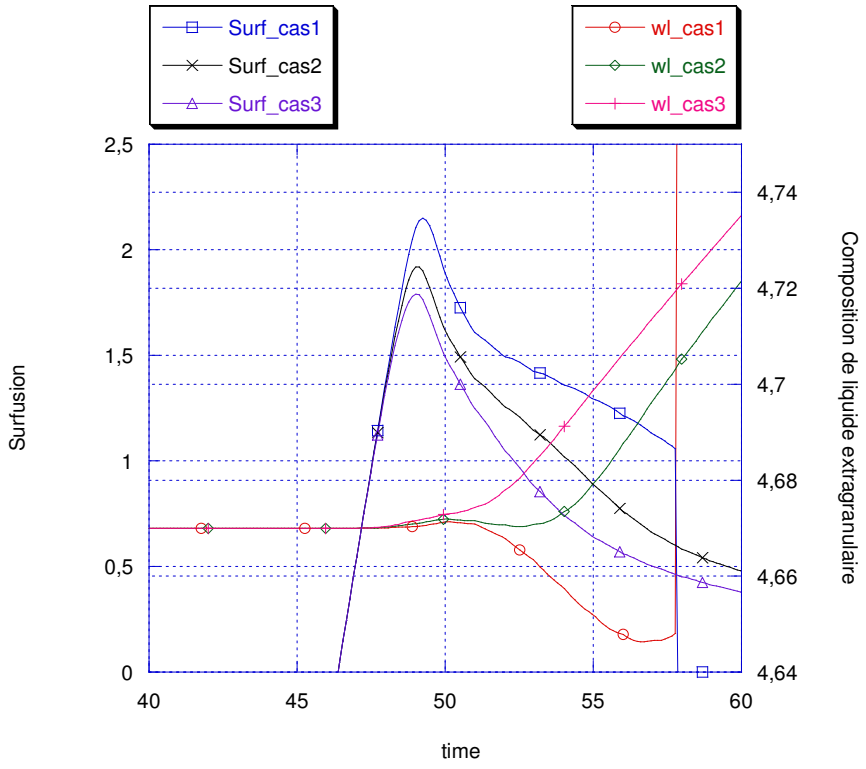


Figure III-42 : évolution de la surfusion et de la composition de liquide extragranulaire en fonction du temps.

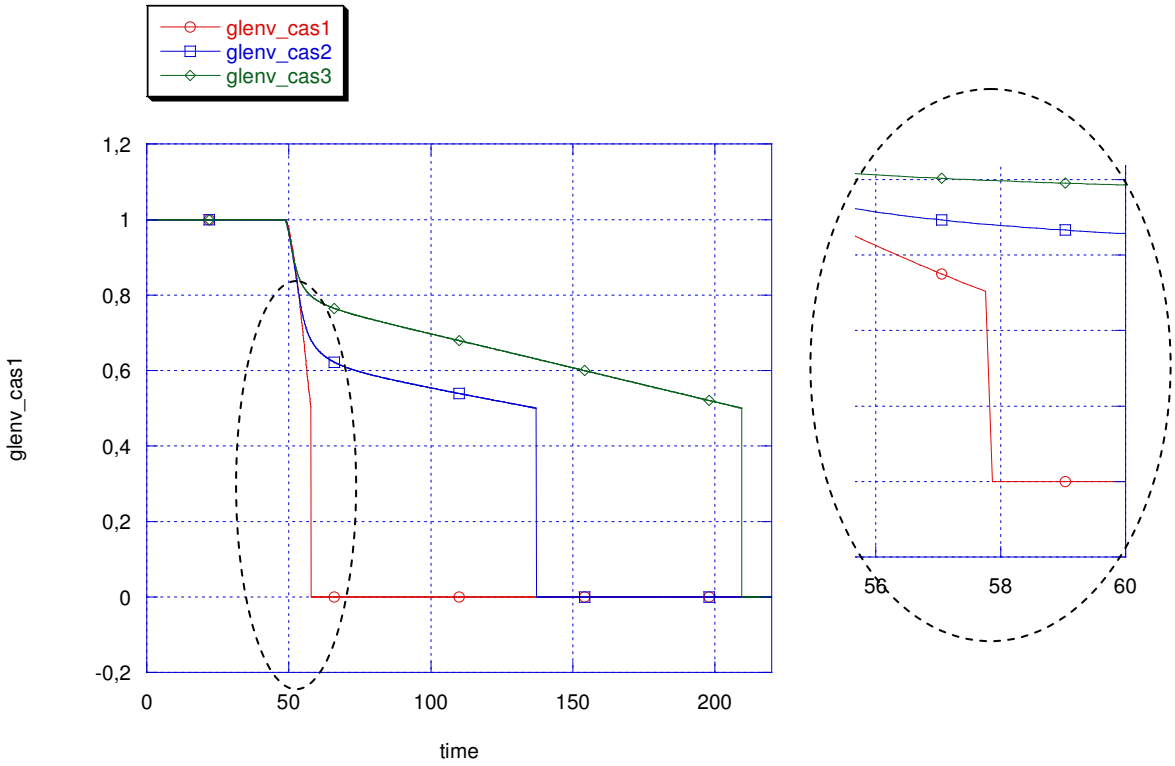


Figure III-43 : évolution de la fraction liquide extragranulaire (méthode d'injection de particules).

La morphologie des grains finale est :

- Globulaire lorsqu'on injecte 15 10^6 et 25 10^6 cristaux par m² et par seconde ;
- Dendritique lorsqu'on injecte 5 10^6 cristaux par m² et par seconde.

D'après le tableau III-8, contrairement au cas précédent, l'écart type du diamètre moyen équivalent est assez important. Ceci est dû au fait que l'injection de grains a été réalisé pendant 200s pour un temps de solidification de 700s.

Nous allons maintenant étudier le couplage entre la loi de Greer et l'injection de fragments.

III.6.2.4. Couplage entre la loi de Greer et l'injection des particules :

Afin d'étudier l'influence du couplage entre l'injection de fragments et la germination hétérogène, nous avons couplé la loi de germination de Greer et l'injection de fragments en cours de la solidification. La densité de flux de fragments injectés est de 5 10^6 grains/m²/s. La

figure III-45 présente une comparaison de l'évolution du diamètre équivalent moyen de grains en fonction du temps, pour la loi de germination de Greer, l'injection seule, et Greer avec injection des fragments.

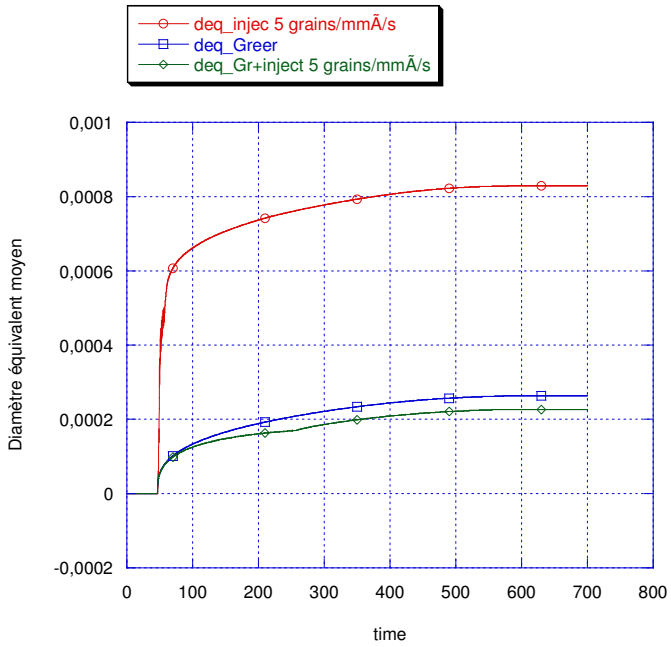


Figure III-45 : comparaison de l'évolution du diamètre en fonction du temps entre la méthode de Greer et Greer avec injection.

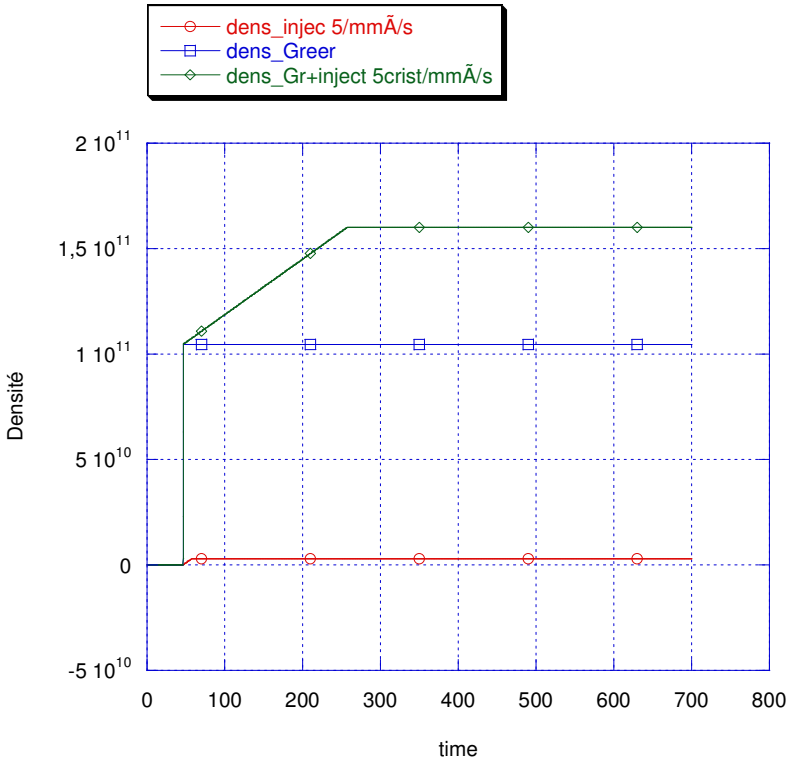


Figure III-46 : évolution de la densité de grains activés en fonction du temps.

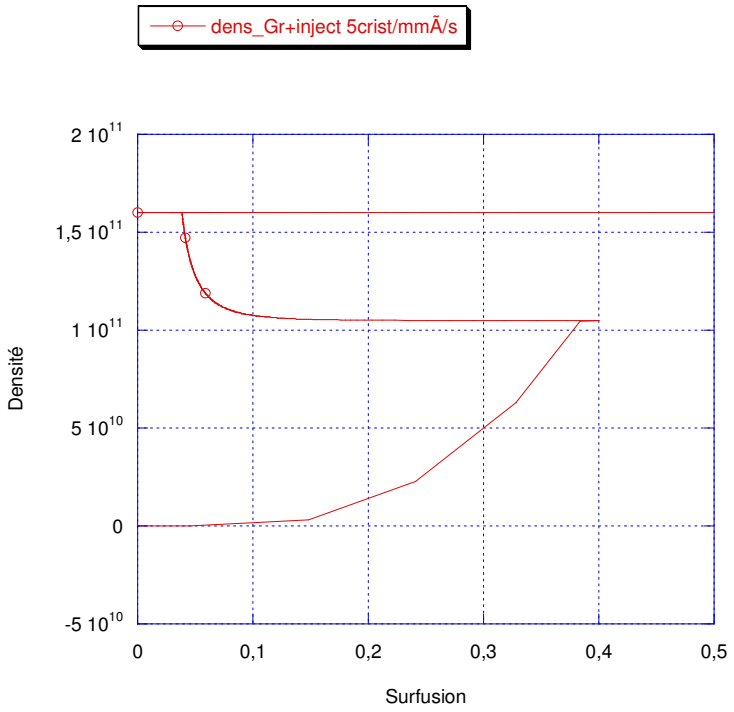


Figure III-47 : évolution de la densité de grains activés en fonction de la surfusion.

Sur la figure III-46, nous avons tracé, l'évolution de la densité en fonction du temps pour les trois cas :

- Injection seule de 10^6 grains.m^{-2}.s^{-1} ;
- La distribution de Greer ;
- Couplage entre la distribution de Greer et l'injection des grains.

Lorsqu'on prend en compte l'injection de fragments en plus de la loi de Greer, la densité de grain finale augmente.

Nous avons vu précédemment, que la création des nouveaux germes a été arrêtée par la surfusion dans le cas de la loi de distribution de Greer, et par la fraction liquide extragranulaire lorsqu'on injecte une densité de grains de 5 10^6 grains.m^{-2}.s^{-1}. Pour savoir ce qui a arrêté la création des nouveaux germes lorsque la fragmentation est prise en compte, nous avons tracé dans la figure III-47 l'évolution de la densité de grains en fonction de la surfusion. D'après cette figure nous observons qu'au moment où la surfusion s'est limitée (figure III-48) la densité a continuée à augmenter, ce qui explique que contrairement à la loi de distribution de Greer, la création des nouveaux germes n'a pas été arrêtée par la surfusion.

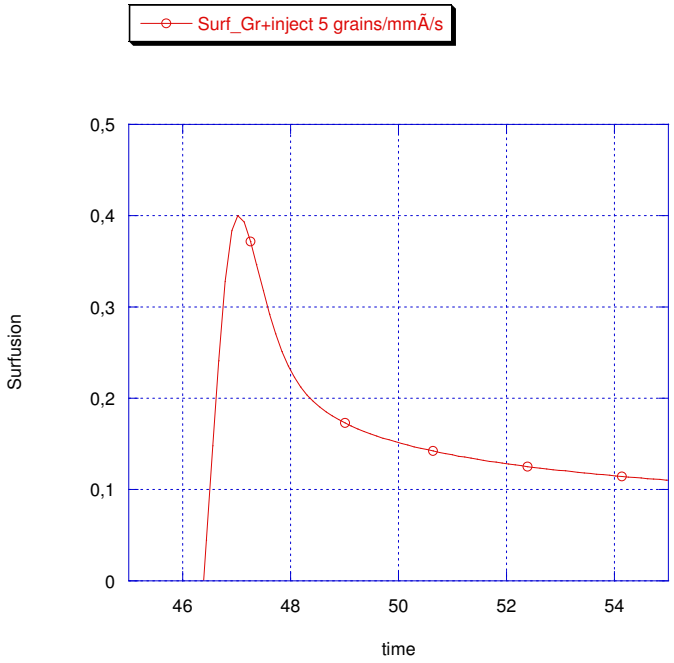


Figure III-48 : évolution de la surfusion en fonction du temps.

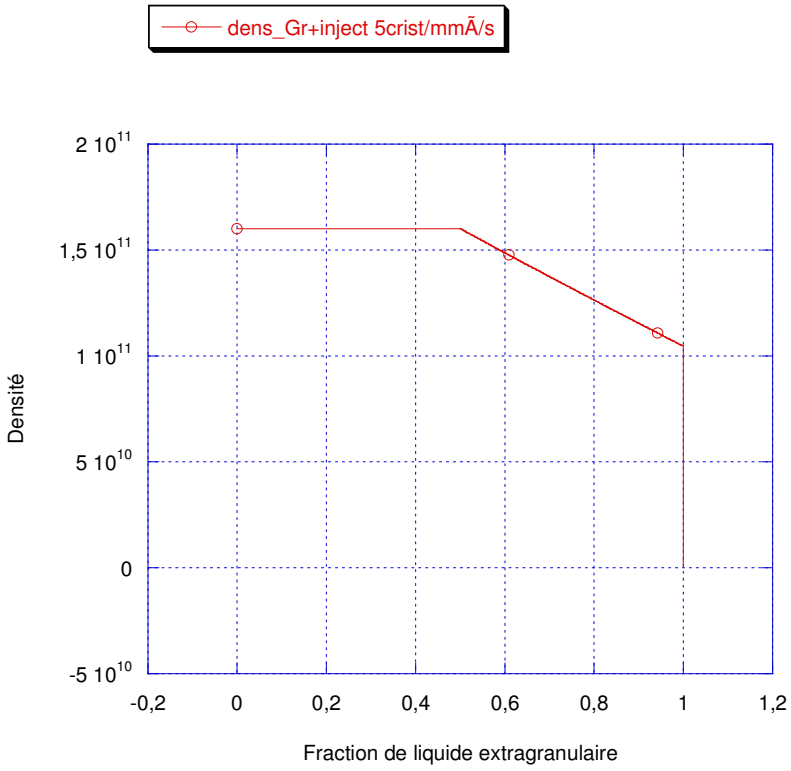


Figure III-49 : évolution de la densité de grains activés en fonction de la fraction du liquide extragranulaire.

La figure III-49 présente l'évolution de la densité de grains en fonction de la fraction liquide extragranulaire lorsque la fragmentation est prise en compte avec la loi de Greer. On note bien que de nouveaux grains se forment tant que la fraction de liquide extragranulaire est supérieure à la valeur seuil de 0,5.

Dans le tableau III-9 nous avons résumé les différents résultats (la densité de grains, le diamètre équivalent moyen, l'écart type…) obtenus en fin de solidification. D'après ce tableau, et contrairement au cas précédent, lorsque les grains présentent une morphologie globulaire et la création des nouveaux germes a été arrêtée par la surfusion (voir loi de distribution de Greer), l'écart type du diamètre moyen équivalent est significatif. Ceci est dû au fait que l'injection de la densité de grains totale a été réalisé en 200s pour un temps de solidification de 700s.

Loi de distribution	**Greer**	**Injection**	**Greer+injection**
$\mathbf{g_{ipack}}$	1	0,26	1
Densité totale (grains.m^{-3})	1,04 10^{11}	2,89.10^{9}	1,175 10^{11}
Diamètre moyen (μm)	263	829,3	226
L'écart type du diamètre moyen (μm)	0,104	176,8	21,2
Das (μm)	Non calculé	160	Non calculé

Tableau III-9 : comparaison entre les résultats obtenus en utilisant l'injection des particules au liquidus, Greer et le couplage entre les deux lois.

III.6.3. L'influence de la vitesse de refroidissement :

Nous rappelons que le domaine étudié est un cylindre de rayon R=0,038m et de hauteur h=0,1m. Dans nos études précédentes, le flux de chaleur appliqué était fixé à -46000w/m² ce qui correspond à une vitesse de refroidissement de -0,8K/s, figure III-50 :

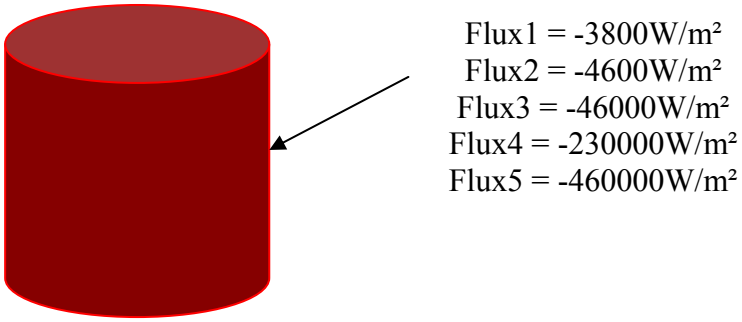


Figure III-50 : les différentes valeurs de flux adoptées.

Nous rappelons que la vitesse de refroidissement est proportionnelle au flux de chaleur appliqué. Nous allons étudier l'influence du flux sur l'évolution de la taille moyenne finale des grains. Nous avons adopté cinq valeurs de flux, figure III-50 :

- Flux1 : égale à –3,8kW/m², ce qui correspond à une vitesse de refroidissement de -6,3 10^{-2} K/s;
- Flux2 : égale à –4,6kW/m², ce qui correspond à une vitesse de refroidissement de -7,7 10^{-2} K/s;
- Flux3 : égale à -46kW/m², ce qui correspond à une vitesse de refroidissement de -0,77K/s;
- Flux4 : égale à -230kW/m², ce qui correspond à une vitesse de refroidissement de -3,8K/s;
- Flux5 : égale à -460kW/m², ce qui correspond à une vitesse de refroidissement de -7,7K/s;

La loi de germination utilisée dans cette étude est celle de Greer. La densité totale des particules est de $1,7310^{11}$ germes.m^{-3}.s^{-1}.

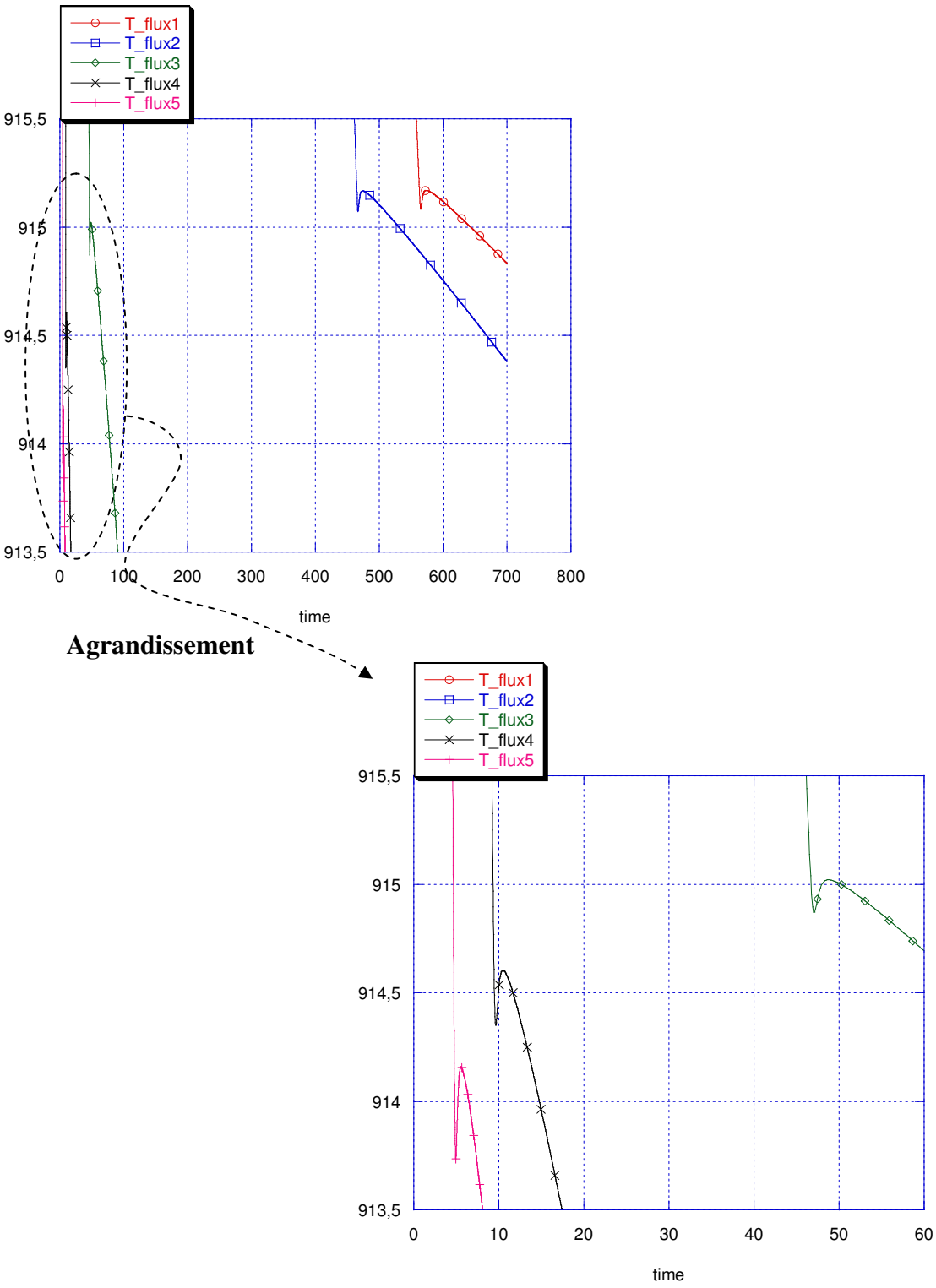


Figure III-51 : évolution de la température autour du liquidus en fonction du temps.

La figure III-51 présente l'évolution de la température autour du liquidus en fonction du temps pour les différentes valeurs de vitesse de refroidissement considérée. D'après cette figure, nous observons que lorsque la vitesse de chaleur (ou flux de chaleur) augmente, la recalescence devient plus profonde et plus large. Par ailleurs, la vitesse de croissance est plus élevée à cause de plus grandes surfusions. La figure III-52 présente l'évolution du diamètre équivalent pour les différentes valeurs de la vitesse de refroidissement.

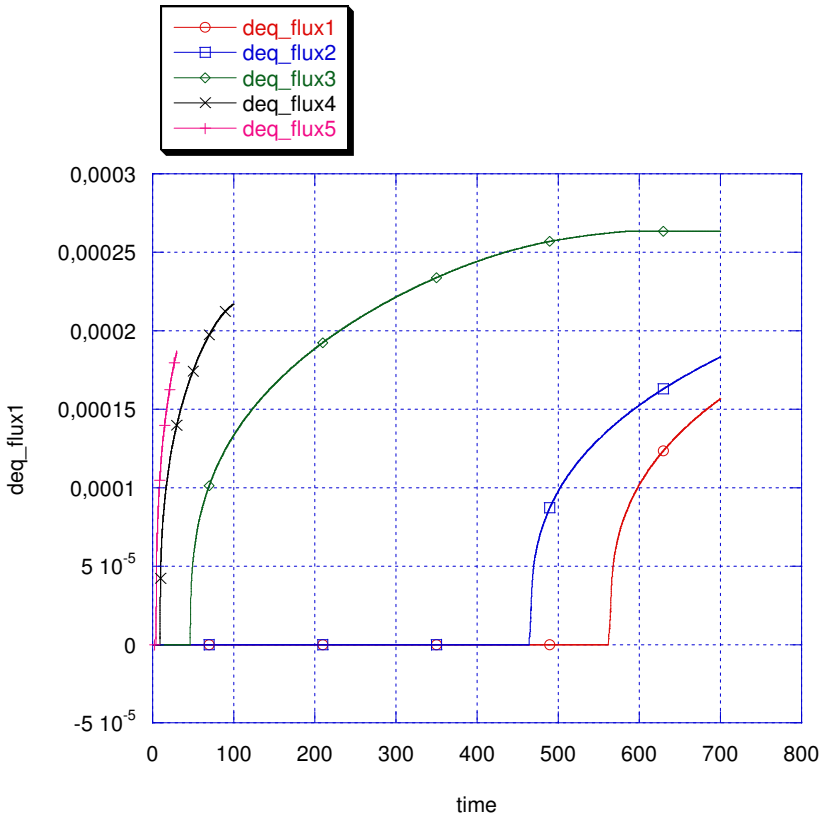


Figure III-52 : évolution du diamètre équivalent en fonction du temps pour les différentes valeurs de flux adoptées.

Lorsque la vitesse de refroidissement augmente, la densité de grains diminue, dans le tableau III-10, nous avons présenté les valeurs de la densité pour les différentes valeurs de la vitesse de refroidissement ainsi que le diamètre équivalent moyen et le temps d'injection de la densité totale des grains :

	Flux1	**Flux2**	**Flux3**	**Flux4**	**Flux5**
Densité (grains.m^{-3}.s^{-1})	5,8 10^{7}	5,9 10^{7}	1 10^{10}	1,73 10^{11}	1 10^{15}
Deq (μm)	306	267	263	221	220
L'écart type du diamètre moyen (μm)	0,48	0,46	0,11	0,05	0.04

Tableau III-10 : les résultats obtenus pour différentes valeurs de flux adoptées.

La figure III-53 présente l'évolution de la fraction du liquide extragranulaire en fonction du temps. D'après cette figure et les résultats présentés dans le tableau III-10, nous observons que pour les quatre différentes valeurs de flux de chaleur, c'est la surfusion qui arrête l'injection des nouveaux germes dû à l'enrichissement du liquide en soluté. D'autre part, le tableau III-10 nous révèle la morphologie finale des grains. Nous observons que lorsqu'on augmente la vitesse de refroidissement les grains sont globulaires et plus fins.

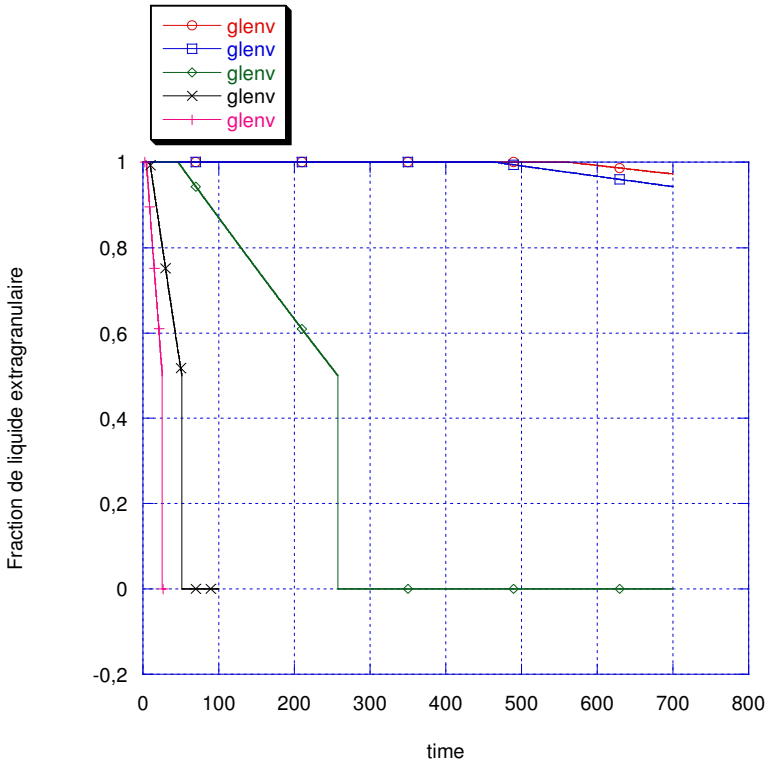


Figure III-53 : évolution de la fraction de liquide extragranulaire en fonction du temps.

III.7. Conclusion :

Dans ce chapitre nous avons décrit le principe du modèle de germination/croissance, nous avons montré comment le modèle a été étendu afin de prendre en compte la germination, et illustré l'influence de différentes lois de germination.

Pour chaque loi de distribution de germes, une étude de sensibilité a été réalisée. D'après cette étude, nous avons vu qu'en faisant varier les paramètres décrivant cette loi de distribution, le contrôle de la croissance et de la germination change (entre la limitation de la surfusion dû à l'enrichissement du liquide extragranulaire en soluté, et le passage de la fraction liquide extragranulaire en dessous d'une valeur seuil.

Le choix de la loi de distribution influence directement la taille et la morphologie des grains :

- En utilisant la loi de distribution de Greer, nous obtenons des grains globulaires ;
- En utilisant la loi de distribution gaussienne, et en fonction de l'ajustement des paramètres décrivant cette loi, la morphologie des grains peut être globulaire ou dendritique ;
- En fonction de la densité des grains injectés à la température de liquidus, les grains sont soit globulaire soit dendritique ;
- Finalement le couplage entre la loi de distribution de Greer et l'injection des grains, fait que les grains sont globulaires et plus fins. Par contre la création de nouveaux germes est contrôlée par le blocage des grains au lieu de la limitation de la surfusion observée dans le cas de distribution de Greer.

Dans ce chapitre nous avons étudié aussi l'influence de la vitesse de refroidissement sur la taille des grains finale. Plus elle augmente, plus la taille moyenne des grains est fine.

Dans le chapitre suivant, nous allons étudier l'analyse de l'hydrodynamique et de la thermique afin de bien comprendre le couplage entre le modèle décrivant le mouvement de groupes de grains et le modèle croissance/germination.

Chapitre IV : MISE EN PLACE DE CRITERE SIMPLE A PARTIR DE L'ANALYSE DE L'HYDRODYNAMIQUE ET DE LA THERMIQUE DE LA COULEE SEMI-CONTINUE POUR PREVOIR LES ZONES DE LA MACROSEGREGATION :

IV–1. Introduction :

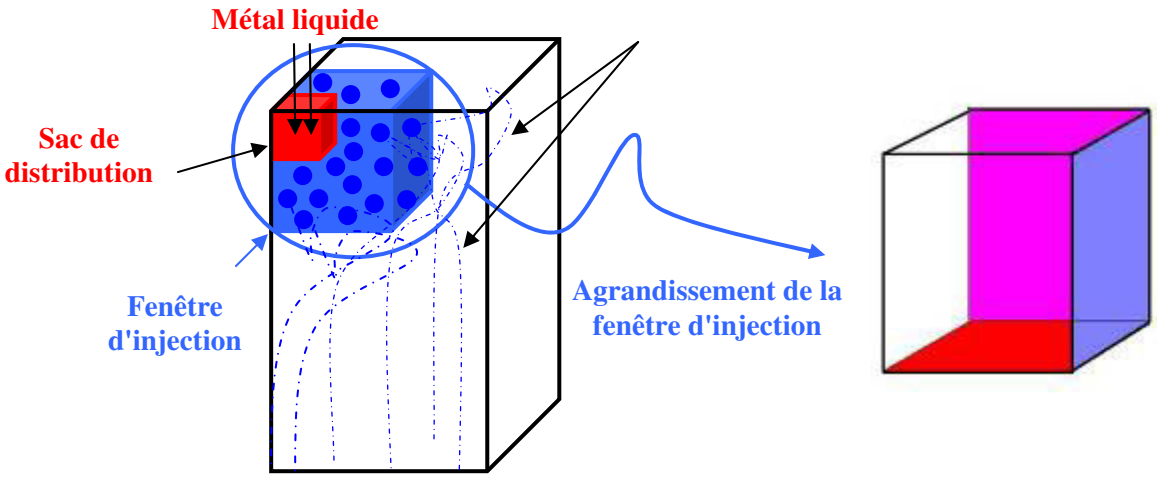
Dans notre étude bibliographique, nous avons vu que dans le cas du processus de coulée semi-continue de l'aluminium, plusieurs phénomènes se produisant sur différentes échelles, influencent la formation des macros et micro structures. Parmi ces phénomènes se trouvent le mouvement des grains à l'échelle macroscopique et leur histoire thermique. Pour cela dans ce chapitre, nous allons étudier le mouvement des particules fluides en les injectant par une fenêtre et en étudiant leur séjour afin de trouver des critères simples permettant de trouver les zones de macroségrégation et d'avoir des informations sur les tailles ou la morphologie des structures. Notamment, nous avons étudié les moyennes des informations obtenues sur le plan de sortie.

Cette étude sera composée d'une analyse hydrodynamique comprenant une description du modèle de trajectoire, et une étude de sensibilité, suivi d'une analyse thermique permettant de trouver les critères recherchés et finalement une application du modèle à quatre coulées industrielles :

- Coulée semi-continue réalisée sans sac de distribution et sans affinage ;
- Coulée semi-continue réalisée sans sac de distribution et avec affinage ;
- Coulée semi-continue réalisée avec sac de distribution et sans affinage ;
- Coulée semi-continue réalisée avec sac de distribution et avec affinage.

IV-2. Principe de l'analyse de l'hydrodynamique :

Le principe de cette analyse est d'injecter des particules fluides depuis une surface appelée « fenêtre d'injection » (figure IV- 1), puis de suivre leur mouvement. De façon à décrire le plus de trajectoires possibles la fenêtre d'injection doit entourer complètement le système d'injection du métal liquide. La fenêtre définie par la figure IV-1 est un exemple pour une plaque, en tenant compte des deux plans de symétrie. Il s'agit du cas d'utilisation le plus courant du modèle.



La face verticale 1 Sfv1 de la fenêtre d'injection ;

La face verticale 2 Sfv2 de la fenêtre d'injection ;

La face horizontale Sfh de la fenêtre d'injection.

Figure IV- 1 : schéma du mouvement des populations de grains.

La figure IV -1 présente le schéma de principe du modèle. L'organigramme (figure IV -2) présente le principe de la partie modèle de trajectoire.

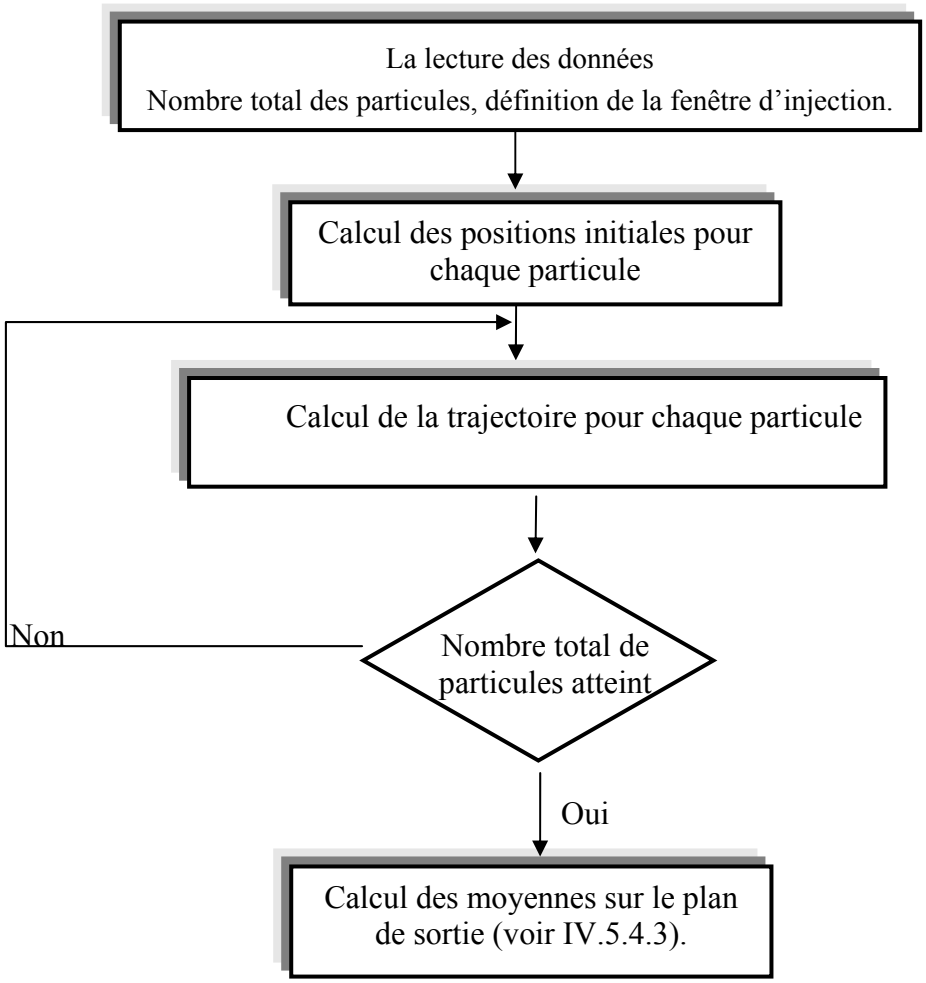


Figure IV-2 : organigramme présentant le principe du modèle de mouvement.

IV–2.1. Système d'injection :

D’après le principe du modèle de trajectoire, les particules sont injectées suivant deux méthodes. La première consiste à injecter les particules aléatoirement dans la fenêtre d'injection, la deuxième consiste à améliorer la première méthode en prenant en compte le débit qui traverse chaque face de la fenêtre d'injection.

IV–2.1.1. Système aléatoire :

Après avoir défini les dimensions de la fenêtre d'injection, on calcule la probabilité pour qu'une particule donnée quitte une face donnée. Cette probabilité est une fonction de la dimension des faces d'injections, et du nombre total des particules injectées. La relation suivante résume le calcul de la probabilité :

$$ph = \frac{Sh}{\sum S}$$
$$pv1 = \frac{Sv1}{\sum S} \qquad \text{(IV-1)}$$
$$pv2 = \frac{Sv2}{\sum S}$$

Avec :

- ph est la probabilité pour que la particule quitte la surface horizontale Sh (figure IV-1) ;
- pv1 est la probabilité pour que la particule quitte la surface verticale 1 Sv1 (figure IV-1) ;
- pv2 est la probabilité pour que la particule quitte la surface verticale 2 Sv2 (figure IV-1) ;
- S représente les surfaces des faces de la fenêtre d’injection $S = Sh + Sv1 + Sv2$.

Les probabilités sont calculées en fonction de la symétrie utilisée dans le calcul (soit double symétrie, soit une seule symétrie ou bien pas de symétrie). Dans l’exemple présenté sur la figure IV-1, il s’agit d’une double symétrie. Aucune particule ne traverse les plans de symétrie. Pour cela, nous avons présenté sur la figure IV-1 trois faces d’injection Sh, Sv1 et Sv2.

IV–2.1.2. Injection pondérée par le débit :

Le mode d'injection envisagé ci-dessus ne prend pas en compte les différences de vitesse du fluide. Pour cela, nous avons imaginé un autre principe, la fenêtre d'injection est maillée. Les particules sont injectées en fonction du débit local à travers la maille suivant une probabilité locale de départ. La figure IV-4 présente le schéma du maillage effectué dans la fenêtre en se basant sur l'exemple présenté dans la figure IV-1.

D'après la figure IV-4, on voit la nécessité de définir la dimension de la fenêtre d'injection suivant les trois directions, pour le cas d'un calcul 3D cartésien. Le maillage se fait suivant le principe décrit dans l'organigramme de figure IV-3 :

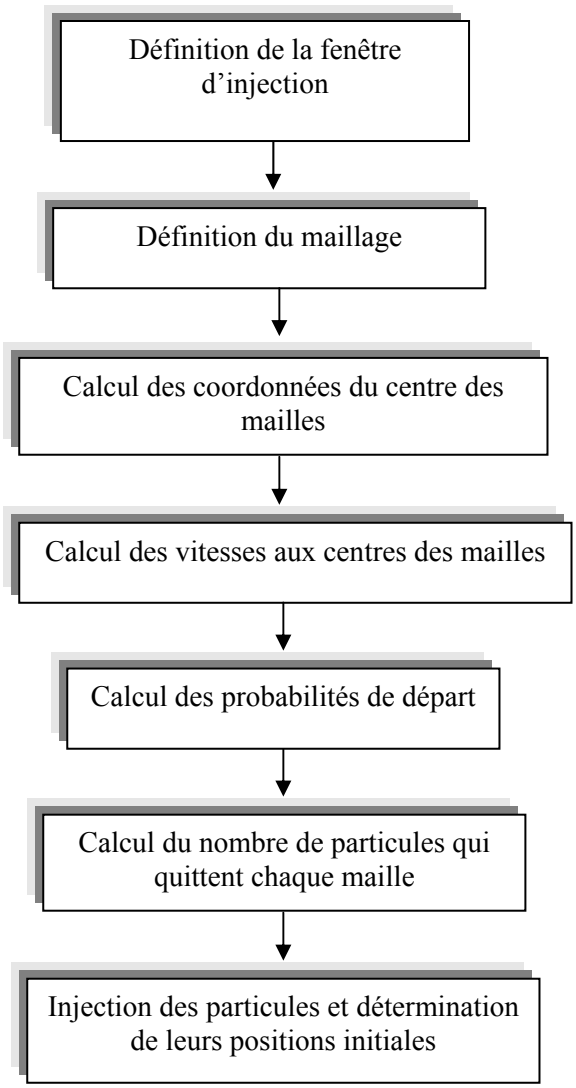


Figure IV-3 : organigramme de la méthode de maillage de la fenêtre d'injection.

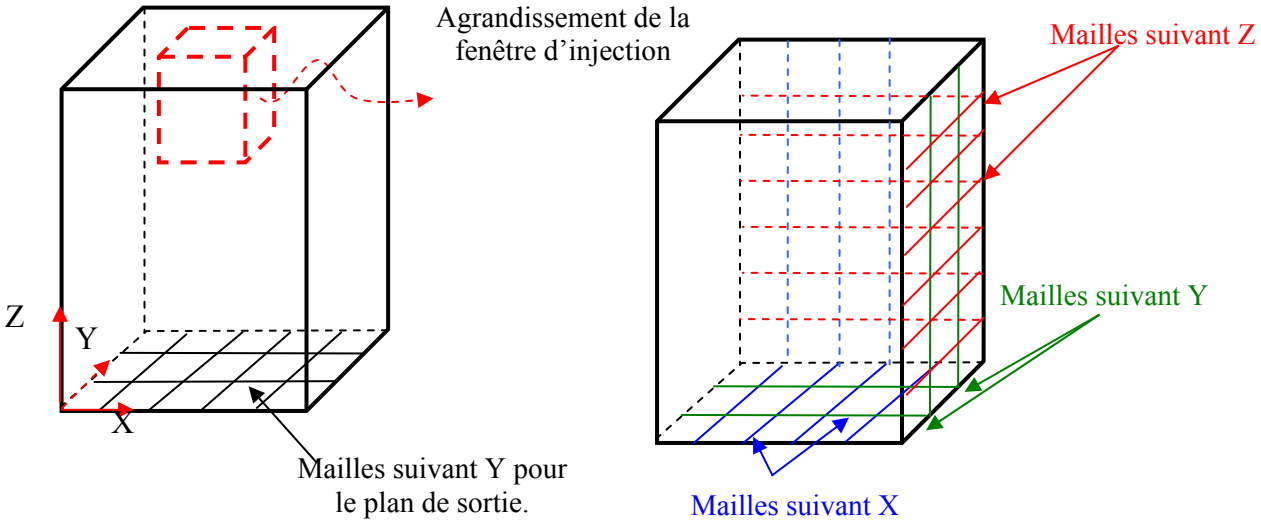


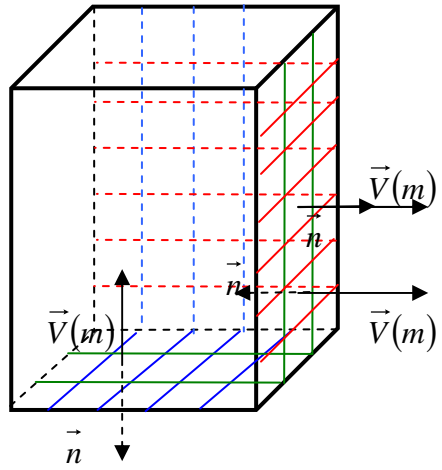
Figure IV- 4 : description du maillage utilisé dans la fenêtre d'injection et sur le plan de sortie.

Notre modèle ne traite pas que le cas d'un calcul cartésien en 3D, mais il traite aussi deux autres cas qui sont : le 2D cartésien et le 2D axisymétrique. Le maillage effectué dans les deux cas respectivement : 2D cartésien et 2D axisymétrique sont présentés schématiquement dans l'annexe II.

IV–2.1.3. Calcul des coordonnées et de la probabilité de départ :

Le calcul des coordonnées des centres des mailles sert à calculer la vitesse à cette position. Cette dernière nous aide à calculer le débit du métal liquide traversant chaque maille. L'injection des particules se calcule en fonction de la probabilité de départ (calculée en fonction du débit traversant chaque maille). Son calcul est détaillé dans l'annexe II.

Après avoir défini le maillage de la fenêtre d'entrée, on calcule la probabilité de départ pour qu'une particule donnée puisse quitter une maille donnée. Cette probabilité se calcule en fonction de la vitesse du liquide dans cette maille. La figure IV-5 présente le schéma du calcul de la vitesse au centre de la maille et du débit total traversant les mailles.



$$mtot = \sum_{k=1}^{m} \vec{V}(k).\vec{n}S(k)$$

Avec :

m est le nombre total de maille dans la fenêtre d'injection.

Figure IV-5 : schéma présentant les mailles et la vitesse au centre des mailles.

La probabilité pour qu'une particule donnée puisse quitter une maille donnée est calculée selon l'équation suivante :

$$P(l) = \rho \times \frac{\left|S\vec{n}.\vec{V}\right|}{mtot} \qquad \text{(IV-4)}$$

Avec :

- $\vec{n}$: est la normale à la maille orientée vers l'extérieur du volume délimité par les fenêtres.
- ρ_{liq} : est la masse volumique de la phase liquide ;
- S : est la surface de la maille ;
- $\vec{V}$: est la vitesse au centre de la maille ;
- mtot : est le débit de masse total qui traverse toutes les fenêtres d'injection ;
- $P(l)$: est la probabilité pour qu'une particule quitte la maille numéro l.

Le nombre total des particules qui partent depuis la maille l est calculé en fonction de $P(l)$:

$$np_mesh(l) = E(npar \times P(l)) \qquad \text{(IV-5)}$$

- La fonction E(x) est la fonction partie entière.

- $np_mesh(l)$: est le nombre total des particules qui quittent la maille numéro l ;
- npar : est le nombre total des particules injectées.

Lorsqu'on somme le nombre de particule qui traverse chaque maille de la fenêtre d'injection, le nombre total risque d'être plus ou moins élevé que le nombre initial de particule injecté. Pour cela, nous calculons la différence entre le nombre total de particule injecté et la somme de particules injectées. Le résultat obtenu (de l'ordre de quelques particules) est redistribué sur les mailles si np_{tot} est inférieur à npar, et soustrait des mailles ayant la plus faible probabilité lorsque np_{tot} est plus élevé que npar.

IV–2.2. Calcul du mouvement :

Les particules ont été injectées par la fenêtre d'injection en fonction du débit qui traverse chaque maille. L'étape suivante est de suivre la trajectoire de chaque particule en se basant sur la description cinématique de la vitesse.

IV–2.2.1. Description cinématique :

Cette première étape est basée sur une description cinématique du mouvement de particules. Ces dernières ont été considérées en mouvement à la même vitesse que le liquide (annexe III). Les trajectoires sont calculées en utilisant la définition de la vitesse :

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{V} \qquad \Rightarrow \qquad \overrightarrow{dr} = \overrightarrow{V(r(t),t)}\, dt \qquad \text{(IV-6)}$$

L'intégration en temps de l'équation IV-6 donne :

$$\vec{r}(t+\Delta t) = \vec{r}(t) + \int_{t}^{t+\Delta t} \overrightarrow{V(r(t),t)} dt \qquad \text{(IV-7)}$$

IV–2.2.2. Méthode de résolution :

L'équation (IV-7) présente l'intégrale à calculer pour le calcul des positions des particules. Pour cela et afin de les évaluer, nous avons mis en œuvre trois méthodes d'intégrations :

- Euler ;
- Runge-Kutta d'ordre 2 ;

- Runge-Kutta d'ordre 4;

IV–2.2.2.1. Euler:

En utilisant cette méthode, l'équation (IV-7) devient pour chaque composante de la position de la particule fluide :

$$\begin{aligned} x_1 &= x_0 + u \times \Delta t \\ y_1 &= y_0 + v \times \Delta t \\ z_1 &= z_0 + w \times \Delta t \end{aligned} \qquad \text{(IV-8)}$$

Avec :

- x_1, y_1, et z_1 sont les coordonnées de la particule à l'instant $t + \Delta t$;
- x_0, y_0, et z_0 sont les coordonnées de la particule à l'instant t.
- u, v et w sont les composantes de la vitesse au point (x_0, y_0, z_0) suivant les directions x, y, et z respectivement.

IV–2.2.2.2. Runge-Kutta d'ordre 2 et d'ordre 4 :

Les méthodes de Runge-Kutta d'ordre 2 et 4 propagent une solution sur un intervalle en combinant les informations provenant de plusieurs pas de calculs de type de ceux mis en œuvre dans le processus d'Euler. Ces informations servent à apparier un développement de Taylor au voisinage de la solution jusqu'à un ordre plus élevé que celui obtenu par le processus d'Euler. Il est possible de récapituler la méthode d'interpolation du temps de Runge-Kutta d'ordre 2 et 4 par les deux relations suivantes :

- Runge-Kutta d'ordre 2 :

$$\begin{cases} k_1 = \mathbf{v}(r(t), t); \\ k_2 = \mathbf{v}(r(t) + \dfrac{\Delta t}{2} k_1, t + \dfrac{\Delta t}{2})\Delta t; \\ \mathbf{r}(t + \Delta t) = r(t) + \dfrac{\Delta t}{2}(k_1 + k_2). \end{cases} \qquad \text{(IV-9)}$$

- Runge-Kutta d'ordre 4:

La méthode d'intégration de Runge-Kutta d'ordre 4 est une extension de la méthode de Runge-Kutta d'ordre 2. Le schéma d'intégration est le suivant :

$$\begin{cases} k_1 = \mathbf{v}(\mathbf{r}(t), t); \\ k_2 = \mathbf{v}(\mathbf{r}(t) + \dfrac{\Delta t}{2} k_1, t + \dfrac{\Delta t}{2}); \\ k_3 = \mathbf{v}(\mathbf{r}(t) + \dfrac{\Delta t}{2} k_2, t + \dfrac{\Delta t}{2}); \\ k_4 = \mathbf{v}(\mathbf{r}(t) + \dfrac{\Delta t}{2} k_3, t + \dfrac{\Delta t}{2}) \\ \mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \dfrac{\Delta t}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4). \end{cases} \qquad \text{(IV-10)}$$

IV–2.2.3. Calcul du pas de temps (Δt) :

Pour le calcul du pas de temps, nous nous sommes basés sur un critère utilisé dans l'étude de D.N.Kenwright et al. [Ken]. Ce critère est basé sur une technique heuristique qui a été suggérée par Darmofal et Haimes [Dar, 92], afin d'adapter le pas de temps à la vitesse de la particule. Les auteurs ont mesuré l'angle θ entre les vecteurs de vitesse à des points successifs le long de la trajectoire de la particule afin d'estimer le changement de direction de la vitesse. Si cette dernière a beaucoup dévié (θ est supérieur à 15 degré), la taille du pas de temps a été divisée par deux. Lorsque la direction de la vitesse dévie peu (θ est inférieur à 2 degré), le pas a été doublé. Nous avons adopté cette méthode afin d'optimiser le pas de temps. Ce dernier est calculé selon la relation suivante :

$$\Delta t = \frac{vol^{\frac{1}{3}}}{v_norm} \qquad \text{(IV-12)}$$

Avec :

$$v_norm = \sqrt{up^2 + vp^2 + wp^2} \qquad \text{(IV-13)}$$

Avec :

- vol est le volume de l'élément dans lequel la particule se trouve à l'instant t ;
- up, vp, wp sont les composantes de la vitesse de la particule liquide ($\vec{V}$).
- v_norm est le module de la vitesse à l'instant t.

Il y a des cas où v_norm peut être nulle, comme par exemple si la particule touche la paroi supérieure (z = zmax). Dans ce cas, on donne à Δt la valeur de Δt0 qui est un pas de temps initial que l'on déclare dans un fichier de données.

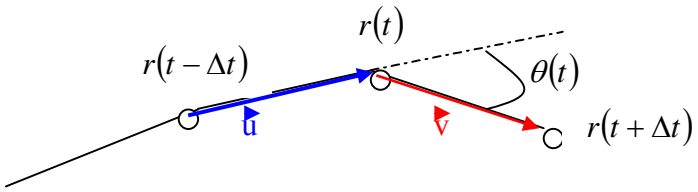


Figure IV-6 : schéma de calcul de l'angleθ.

$$\theta(t) = \left\langle \vec{u}, \vec{v} \right\rangle$$

$$\theta(t) = \arccos\left(\frac{(r(t-\Delta t) - r(t))(r(t) - r(t+\Delta t))}{\left|(r(t-\Delta t) - r(t))\right|\left|(r(t) - r(t+\Delta t))\right|} \right) \qquad \textbf{(IV-11)}$$

- Si l'angle $|\theta(t)|$ est supérieur de 15°, le pas de temps (Δt) est divisé par 2.
- Si l'angle $|\theta(t)|$ est inférieur à 3°, le pas de temps (Δt) est multiplié par 2.

La figure (IV-6) présente schématiquement la méthode de calcul de l'angle θ selon Kenwright et al. [Ken]. Pour augmenter la précision des calculs, nous avons définit un paramètre idivis. Le pas de temps est alors calculé suivant la relation :

$$deltat = \frac{\sqrt[3]{vol}}{\left\|\overrightarrow{U_P}\right\| idivis} \qquad \textbf{(IV-14)}$$

IV–2.3. Prise de moyenne :

Chaque particule contient des informations : sa température, sa vitesse, fraction solide locale à l'instant t. Afin de donner une information moyenne sur des grandeurs intégrées sur le parcours pour les grains se trouvant dans la même maille de sortie, une prise de moyenne a été faite suivant les étapes suivantes :

- On calcule le nombre total des particules dans chaque maille de sortie.
- On calcule la somme de la grandeur physique désirée.
- On divise le résultat de l'étape 2 par celui de l'étape 1.

Dans cette étude, l'ensemble des grandeurs physiques calculées par maille sur le plan de sortie sont :

- Le nombre de particules ;
- Le nombre de particules arrivant de la même face de fenêtre d'injection : Sh, Sv1, Sv2… ;
- Le temps moyen de séjour des particules dans le puits liquide, annexe II ;
- Le temps de séjour moyen des particules entre la température de liquidus et la température de cohérence (température choisie entre la température de liquidus et la température de solidus), annexe II ;
- Le temps de séjour moyen de particules entre la température de cohérence et la température de solidus, annexe II.

Lorsque la croissance des grains est prise en compte (chapitre V) d'autres grandeurs physiques sont aussi moyennées :

- Le diamètre moyen ;
- Le DAS ;
- La densité ;
- La fraction interne au moment du blocage des grains.

Après avoir étudié les différentes étapes de l'analyse hydrodynamique, nous allons étudier l'application de ce modèle à des cas de coulées semi-continue.

IV–2.4. Etude de sensibilité :

Le modèle de trajectoire a été appliqué sur deux coulées correspondantes au même format de coulée et aux mêmes paramètres excepté l'injection du métal et le chemin de solidification. La figure IV-7 montre les dimensions des plaques et le maillage pour les deux coulées :

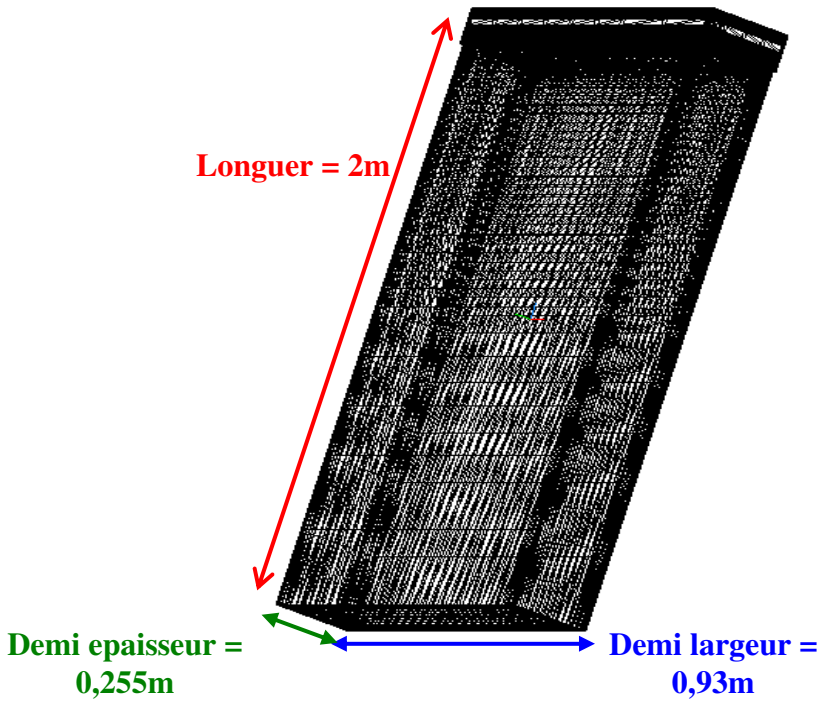


Figure IV-7 : les dimensions de la plaque coulée et maillage employé pour les deux cas avec et sans sac de distribution.

La première coulée est avec un sac de distribution (combo bag), et la deuxième sans sac de distribution. Les calculs macroscopiques des champs de vitesse et de température ont été réalisés par le laboratoire IFE à l'aide du logiciel ALSIM. La vitesse du produit était fixée à 0,1mm/s et l'alliage est un alliage AA5182.

Nous rappelons que les cartes de composition moyenne au magnésium ont été relevées pour ces deux coulées. Ces cartes sont différentes significativement. Les deux coulées vont donc nous permettre de tester des critères de gravité des macroségrégations.

Sur les figures IV-8 (a et b) et IV-9 (a et b), nous avons présenté les champs de température issus des simulations du code ALSIM pour les deux cas : a) avec sac de distribution et b) sans sac de distribution. On remarque que la distribution du métal joue un rôle fondamental sur la thermique. L'injection sans sac de distribution conduit à un flux important de métal chaud dirigé vers le bas dans la zone centrale du produit qui a pour conséquence une forme beaucoup plus creuse du marais que pour le cas avec sac de distribution.

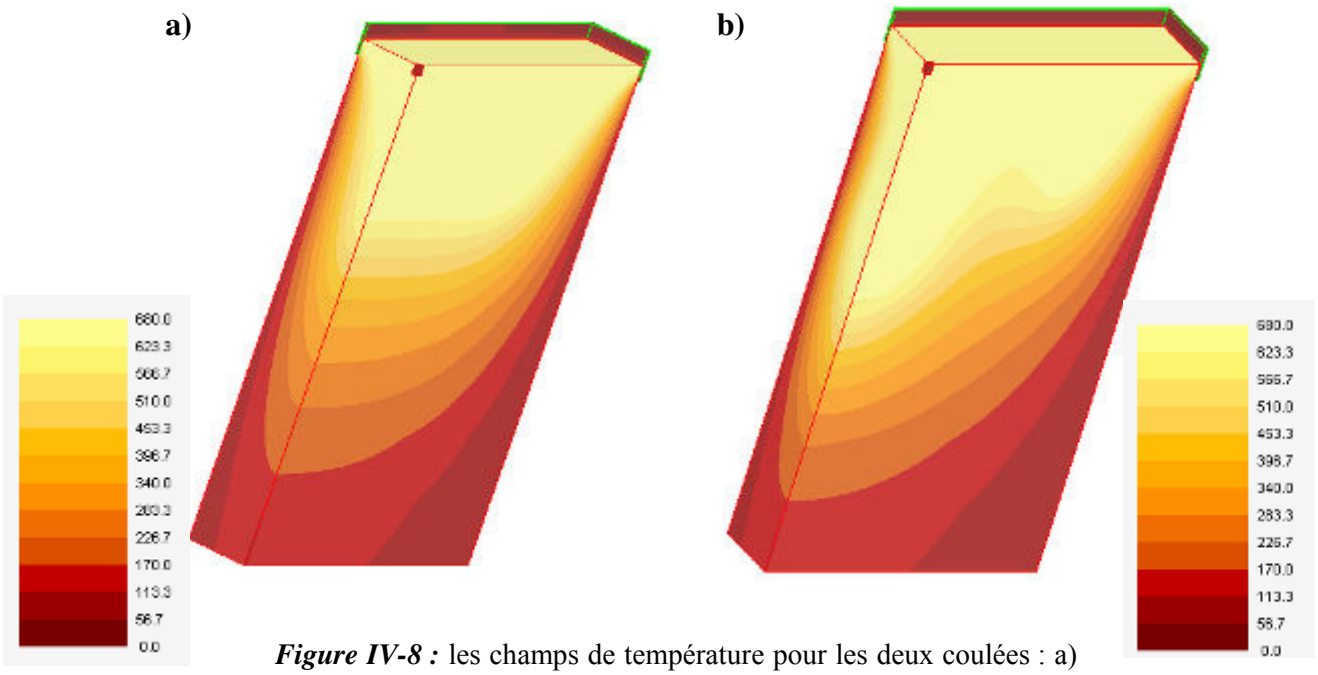


Figure IV-8 : les champs de température pour les deux coulées : a) avec sac de distribution ; b) sans sac de distribution. (calculs réalisés par le laboratoire IFE à l'aide du logiciel ALSIM)

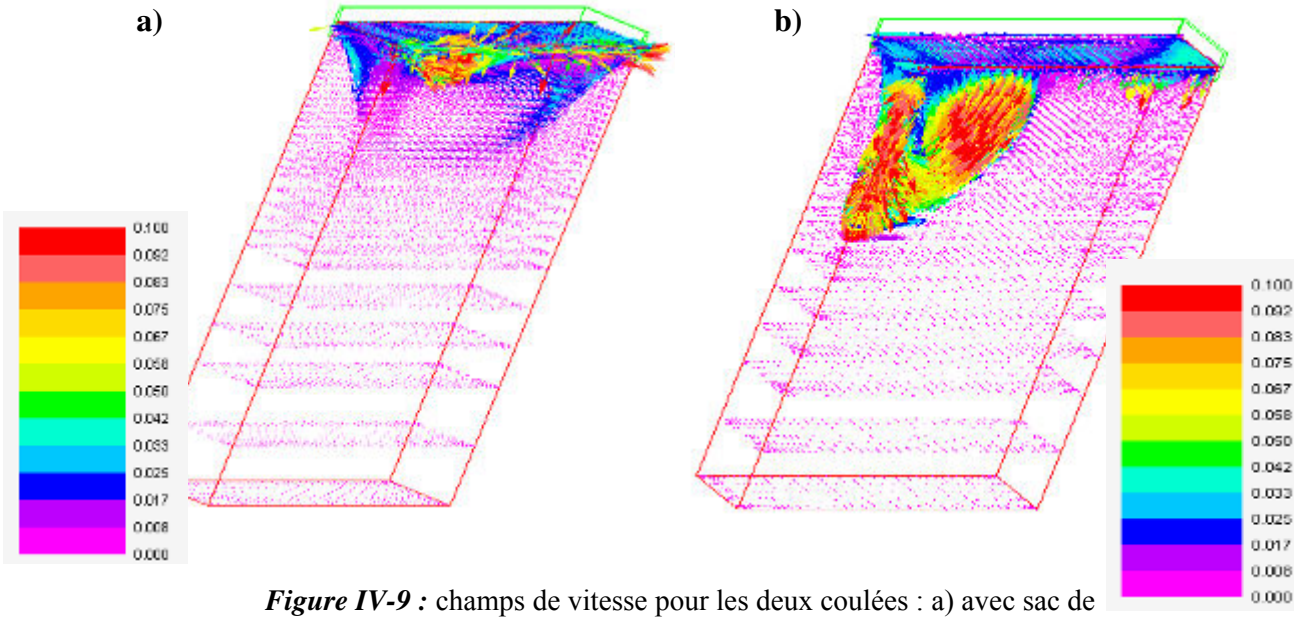


Figure IV-9 : champs de vitesse pour les deux coulées : a) avec sac de distribution ; b) sans sac de distribution.

Dans un premier temps, nous avons étudié l'influence des différents paramètres présentés dans le paragraphe précédent :

- Le pas de temps ;
- La méthode d'intégration (Euler, Runge-Kutta d'ordre 2 et Runge-Kutta d'ordre 4) ;

Pour l'étude de ces paramètres, nous avons utilisé le cas avec sac de distribution :

- Les dimensions de la fenêtre d'injection sont : hauteur 0,04m, largeur 0,45m, épaisseur 0,155m.
- Le maillage de la fenêtre d'injection : pour la face horizontale le nombre de maille est égal à 150 mailles. Sur la face verticale 1 le nombre de mailles est égal à 300, enfin pour la face verticale 2 le nombre total des mailles est de 50 mailles.
- Le maillage du plan de sortie : le nombre total de maille sur le plan de sortie est égal à 300 mailles.

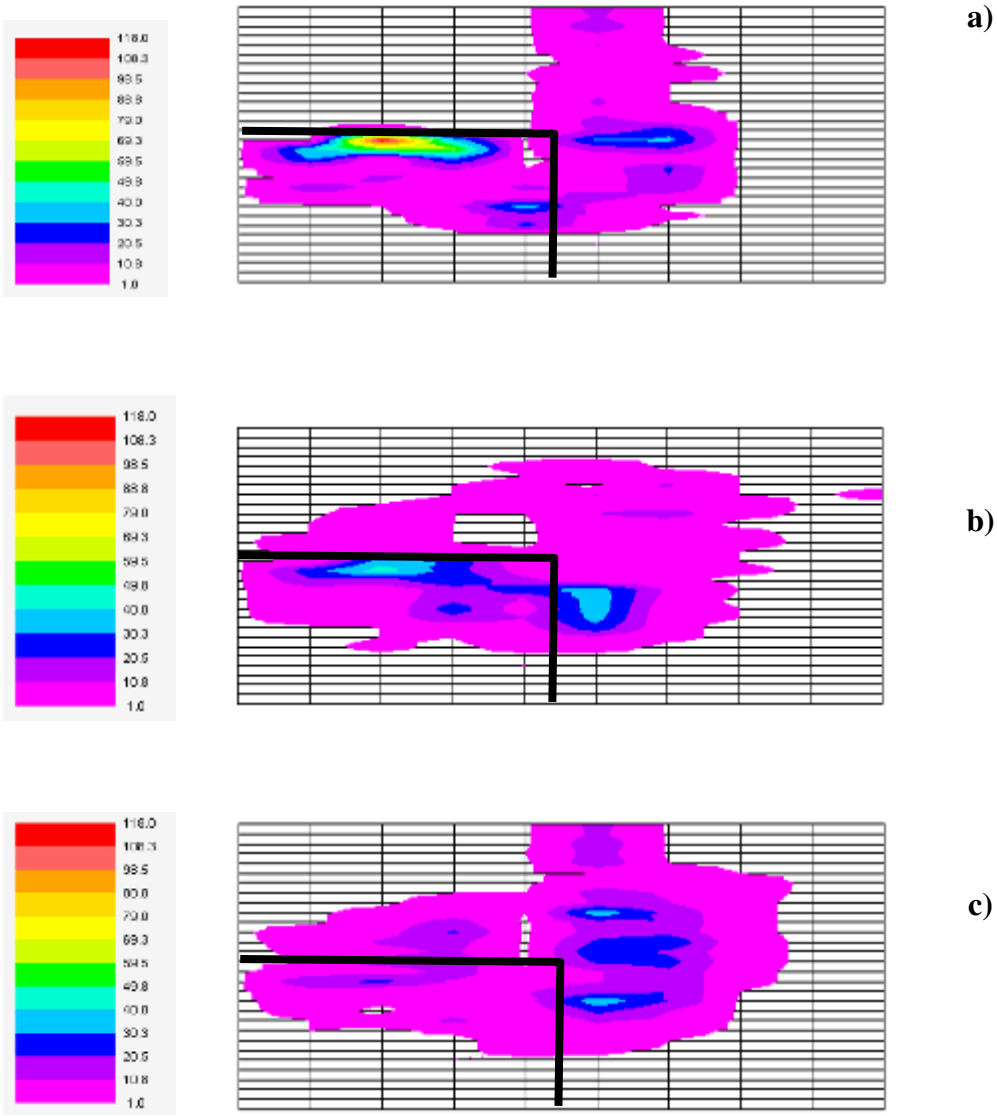
Remarque :

La fenêtre d'injection est composée de trois faces d'injection, du fait de la symétrie de la plaque et des conditions aux limites. Dans cette étude une double symétrie a été prise en compte.

IV–2.4.1. L'influence du pas de TEMPS :

Du fait de la méthode utilisée pour le calcul du pas de temps, il nous paraissait que l'influence du pas de temps est une étude obligatoire.

Pour cela, nous allons comparer la distribution des particules sur le plan de sortie pour différentes valeurs de idivis défini dans la relation IV-14 : 1, 10 et 100.



Figures IV-10 : la distribution des particules pour différentes valeurs de idivis : a) idivis =1, b) idivis=10, c) idivis =100. (les deux traits épais correspondent à la projection de la fenêtre d'injection sur le plan de sortie)

Les figures IV- 10 a, b et c présentent la distribution des particules sur le plan de sortie pour différents pas de temps en fonction du paramètre idivis. D'après ces figures, on observe que la distribution des particules n'est pas homogène sur le plan de sortie. On observe aussi l'existence de zones vides, composées de mailles qui ne contiennent pas de particule. Ce résultat est relié au fait que toutes les particules injectés ne ressortent pas au niveau du plan de sortie. Un certain nombre d'entre elles est en effet piégé dans le domaine de calcul. La figure

IV-13 présente l'allure d'une trajectoire où la particule se bloque sur une trajectoire de type cyclique. Ce type de trajectoire peut être du à plusieurs raisons :

- La précision de la méthode d'intégration ;
- Le champ de vitesse qui n'est pas exactement à divergence nulle (conservation de la masse).

Comme les particules sont injectées par l'entrée du domaine, elles doivent en principe ressortir. Nous avons effectué des calculs en inversant le signe du champ de vitesse et en prenant alors le plan de sortie comme fenêtre d'injection. Comme pour les cas précédents, toutes les particules ne ressortent pas. L'explication la plus probable est que les vitesses calculées avce le code ALSIM sont interpolées sur les nœuds d'un nouveau maillage à l'aide de l'interface de VIRSOFT. Les fonctions d'interpolation utilisées pour cette étape ne sont pas les mêmes que celles du code ALSIM. Les résultats peuvent ainsi être dégradés. Par ailleurs, nous utilisons les fonctions d'interpolation du code VIRSOFT pour interpoler la vitesse en un point de l'espace et à nouveau l'erreur d'interpolation est répétée.

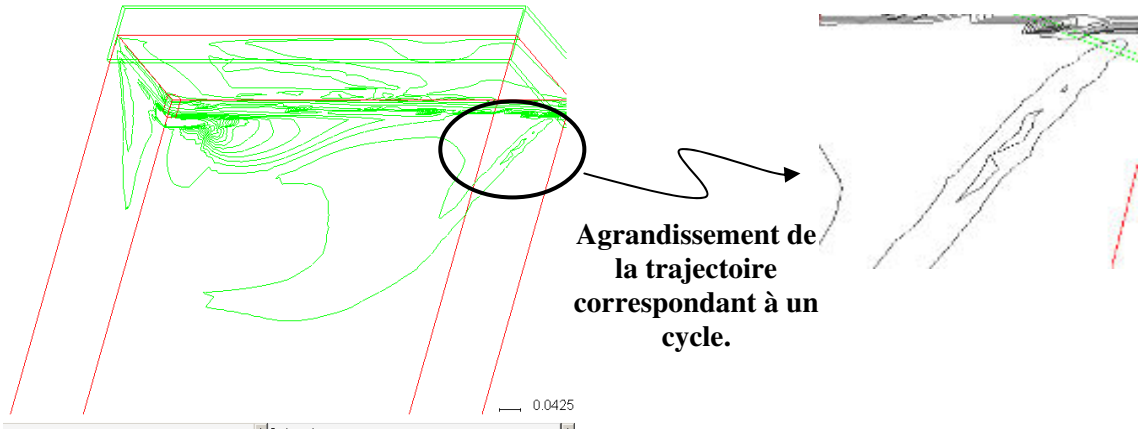
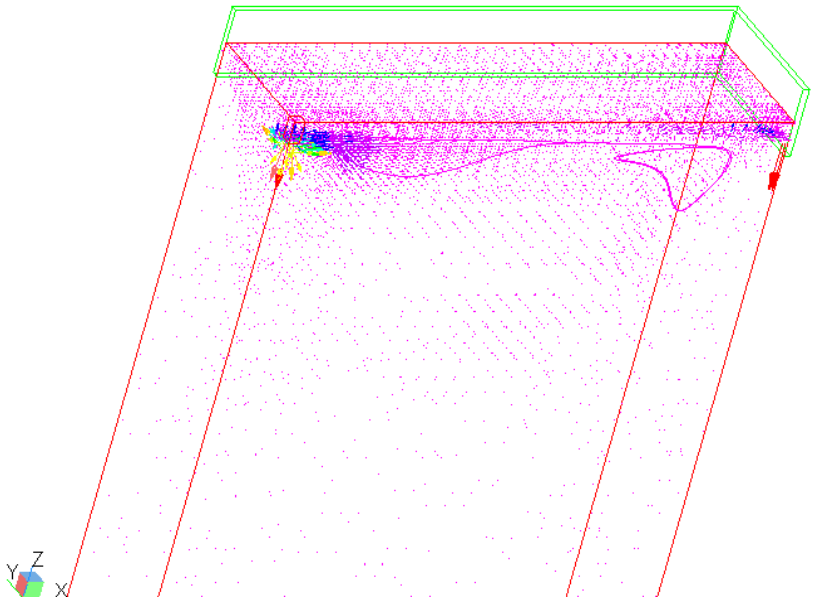


Figure IV-11 : exemple de trajectoire où la particule fluide se bloque.

Lorsque idivis est égal à 1, le pas de temps dépend du volume de la maille dans laquelle la particule se trouve, et du module de la vitesse. Cependant, lorsqu'on augmente la valeur de idivis, on réduit le pas de temps. Ce qui augmente la précision du calcul.

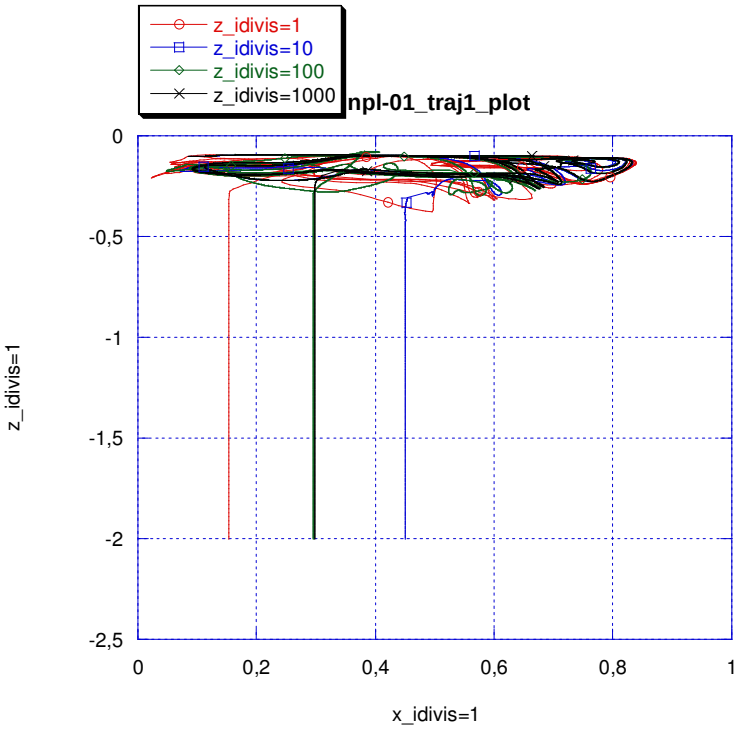


FigureIV-12 : Exemple de particule prise dans un tourbillon

La figure IV-12 présente un exemple de trajectoire de particule prise dans un tourbillon. D'après cette figure on voit bien que ces particules ont été bloquées dans un cycle.

Dans la figure IV-10 b, on observe que les particules sont plus réparties dans le plan de sorti que dans le cas présenté dans la figure IV-10 a. Lorsque idivis est égal à 100, on observe que la distribution des particules dans le plan de sortie représente une répartition encore différentes. Le nombre totale de particules sorties diminue en augmentant le idivis, ceci est dû au fait que lorsque le pas de temps est élevé, une particule peut faire un déplacement plus grand ce qui implique qu'elles évitent plus facilement les zone de recirculation.

Les figures IV-13 a et b présentent un exemple de trajectoire de deux particules pour différentes valeurs de idivis. D'après ces figures nous observons comment ces particules changent leurs trajectoires en changeant la valeur de idivis. Ceci explique la différence obtenue entre la distribution des particules sur le plan de sortie pour différentes valeurs de pas de temps. Dans notre étude de l'influence des paramètres suivant, nous avons choisis de fixer idivis à 10. Cette valeur nous a paru un bon compromis entre la précision et le temps de calcul.



FigureIV-13 a) : trajectoires de la particule 1 obtenus pour différentes valeurs de pas de temps (idivis).

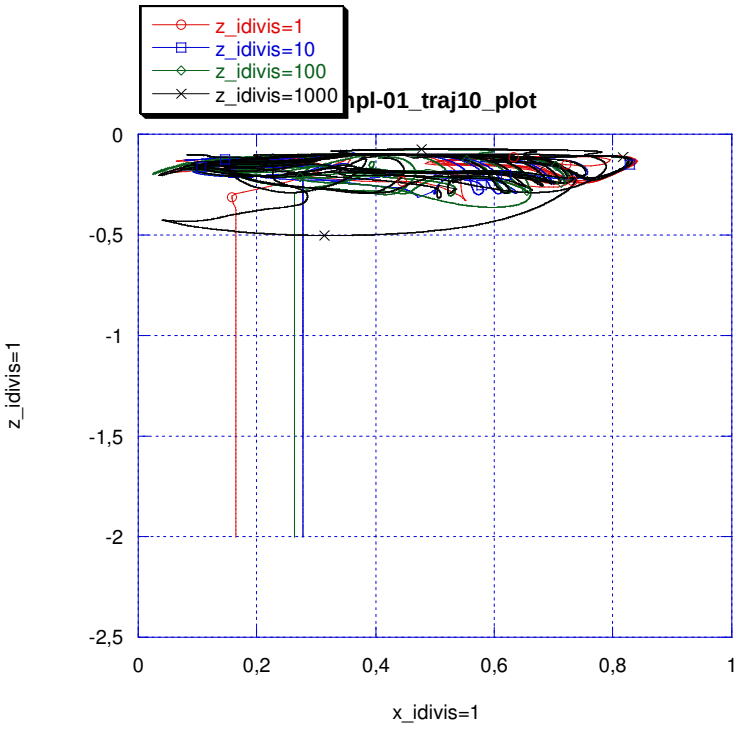
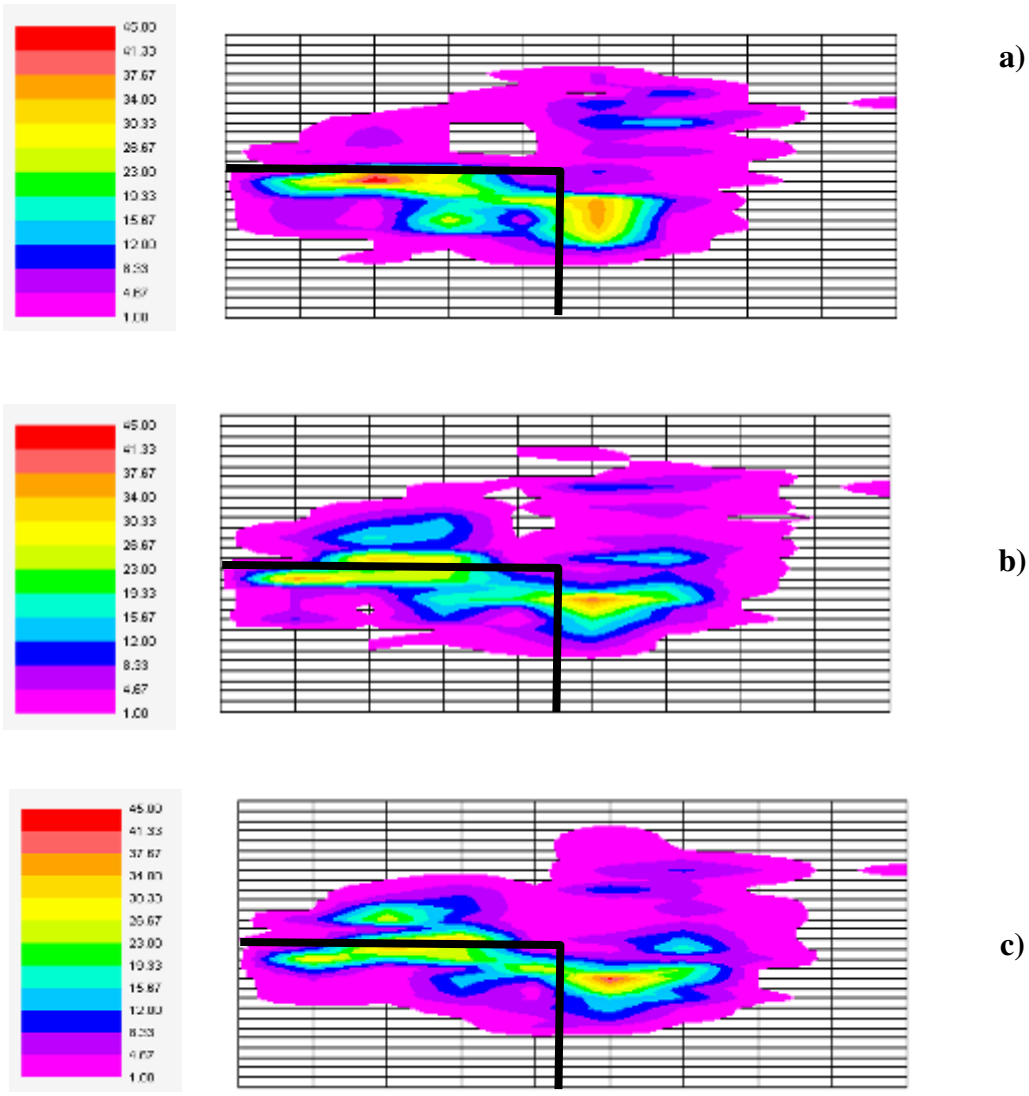


Figure IV-13 b) : trajectoires de la particule 1 obtenus pour différentes valeurs de pas de temps (idivis).

IV–2.4.2. Etude de l'influence de la méthode d'intégration :

Runge-Kutta d'ordre 4 est une extension de Runge-Kutta d'ordre 2. Cette dernière est une extension de la méthode d'Euler. Ces méthodes ont été utilisées afin d'avoir plus de précision dans le calcul de l'intégral. Pour pouvoir comparer entre les trois méthodes, nous avons appliqué le modèle de mouvement sur le cas décrit dans le paragraphe précédent. Pour cela la coulée avec sac de distribution, pour la production d'une plaque rectangulaire de dimension 2x0,92x0,255 (m), en utilisant les trois méthodes d'intégration et en fixant idivis à 10.



Figures IV-14 : la distribution des particules pour différentes méthodes d'intégration : a) Euler, b) RK-2, c) RK-4. (les deux traits épais correspondent à la projection de la fenêtre d'injection sur le plan de sortie)

Les figures IV- 14 a, b et c présentent la distribution des particules sur le plan de sortie en utilisant différentes méthodes d'intégrations (Euler, Runge-Kutta d'ordre 2 et Runge-Kutta d'ordre 4). D'après ces figures, on observe que les particules sont plus réparties sur le plan de sortie dans le cas de Runge-Kutta d'ordre 4 que dans les autres cas. Les deux méthodes de Runge-Kutta prennent plus de temps de calcul que la méthode d'Euler.

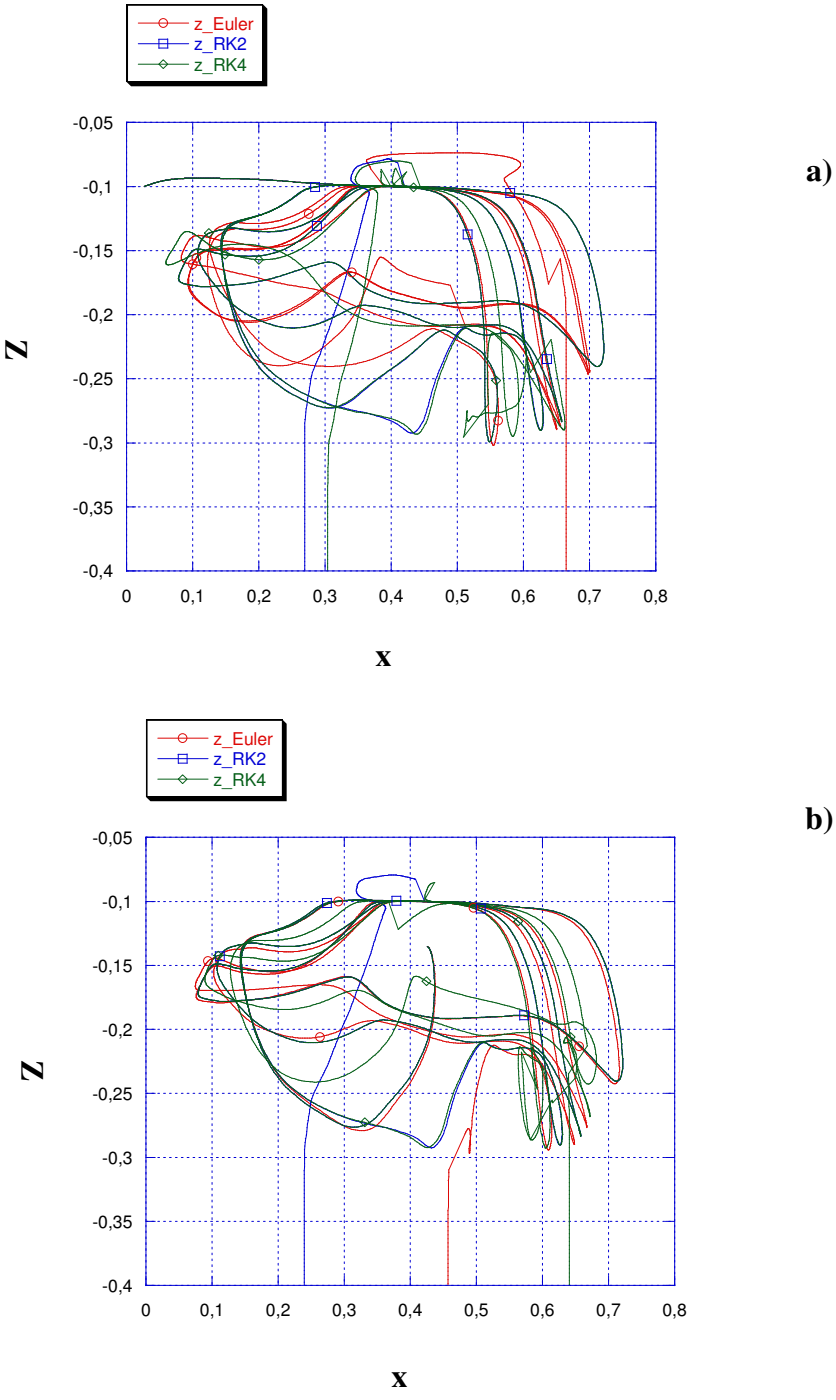
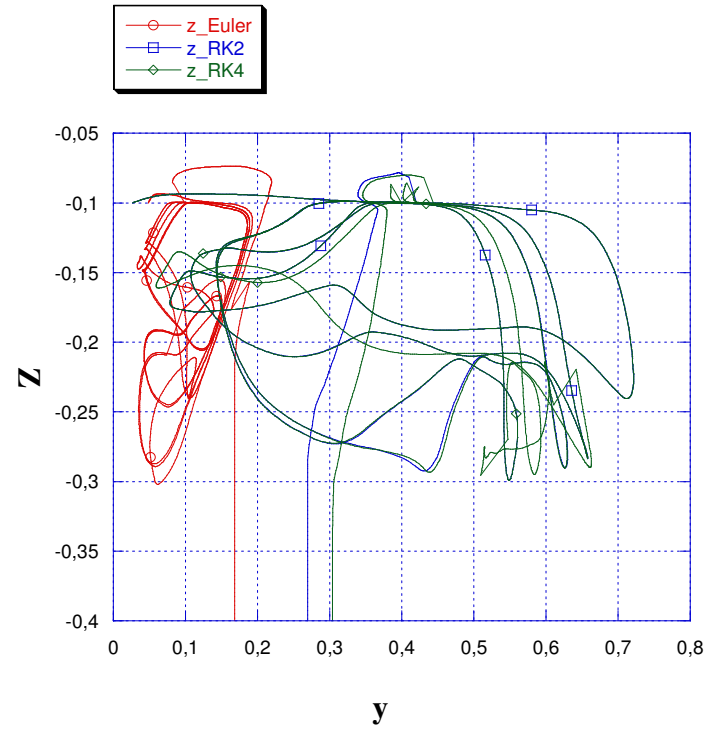
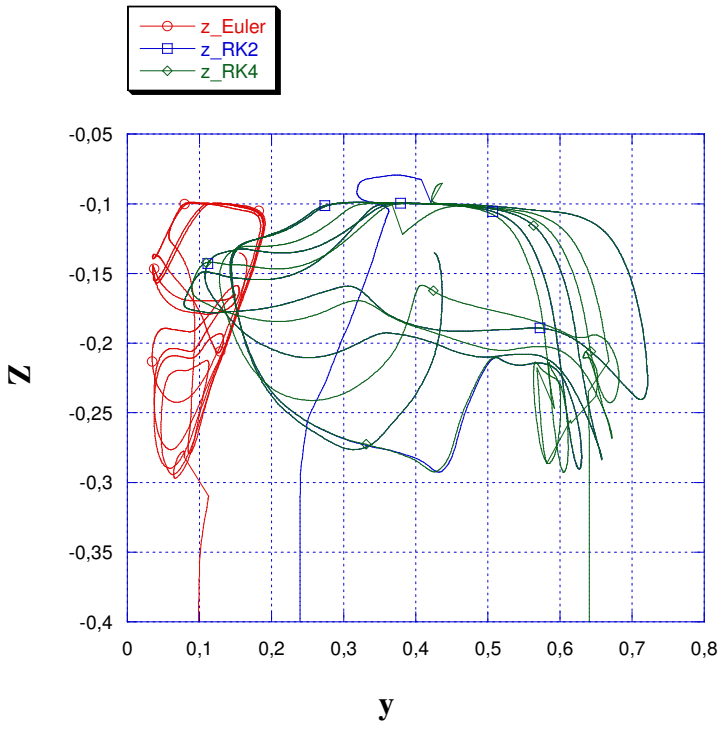


Figure IV-14 : trajectoires de particules obtenues dans le plan (x,z) pour différentes méthodes d'intégration z = f(x) : a) particule 65 ; b) particule 955.



c)



d)

Figure IV-14 : trajectoires de particules obtenues dans le plan (y,z) pour différentes méthodes d'intégration z = f(y) : c) particule 65 ; d) particule 955.

Les figures 14 a, b, c et d présentent des trajectoires obtenues pour deux particules en changeant la méthode d'intégration. D'après ces figures nous observons qu'en changeant la méthode d'intégration la trajectoire change aussi, ce qui implique un changement de maille sur le plan de sortie. Nous n'avons pas approfondi ces différences du fait des remarques formulées précédemment sur la précision du champ de vitesse.

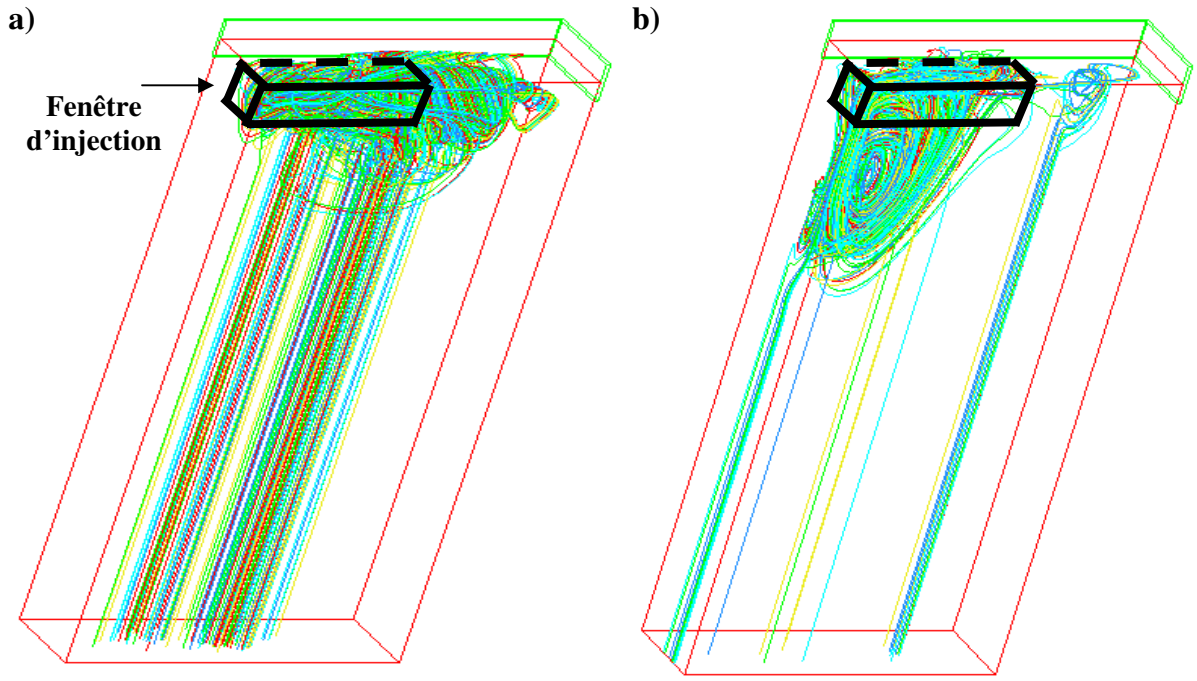
IV–2.5. Conclusion :

Le calcul de trajectoire couplé à la croissance a pour but de suivre l'évolution des particules afin qu'on puisse prédire la microstructure et la macroségrégation du lingot final pour une coulée semi-continue. Pour cela, dans cette première partie, nous avons présenté les différentes étapes de calcul de trajectoires de particules suivi d'une application à une coulée semi-continue. Nous avons ainsi essayé d'étudier l'influence de quelques paramètres autant liés au calcul numérique que les méthodes techniques du coulé sur la répartition des particules sur le plan de sorti. Ces paramètres sont :

- Le pas de temps ;
- La méthode d'intégration (Euler, Runge-Kutta d'ordre 2 et Runge-Kutta d'ordre 4) ;

Cette étude nous a révélé que la trajectoire des particules est sensible aux choix de la méthode d'intégration et au pas de temps. L'emplacement de la sortie de particules change en changeant ces paramètres. Les calculs de trajectoire ne peuvent être donc que indicatifs. Sur les figures nous avons présenté un exemple de trajectoire de quelques particules pour le cas d'une coulée avec sac de distribution (figure IV-15 a), et la coulée sans sac de distribution (figure IV-15 b). La méthode d'intégration utilisée est la méthode d'Euler. On voit sur cette figure le chemin complexe des particules dans le puits liquide qui diffère notablement entre les deux cas. Elles ont mis un temps moyen pour atteindre la température de liquidus de :

- 1000 secondes dans le cas où la coulée est réalisée avec sac de distribution ;
- 4200 secondes dans le cas où la coulée est réalisée sans sac de distribution.



Figures IV- 15 : exemple de trajectoire de particules dans le cas d'une coulée : a) avec sac de distribution ; b) sans sac de distribution.

IV-3. Principe de l'analyse thermique :

IV-3.1. Introduction :

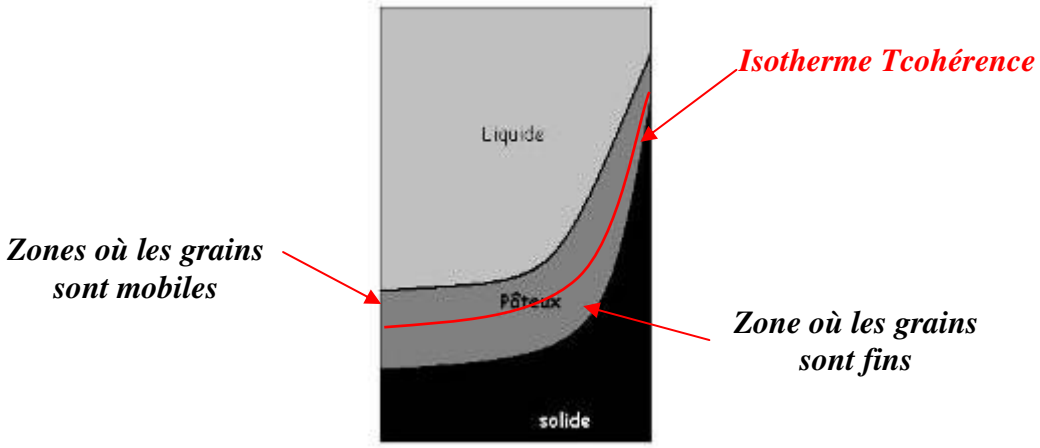
D'après note étude bibliographique, nous avons vu que la convection due au mouvement relatif du solide par rapport au liquide pouvait avoir un effet important sur l'évolution des cristaux. Nous avons vu aussi que les caractéristiques du cristal (sa taille, sa morphologie) influencent ce mouvement relatif et modifient la trajectoire du cristal équiaxe. Dans le paragraphe précédent, nous avons traité l'analyse de l'hydrodynamique, étudié l'influence des différents paramètres. Dans cette partie, nous allons étudier mesurer une analyse à partir de la thermique, en calculant des temps de séjour des particules dans la zone pâteuse ou dans le puits liquide.

La figure IV-16 représente schématiquement un rappel de la coulée semi-continue. Lorsque la solidification a débuté, nous distinguons trois zones :

- La zone liquide ;
- La zone pâteuse (mélange solide et liquide) ;
- La zone solide.

Dans la zone pâteuse, nous pouvons distinguer deux zones : une première région entre les isothermes de liquidus et de cohérence où les grains équiaxes sont mobiles et une deuxième zone entre les isothermes de cohérence et de solidus où les grains sont fixes. Nous rappelons également que la température a une valeur qui dépend de l'alliage mais aussi de l'inoculation et de la morphologie des grains.

Lors de l'étude de la germination croissance des grains (chapitre III), nous avons observé que les principaux mécanismes ont lieu autour du liquidus. Pour cela, nous allons essayer de retirer des informations à partir du temps de séjour des particules dans le puits liquide et dans la zone pâteuse. Les temps de séjour sont présentés dans la partie suivante.



· Rappel de la coulée semi-continue.

IV-3.2. Définition des critères basés sur l'analyse thermique :

Trois temps de séjour ont été étudiés :

- Le temps de séjour des particules dans le puis liquide (tsl) ;
- Le temps de séjour des particules entre le liquidus et la température de cohérence (tsc) ;
- Le temps de séjour des particules entre la température de cohérence et de la température de solidus (tss).

Tous ces temps de séjour sont calculés en considérant que la particule fluide se déplace à la vitesse du produit. Sa trajectoire est donc alors rectiligne et son mouvement uniformément vari. Cette hypothèse permet d'éviter les problèmes d'interpolation du champ de vitesse rapportés dans la section IV.2. Le premier temps de séjour permet à partir d'une carte de ce temps dans le plan de sortie de la plaque d'avoir une idée très rapidement de la géométrie du puits liquide. Les zones où ce temps est le plus long correspondent aux zones où le puits liquide est le plus profond. Les régions de fort gradient de ce temps de séjour correspondent aux régions de plus forte pente de marais. Le deuxième temps de séjour correspond à temps où localement les grains ont pu se déplacer donc plus ce temps sera grand plus le mouvement des grains pourra être important. Les deux temps de séjour peuvent être utilisés

conjointement, une zone de fort gradient de temps de séjour dans le puits liquide et de fort temps de séjour entre les températures de liquidus et de cohérence va être propice au mouvement des grains du fait du marais incliné et du temps conséquent pour le mouvement des grains. Le troisième temps de séjour correspond, puisque les grains sont bloqués à une période de la solidification, où seul le mouvement de liquide interdendritique est possible. C'est donc un temps qui permet de caractériser un risque de macroségrégation induite par le retrait ou la convection naturelle de la phase liquide d'origine thermique ou solutale.

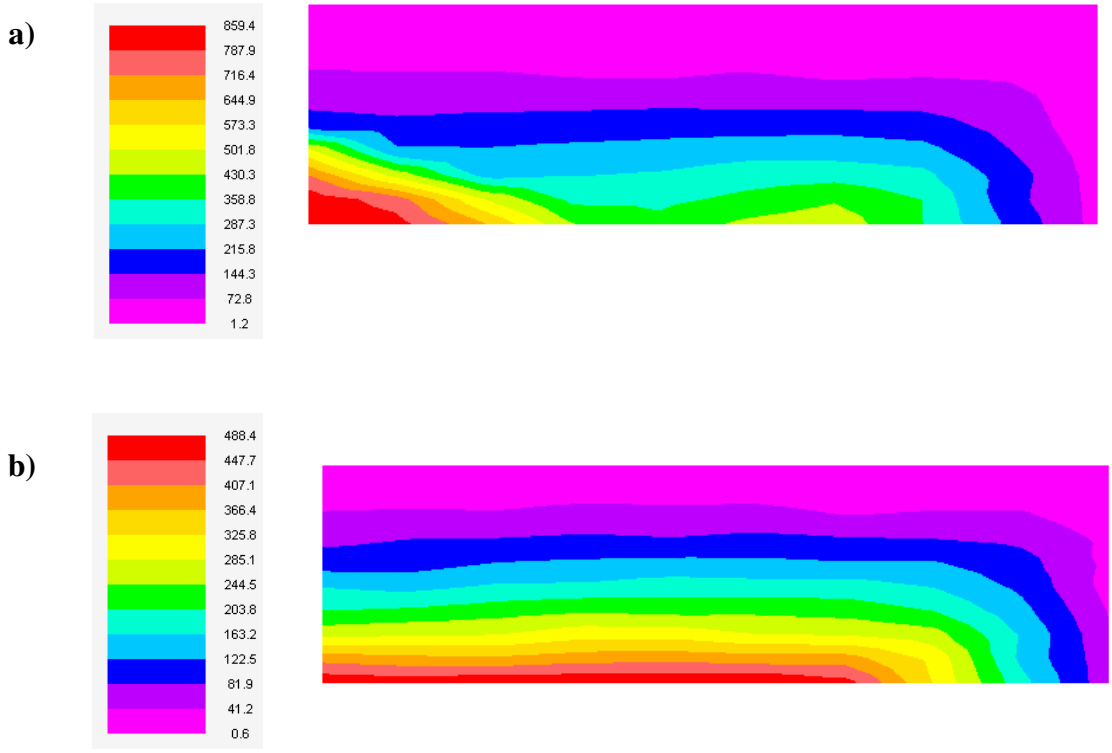


Figure IV-17 : carte de temps de séjour en secondes des particules dans le puits liquide : a) sans sac de distribution ; b) avec sac de distribution.

Dans les figures IV-17 a et b, nous avons présenté sur le plan de sortie les cartes de temps de séjours des particules dans le puits liquide pour deux cas :

- Sans sac de distribution ;
- Avec sac de distribution.

D’après ces figures, nous observons que le temps de séjour des particules dans le puits liquide est plus grand dans le cas où la coulée a été réalisée sans sac de distribution que dans le cas où il n’est pas utilisé. Ceci peut être expliqué par la profondeur du puits liquide beaucoup plus forte dans le cas sans sac de distribution représenté à la figure IV-8.

On remarque également la présence de deux extrémums locaux du temps tsl pour le cas sans sac de distribution. Deux cuvettes sont donc présentes dans le marais. Le plus fort gradient de tsl situé dans la zone située autour du centre de la plaque ce qui montre que c'est la cuvette la plus pentue. Pour le cas avec sac de distribution, une seule cuvette est observée et la pente du marais est régulière tout autour du fond de cette cuvette.

Après avoir étudié les cartes de temps de séjour des particules dans le puits liquide, nous allons essayer de trouver la relation entre le comportement des particules dans la zone pâteuse et la macroségrégation. Pour cela, nous allons comparer les cartes de temps séjour entre la température de liquidus et la température de cohérence. Nous rappelons que le choix de température de cohérence est arbitraire dans l’intervalle $]T_{liq}, T_{sol}[$ avec T_{liq} et T_{sol} sont respectivement la température de liquidus et la température de solidus.

Dans notre étude, le choix de la valeur de la température a été basé en fonction de l'emploi ou non d'affinant. Dans le chapitre précédent, nous avons étudié l’évolution de la fraction solide pour deux cas, lorsque l’affinage est pris en compte et lorsqu’il n’est pas pris compte. A partir des valeurs de fraction solide correspondantes aux valeurs seuil de la fraction de blocage des grains, le choix de la valeur de la température de cohérence a été réalisé. Le tableau IV-1 présente les valeurs correspondantes :

	Fraction de solide (Grains non affinés)	***Fraction de solide (Grains affinés)***	***Température de cohérence (Grains non affinés)***	***Température de cohérence (Grains affinés)***
Coulée sans sac de distribution	0,1	0,5	622.97 K	610 K
Coulée avec sac de distribution	0,1	0,5	636.77 K	625.43 K

Tableau IV-1 : Les différentes valeurs de la température de cohérence correspondantes aux différents cas étudiés.

Les valeurs des températures de cohérence sont différentes pour les cas avec et sans sac de distribution car les chemins de solidification employés pour ces calculs sont différents. Les résultats obtenus sont comparés avec les résultats expérimentaux obtenus par Pechiney et VAW dans le cadre du projet EMPACT(*). Afin d'étudier l'effet de l'affinage et du sac de distribution, des lingots d'alliages 5182 dont la composition est présentée dans le tableau (IV-2), ont été coulés avec différentes conditions :

1. Avec et sans sac de distribution ;
2. Avec et sans affinage.

Alliage	Mg	Mn	Fe	Si
AA5182	4-4.5	0.35	0.25	0.1

Tableau IV-2 : composition de l'alliage utilisé en wt.%

La figure IV-18 présente schématiquement l'installation expérimentale qui a été utilisée :

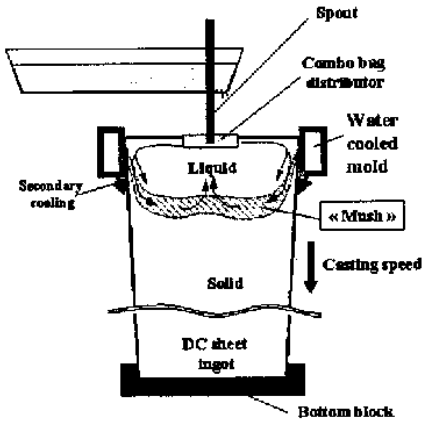


Figure IV-18 : représentation schématique de la coulée semi-continue.

(*) : Europeen reseach project on the development of modeling tools on aluminium casting technology.

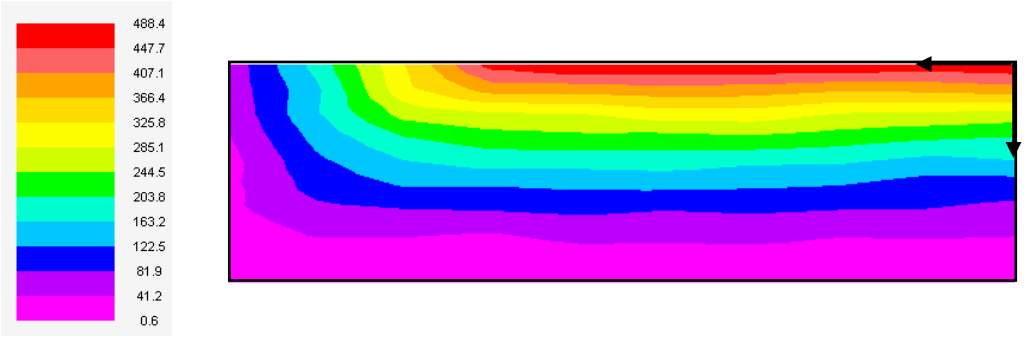
Nous disposons suite à cette étude de cartes de composition moyenne en Mg, Fe, Ti, Mn pour les quatre conditions étudiées. Nous avons utilisé pour notre exploitation la carte en Mg du fait de la similarité de répartition des cartes des autres éléments d'alliage.

Ces cartes seront présentées dans la partie suivante afin de les confronter avec les cartes de temps de séjours.

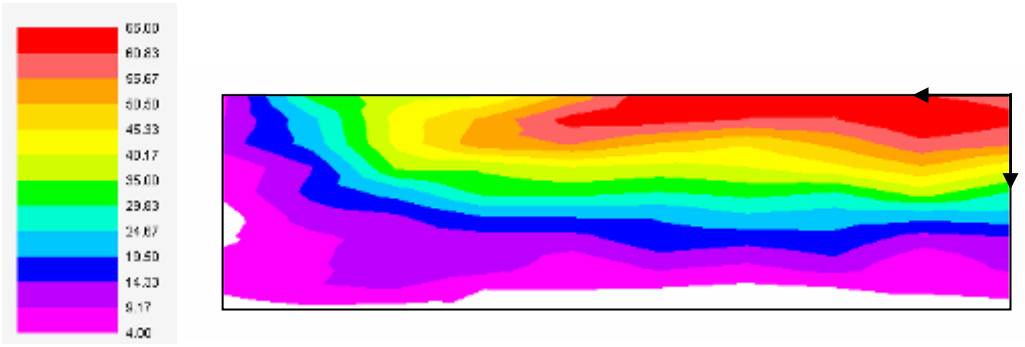
IV-3.2.1. Application des critères de temps de séjour à l'étude des macroségrégations :

Lors de notre étude bibliographique, nous avons vu que l'ajout d'affinant modifiait la structure des grains ainsi que la macroségrégation. Dans cette partie, nous allons mettre en parallèle les cartes de temps de séjour sur le plan de sortie du lingot, avec les cartes de macroségrégation obtenues avec et sans affinage et avec et sans sac de distribution, lors des essais réalisés dans le cadre du programme Européen Empact.

a)



b)



c)

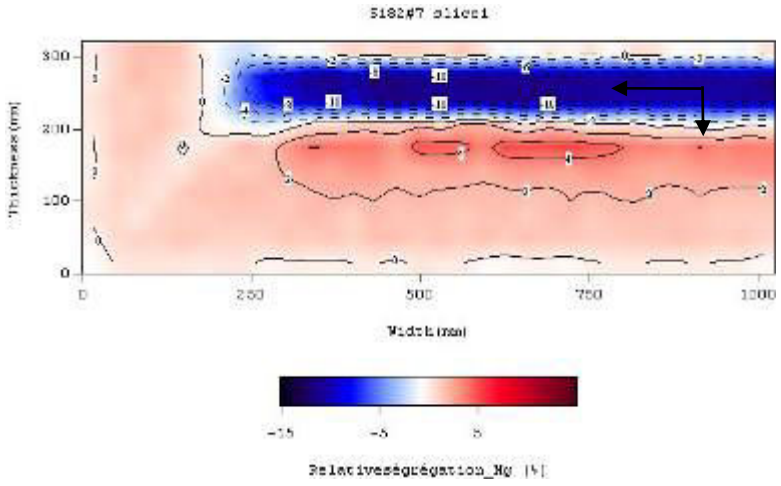


Figure IV-19 : carte de : a) temps de séjour tsl; b) temps de séjour tsc ; c) macroségrégation du Mg obtenue expérimentalement ; avec affinage et avec sac de distribution.

d)

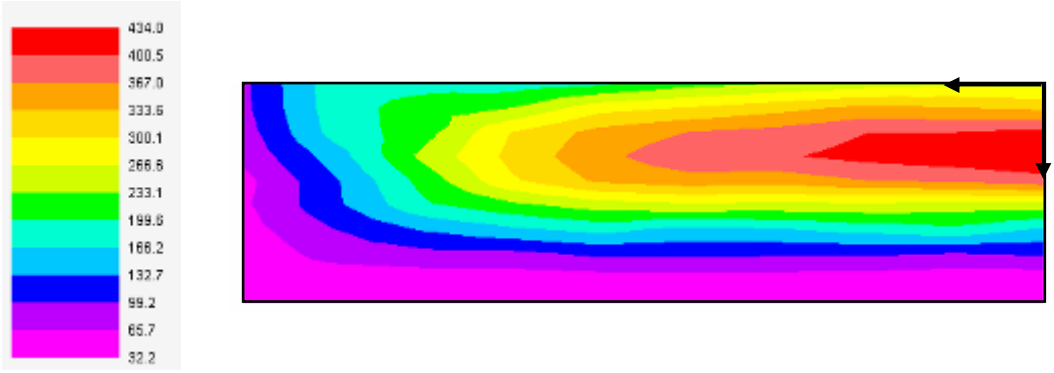


Figure IV-19 : carte de : d) temps de séjour tss ; avec affinage et avec sac de distribution.

Les figures IV- 19 a, b et d présentent les cartes de temps de séjour respectivement, tsl, tsc, et tss, lorsque les grains sont affinés et lorsque le sac de distribution est utilisé dans la coulée. Sur la figure IV-19 b, nous observons une zone centrale où les particules ont mis un temps moyen maximal de 66s partant de la température de liquidus pour atteindre la température de cohérence. Ce qui, en conséquence, nous permet de déduire que le mouvement des grains peut être important dans cette zone. Cette dernière correspond à l'emplacement où le puits liquide est le plus profond (figure IV-19 a). D'autre part, autour de la zone centrale, nous observons une région de fort gradient de temps de séjour entre la température de liquidus et la température de cohérence (figure IV-19 a).

La figure IV-19 c présente la carte de macroségrégation en magnésium obtenue dans la partie du lingot avec grain affiné et avec sac de distribution. Sur cette figure, on remarque une ségrégation négative au centre du lingot entourée par une légère ségrégation positive. En comparant cette carte avec la carte de temps de séjour tsl et tsc (figures IV-19 a et b), nous observons que la ségrégation négative correspond à la zone où le marais est le plus profond. La région où la ségrégation positive la plus forte a été observée correspond à la région de fort gradient du temps de séjour tsc. Ceci peut être expliqué par l'inclinaison dans cette zone. Les grains affinés étant plutôt globulaires, ils ne peuvent pas s'accrocher facilement sur un front incliné. Ces grains vont donc s'accumuler au fond du marais et constituer une

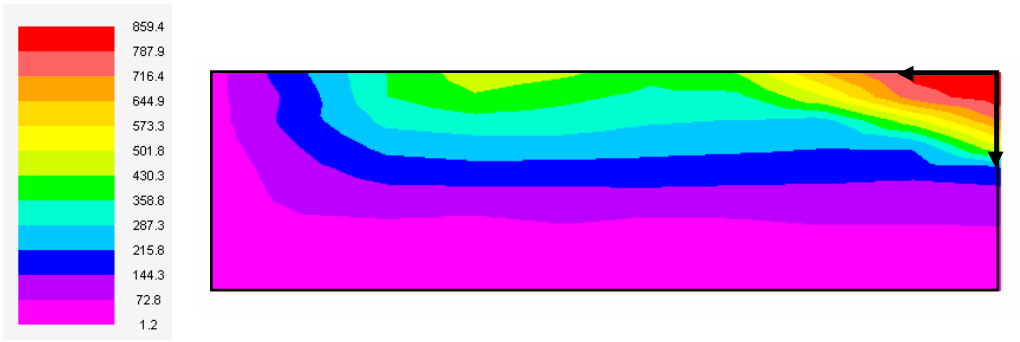
macroségrégation négative. Par conservation de la masse, la zone de départ des grains sera une zone favorable d'une macroségrégation positive.

Sur la figure IV-19 d, nous avons présenté la carte de temps de séjour de grains entre la température de cohérence et la température de solidus. Les régions où tss est élevé correspondent aux régions où une macroségrégation pourrait être induite par la convection naturelle de la phase liquide. On remarque sur la figure IV-19 que le maximum de tss ne se trouve pas dans la zone centrale de la plaque, mais dans la région qui l'entoure qui correspond également à la zone de plus forte pente du marais. On note un écart de tss de l'ordre de 60 s entre ces deux zones. Du point de vue de ce critère, la région de plus forte pente du marais est la plus favorable pour une macroségrégation induite par la circulation du liquide interdendritique. Du fait de son inclinaison, cette zone est très favorable à la convection naturelle thermique ou solutale.

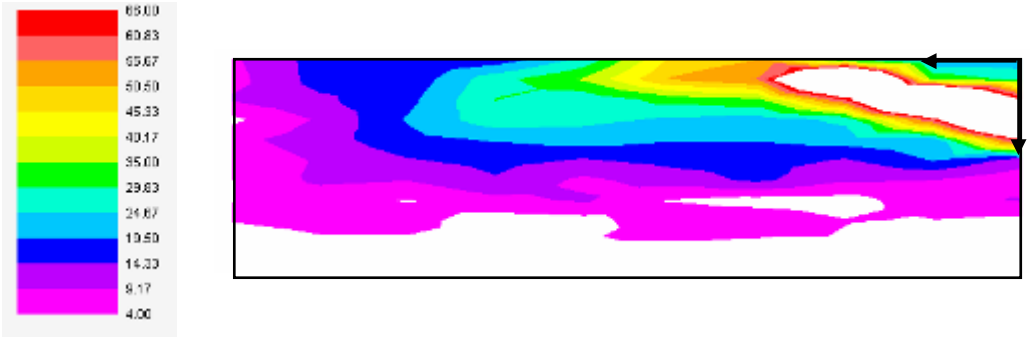
Les figures IV-20 a, b, et d arborent les cartes de temps de séjour de particules respectivement, tsl, tsc, et tss, lorsque les grains sont affinés et lorsque le sac de distribution n'est pas utilisé dans la coulée. Sur la figure IV-20 b, nous observons une zone centrale plus restreinte que dans le cas précédent où le temps de séjour tsc. La figure IV-20 c représente la carte de macroségrégation du magnésium pour cet essais. En se référant à la carte de temps de séjour des particules tsl, nous remarquons que les zones centrales présentant une ségrégation négative correspondent aux zones où tsl est le plus long. Autrement dit, ces deux régions sont les deux bassins d'accumulation pour des grains qui se déplacent. La ségrégation positive entourant la ségrégation négative de la zone centrale correspond encore à la zone de plus forte pente du marais et aux plus fortes valeurs de tsc. Cependant, la mise en parallèle des deux figures IV-22 b et c, nous permet d'observer que le fait de tenir compte du paramètre temps de séjour entre la température de liquidus et la température de cohérence, ne suffit pas dans ce cas ci pour refléter l'ensemble du phénomène de macroségrégation. Notamment, il n'est pas possible d'expliquer la zone de ségrégation négative située à l'épaisseur 150 mm (figure IV-20 c).

Sur la figure IV-20 d, nous remarquons que tout comme précédemment d'ailleurs les valeurs du temps de séjour tss sont importantes sur une grande partie de la plaque. Ainsi la circulation du liquide interdendritique pourrait être aussi une cause de macroségrégation pour ce cas.

a)



b)



c)

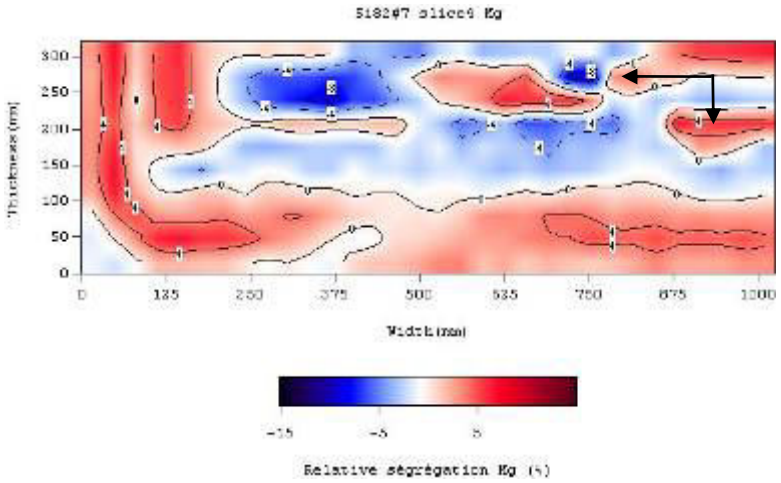


Figure IV-20 : carte de : a) temps de séjour de grains tsl; b) temps de séjour de grains tsc ; c) macroségrégation de Mg obtenue expérimentalement ; avec affinage et sans sac de distribution.

d)

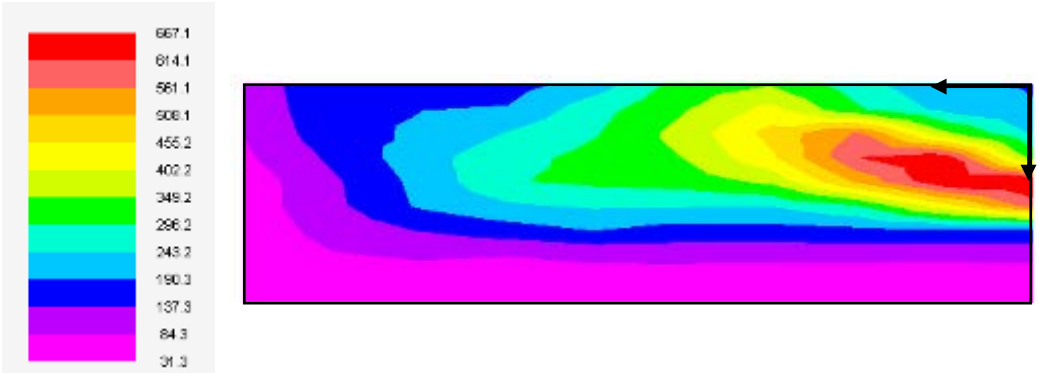


Figure IV-20 : carte de : d) temps de séjour de grains tss ; sans affinage et sans sac de distribution.

Les figures IV-21 A et B représentent schématiquement où les particules ont tendance à s'accumuler pour les deux cas :

- Coulée avec sac de distribution ;
- Coulée sans sac de distribution.

D'après ces figures, nous observons que pour une coulée avec sac de distribution, les particules ont tendance à s'accumuler au centre du lingot (la zone (a) figure IV-21 A). Ceci est dû à la forme du marais représentant une seule cuvette. D'autre part, pour le cas où la coulée est sans sac de distribution, nous observons que les particules ont tendance à s'accumuler dans les deux zones (b et c figure IV-21 B) correspondant aux deux cuvettes. L'utilisation du sac de distribution modifie le mouvement du liquide ce qui provoque la différence entre les formes de puits liquide, d'où la différence entre les cartes de ségrégation obtenues avec et sans sac de distribution.

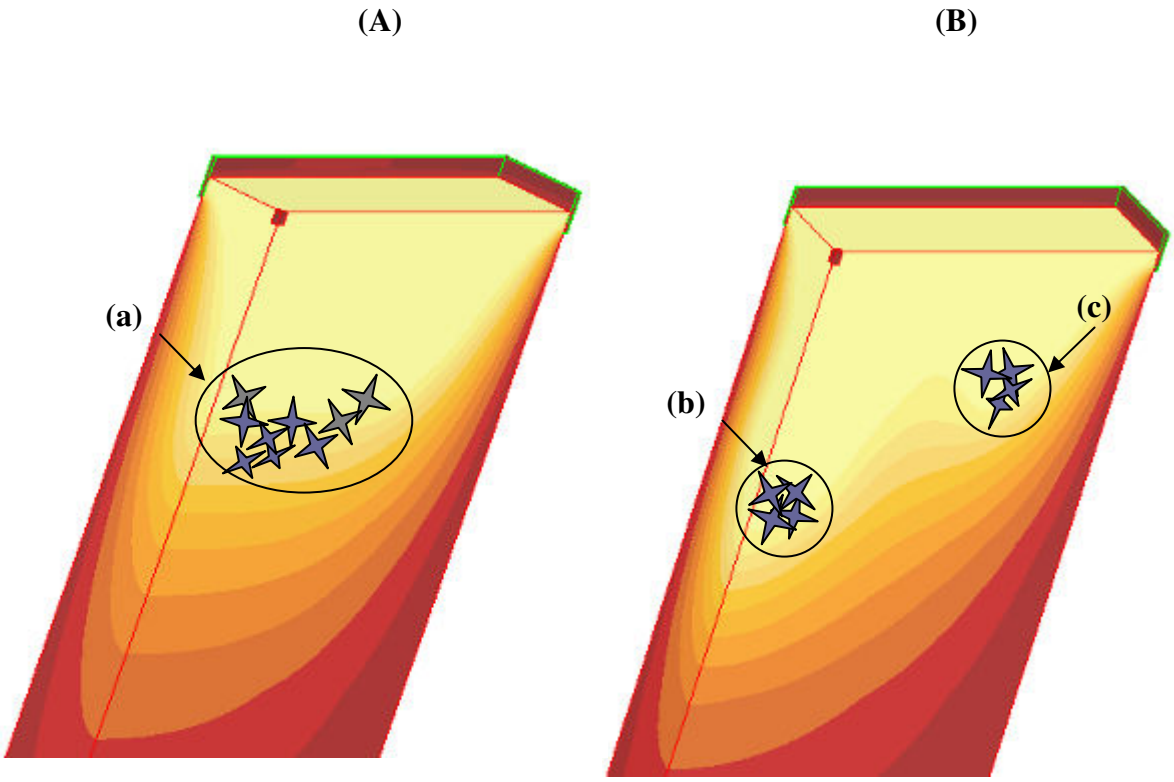
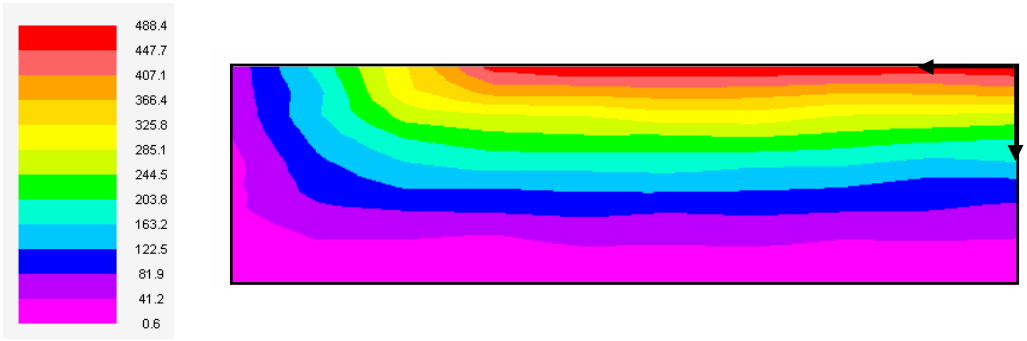


Figure IV-21 : cartes de température pour représenter les formes de marais et les zones où les particules ont tendance à s'accumuler : A) avec sac de distribution ; B) sans sac de distribution.

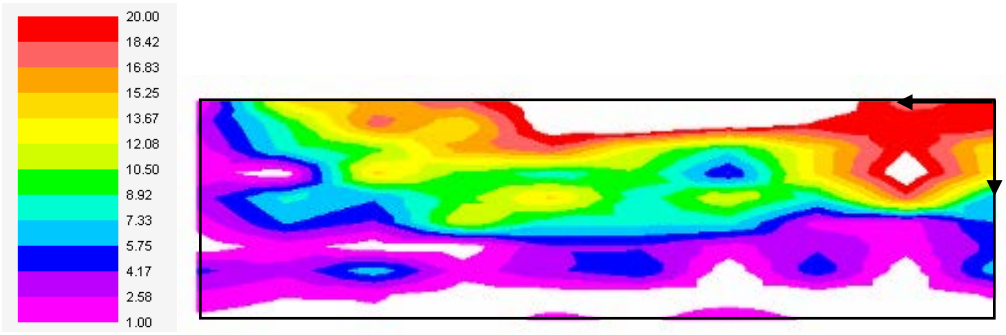
Dans la partie suivante, nous allons mettre en parallèle les cartes de temps de séjour de grains lorsque l'affinage n'est pas mis en oeuvre. Pour cela, sur les figures IV-22 a, b, et d, nous avons présenté les cartes de temps de séjour respectivement tls, tsc, et tss pour la coulée réalisée avec sac de distribution.

Nous pouvons faire les mêmes commentaires que pour la coulée avec affinage et avec sac de distribution. La zone de ségrégation négative correspondant à la cuvette du marais. La zone de ségrégation positive entoure cette cuvette et celle correspond à une forte pente du marais. On note que l'intensité de la ségrégation est plus faible dans le cas non affiné. On retrouve cette tendance sur les cartes de tsc. Pour le cas non affiné, la valeur de tsc dans la zone de forte pente est de l'ordre de 45 s dans le cas affiné. Cette différence de temps et la différence de morphologie des grains permet d'expliquer l'intensité plus faible de la macroségrégation.

a)



b)



c)

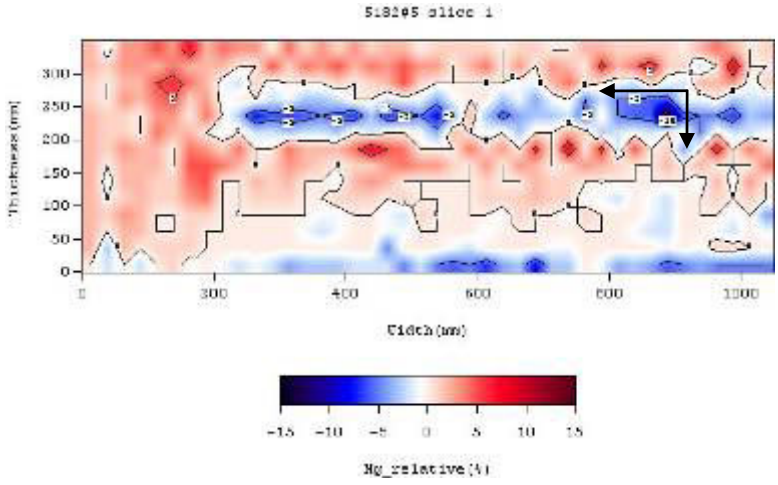


Figure IV-22 : carte de : a) temps de séjour tsl; b) temps de séjour tsc ; c) macroségrégation de Mg obtenue expérimentalement ; sans affinage et avec sac de distribution.

d)

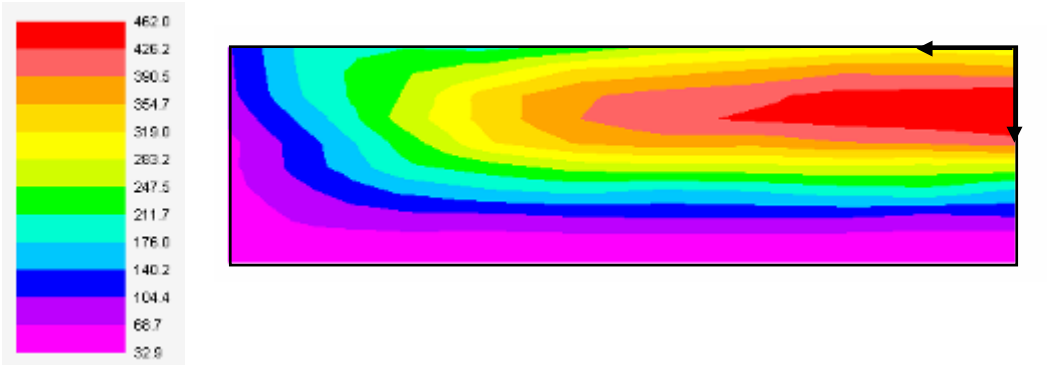


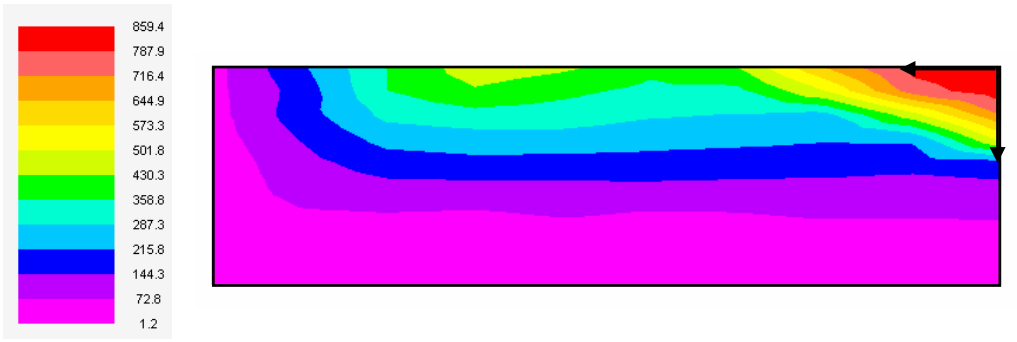
Figure IV-22 : carte de : d) temps de séjour tss ; sans affinage et avec sac de distribution.

Sur les figures IV-23 a, b, et d, nous avons présenté les cartes de temps de séjour des particules pour le cas sans affinage et sans sac de distribution.

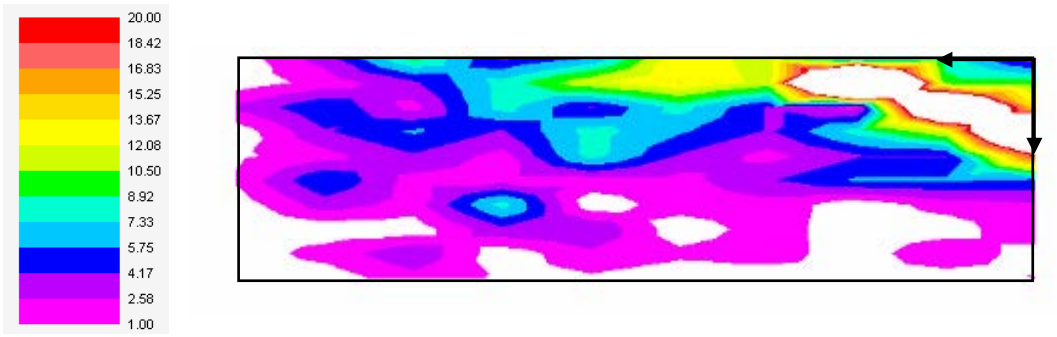
D'autre part, la figure IV-23 c présente la carte de macroségragtion pour le Mg pour le même cas. On observe sur cette figure, contrairement au cas avec sac de distribution que la carte de ségrégation est différente du cas affiné la zone de ségrégation négative à l'épaisseur 150 mm n'apparaît plus notamment.

La ségrégation négative dans le centre correspond encore à la zone où les particules ont mis plus de temps pour passer de la température de liquidus à la température de cohérence. La ségrégation positive se retrouve autour du centre dans les zones de plus forte pente du marais.

a)



b)



c)

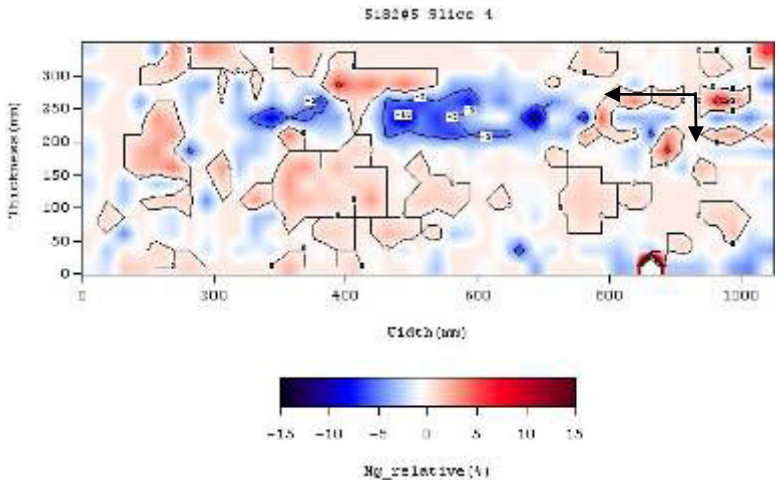


Figure IV-23 : carte de : a) temps de séjour tsl; b) temps de séjour tsc ; b) macroségrégation de Mg obtenue expérimentalement, sans affinage et sans sac de distribution.

d)

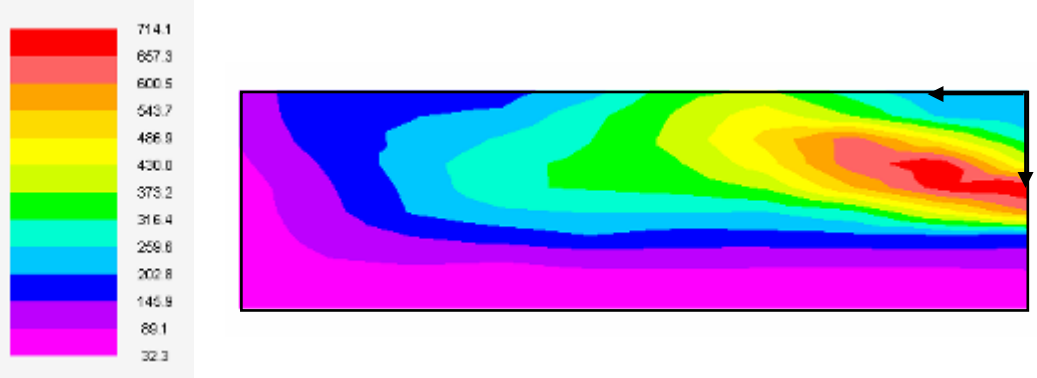


Figure IV-23 : carte de : d) temps de séjour tss ; sans affinage et sans sac de distribution.

Pour le cas non affiné, les grains sont de morphologie dendritique et le temps tsc est comparativement plus court que dans le cas affiné. Il apparaît que la carte de composition en Mg est moins complexe dans le cas non affiné et on pourrait penser que la circulation du liquide interdendritique ait un effet plus important dans le cas non affiné.

IV-3.3. Conclusion :

D'après notre étude bibliographique, nous avons vu que l'ajout d'affinant transforme la structure des grains : si les grains représentent une structure colonnaire et grossière, elle devient totalement équiaxe, de type duplex au centre du lingot [Fin, 92], et si les grains représentent une structure équiaxe grossière, elle passe à une structure équiaxe fine. En modifiant la morphologie, la taille et la microstructure de solidification, l'ajout d'affinant modifie la macroségrégation. Cette dernière passe d'une ségrégation négative au centre à une ségrégation positive lorsque l'affinage est pris en compte [Fin, 92]. En revanche, pour une coulée de plaque, l'ajout d'affinant augmente l'intensité de la macroségrégation sans changer l'allure générale du profil pour le cas où la coulée a été réalisée en utilisant le sac de distribution. En comparant les cartes de temps de séjours de particules et les cartes de macroségragtion obtenues expérimentalement, nous avons observé que la distribution du temps de séjours de particules entre la température de liquidus et la température de cohérence

devient plus intense lorsque l'affinage est pris en compte. Malgré le fait que les cartes de temps de séjour de particules n'est pas identique à la carte de la macroségrégation obtenue par analyse des échantillons, nous pouvons déduire qu'elles permettent de prédire la macroségrégation sur le plan de sortie du lingot.

IV-4. Conclusion :

Plusieurs paramètres influencent la microstructure et la macroségrégation. Pour cela, dans ce chapitre, nous avons essayé d'étudier l'influence de ces paramètres autant liés au calcul numérique que les méthodes techniques de la coulée semi-continue afin de mettre en place des critères simple à partir d'une analyse de l'hydrodynamique et de la thermique de la coulée semi-continue pour prévoir les zones de la macroségrégation.

L'analyse hydrodynamique contenant une description consistait à traiter l'étude de l'emplacement de particules lors de leur solidification. Dans cette analyse, nous avons étudié le principe de calcul de l'emplacement de particules suivis d'une étude de sensibilité du modèle au pas de temps et au choix de la méthode d'intégration. Il était montré que malgré l'influence de ces paramètres sur la trajectoire des particules, la distribution des informations nécessaires contenues par chaque particule reste la même.

D'autre part, nous avons effectué une analyse thermique afin de trouver des critères permettant de prédire les zones de la macroségrégation. Cette analyse nous a permis de déduire que les cartes de temps de séjour de particules entre la température de liquidus et la température de cohérence permettent d'avoir une idée sur la distribution de la microstructure et la macroségrégation sur le plan de sortie.

Après avoir présenté la description des deux modèles, nous allons présenter dans le chapitre suivant les résultats du couplage entre les deux modèles et leur comparaison avec les résultats expérimentaux.

Chapitre V : COUPLAGE MICRO/MACRO :

V-1. Introduction :

Dans les chapitres précédents, nous avons vu que la convection est un paramètre très important parmi ceux qui influencent la microstructure et la macroségrégation. Nous avons dans le chapitre précédent étudié le mouvement de particules fluides sans prendre en compte leur croissance. Par ailleurs, dans le chapitre trois, nous avons mis en place un modèle de prédiction de la taille et de la morphologie des microstructures.

Dans ce chapitre, nous allons étudier le couplage entre les deux modèles présentés précédemment (trajectoire et croissance).

V-2. Principe :

Le principe de cette étude consiste à coupler les deux modèles de calcul de trajectoire et de croissance définis précédemment.

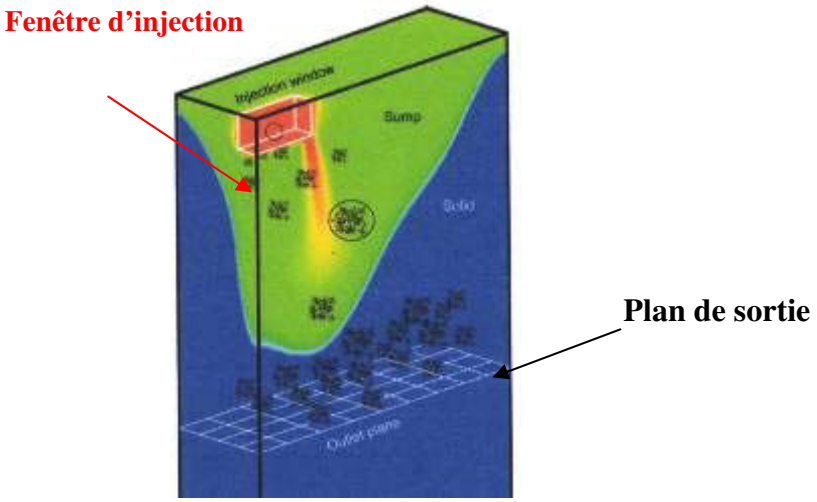


Figure V-1 : schéma du principe du modèle.

La figure V-1 présente schématiquement le principe du modèle. Au début du calcul, des particules sont injectées depuis une fenêtre d'injection. Elles sont initialement liquides, et elles se déplacent alors soit à la vitesse du produit, soit à la vitesse calculée par un code

macroscopique. Leur évolution est calculée à chaque instant t. Dès que des grains germent et commencent à croître, le déplacement de cette particule est alors calculé en considérant qu'elle se déplace à la vitesse moyenne des grains qui la compose. Cette vitesse est calculée à partir du premier principe de la dynamique. Nous avons également considéré le cas où une particule se déplace à la vitesse du produit tout le long de son trajet. Nous appelons ici particule, un volume initialement liquide lorsqu'il arrive dans le procédé. La taille (R0) de ce volume est de l'ordre de celle du volume élémentaire représentatif (V-E-R) utilisé pour effectuer les prises de moyenne dans la zone pâteuse. C'est-à-dire pour des grains équiaxes, R0 est de l'ordre de quelques diamètres moyens de grains. Des grains vont germer et croître à l'intérieur de cette particule. Nous supposons donc que :

- Les grains équiaxes qui germent dans une particule restent dans cette particule ;
- Une particule n'échangent pas de matière avec l'extérieur, à part des fragments de dendrites qui peuvent pénétrer dans une particule.

La figure V-2 présente schématiquement les différentes étapes d'un calcul de ce type :

- La lecture de l'ensemble des données nécessaires pour calculer l'évolution des particules (définition de la fenêtre d'injection, domaine de calcul, maillage…etc) ;
- Calcul des positions initiales de chaque particule en appliquant la loi de probabilité pondérée par le débit traversant chaque maille de la fenêtre d'injection ;
- Calcul des trajectoires et de la croissance de grains à chaque instant t.

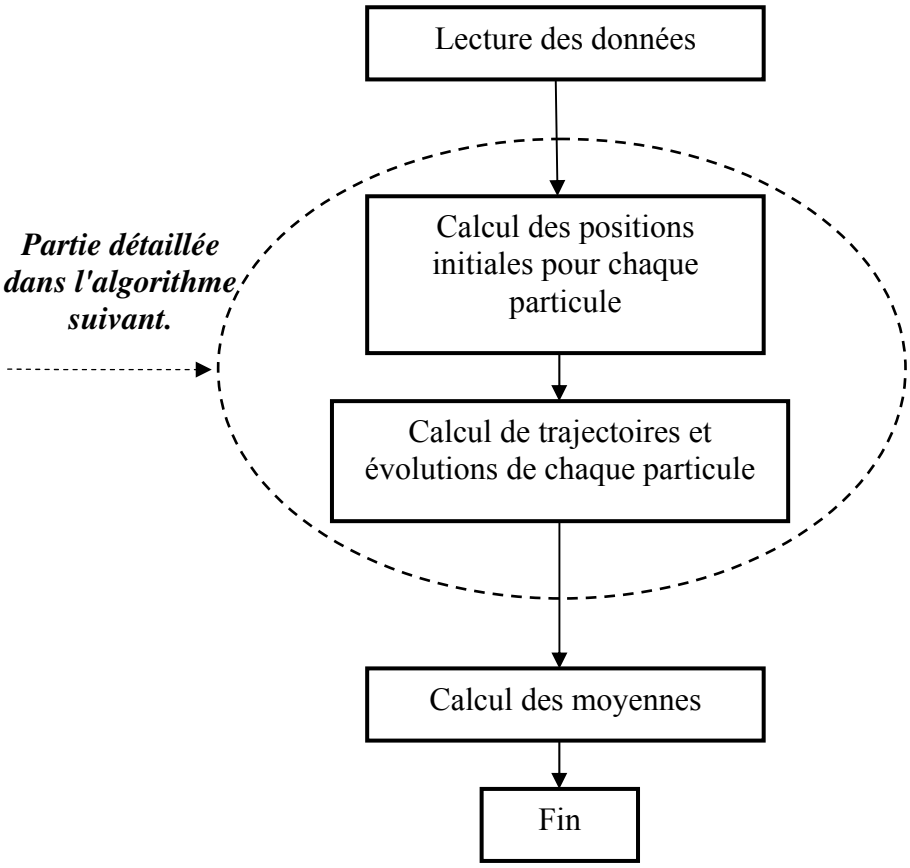


Figure V-2 : organigramme de principe de couplage Micro /macro

La figure V.3 présente les différentes étapes suivies afin de calculer la trajectoire et la croissance des grains dans cette particule. Lorsque toutes les particules sont sorties du domaine (c'est-à-dire qu'elles ont atteint le plan de sortie), on calcule les moyennes des informations obtenus (le diamètre, le DAS, …etc).

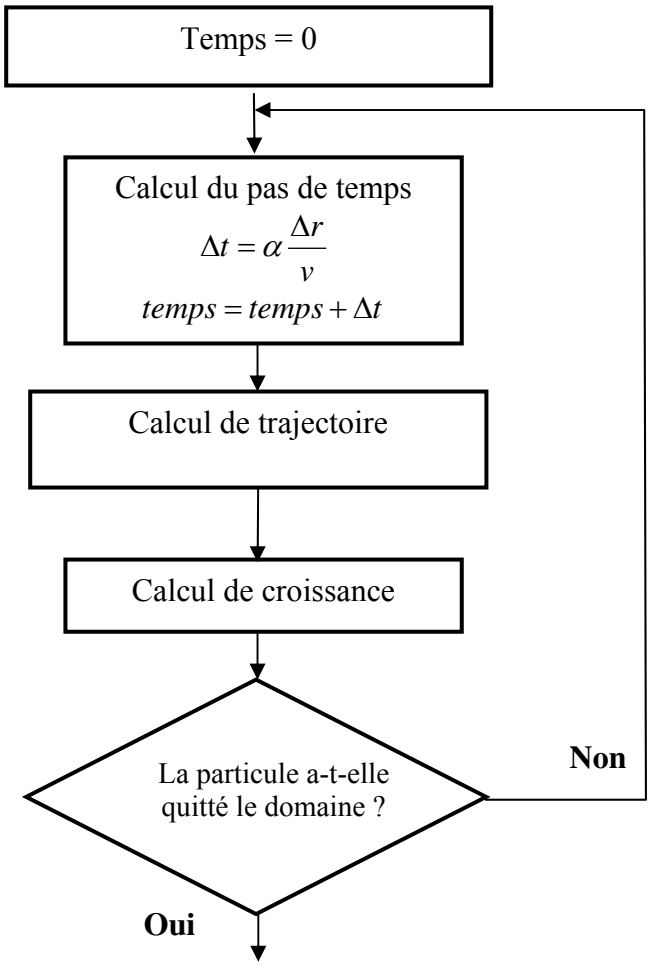


Figure V-3 : organigramme décrivant les étapes suivies dans la partie **(A)** présenté dans figure V-2.

Le calcul de la vitesse d'une particule est le point nouveau qui provient du couplage entre le mouvement et la germination-croissance. Nous allons présenter le modèle utilisé pour déterminer le déplacement d'une particule.

V-3. Calcul de la croissance et du mouvement :

Nous avons vu dans le chapitre II que le mouvement relatif de la phase solide par rapport au liquide pouvait avoir un effet important sur l'évolution du cristal. D'autre part, les grandeurs caractéristiques des grains telles que leur taille et leur morphologie (compacte ou dendritique) influencent ce mouvement relatif et modifient la trajectoire des grains.

Dans cette étude, nous avons pris en compte les forces appliquées sur les grains, la trajectoire d'une particule est alors calculée par intégration du premier principe de la dynamique.

V-3.1. Forces appliquées sur les grains :

Nous considérons que le mouvement d'une particule est donné par le mouvement moyen des grains qui se trouvent à l'intérieur de cette particule. Nous supposons de plus que le mouvement moyen est identique au mouvement calculé avec les grandeurs moyennées sur tous les grains présents dans la particule. Le mouvement d'un grain est décrit par la relation fondamentale de la dynamique comme suit :

$$\frac{d}{dt}\left(\rho_p vol_p \overrightarrow{U_p}\right) = \overrightarrow{F_p} + \overrightarrow{F_A} + \overrightarrow{F_T} \qquad \textbf{(V-2)}$$

Avec :

- $\overrightarrow{F_P} = \rho_P vol_P \vec{g}$: le poids de la particule ;
- $\overrightarrow{F_A} = -\rho_{liq} vol_P \vec{g}$: la poussée d'Archimède ;
- $\overrightarrow{F_T} = -\frac{1}{2} Cd\, S_P\, \rho_{liq} \left\|\overrightarrow{U_{rel}}\right\| \overrightarrow{U_{rel}}$: la force de la traînée.

Où :

ρ_{liq} : est la masse volumique du liquide ;

ρ_P : la masse volumique de la particule sphérique : avec $\rho_p = \left(\rho^l (1 - g_i) + g_i \rho^s\right)$;

S_P : le maître couple de la particule, égal à πR^2 dans le cas d'une sphère de rayon R ;

$\overrightarrow{U_{rel}} = \overrightarrow{U_P} - \overrightarrow{U_{liq}}$: la vitesse relative du barycentre de la sphère par rapport au liquide ;

$\overrightarrow{U_{liq}}$: est la vitesse barycentrique du liquide.

Cd : est le coefficient de traînée, c'est une fonction de nombre de Reynolds ($\mathrm{Re} = \frac{\rho_{liq} deqp \left\| \overrightarrow{U_{rel}} \right\|}{\mu_{liq}}$) et de la nature de l'écoulement autour de la sphère caractérisée par le nombre de Reynolds.

Dans un premier temps, le coefficient de traînée a été calculé en choisissant la corrélation semi-empirique de Brauer, pour une sphère en mouvement uniforme au sein d'un écoulement stationnaire uniforme.

$$Cd = B_{CD}(\mathrm{Re}) = \frac{24}{\mathrm{Re}} + 3{,}73\,\mathrm{Re}^{-1/2} - 4{,}83.10^{-3}\sqrt{\mathrm{Re}}\ \left(1 + 3.10^{-6}\,\mathrm{Re}\sqrt{\mathrm{Re}}\right)^{-1} + 0{,}49 \qquad \textbf{(V-3)}$$

Cette expression de la force de traînée est valable pour une particule sphérique. Cependant, il est difficile d'assimiler un cristal équiaxe dendritique à une sphère. Quelques études ont montré que le cas de la sphère conservait sa valeur de référence si on lui comparait l'enveloppe du cristal et non pas la structure dendritique. Dans ce cas, l'expression de coefficient de traînée ne peut pas être utilisable à cause de la variation de la taille du cristal, son asphéricité et sa perméabilité (lorsque ce cristal est dendritique).

En négligeant la variation de la quantité de mouvement induite par la variation de masse du cristal, Appolaire [App, 00] a étudié l'influence de la forme et la perméabilité du cristal pour un faible et un grand nombre de Reynolds. Dans le paragraphe suivant, nous allons présenter le modèle développé par Appolaire.

V-3.1.1. Prise en compte de la perméabilité et de la forme des grains :

L'effet de la forme du cristal est pris en compte par un facteur Ψ dit de sphéricité définit comme étant le rapport de la surface de la sphère équivalente As à la surface de la particule asphérique Ans :

$$\Psi = \frac{As}{Ans} \qquad \textbf{(V-4)}$$

L'influence de la forme d'une particule se traduit par l'intermédiaire du rapport Kse. Ce dernier est défini comme le rapport de la vitesse limite de Stokes réelle Uns, d'une particule de forme quelconque à la vitesse limite de Stokes Us d'une sphère équivalente, de même volume et de même masse que la particule asphérique. Kse peut s'écrire sous la forme de la corrélation suivante :

$$Kse = \frac{Uns}{Us} = 0.843 Log\left(\frac{\Psi}{0.065}\right) \qquad \textbf{(V-5)}$$

Plus l'asphéricité est grande, moins la particule chute rapidement en comparaison de sa sphère équivalente.

D'autre part, l'effet de la perméabilité se traduit par le rapport $\frac{1}{\Omega_\beta}$ de la vitesse limite de stokes de la sphère poreuse Uperm sur la vitesse limite de Stokes d'une sphère non poreuse Uimp de dimensions et de densité égale à celles de la sphère poreuse tel que:

$$\frac{U_{perm}}{U_{imp}} = \frac{1}{\Omega_\beta} = \frac{2\beta^2 + 3\left(1 - \tanh\beta / \beta\right)}{2\beta^2\left(1 - \tanh\beta / \beta\right)} \qquad \textbf{(V-6)}$$

Avec β : le rapport du diamètre de la sphère poreuse à la racine carré de sa perméabilité : $\beta = \frac{2R}{\sqrt{K_p}}$.

La perméabilité des particules K_p peut être estimée à l'aide de la relation de Carman-Kozeny :

$$K_p = \frac{(1 - g_i)^3}{5\left(\frac{S_s}{V_{env}}\right)^2} \qquad \textbf{(V-7)}$$

Plus la perméabilité est grande, plus la sphère chute vite.

L'expression du coefficient de traîné en combinant les deux effets s'écrit :

$$C_d = \frac{\Omega_\beta}{Ks_e} Bc_D(\mathrm{Re}) \qquad \textbf{(V-8)}$$

Après avoir défini le coefficient de traînée, on calcule la vitesse de la particule selon le principe fondamental de la dynamique suivant l'équation suivante :

$$\rho_P vol_P \frac{d\overrightarrow{U_P}}{dt} = \left(\rho_{liq} - \rho_P\right) vol_P \vec{g} - \frac{1}{2} Cd\, S_P\, \rho_{liq} \left\|\overrightarrow{U_{rel}}\right\| \overrightarrow{U_{rela}} \qquad \textbf{(V-9)}$$

V-3.2. Intégration du mouvement des grains :

L'intégration du système d'équations différentielles :

$$\begin{cases} \rho_p vol_p \dfrac{d\overrightarrow{U_p}}{dt} = \sum \vec{F} \\ \dfrac{d\overrightarrow{r_p}}{dt} = \overrightarrow{U_p} \end{cases} \qquad \textbf{(V-10)}$$

Permet de déterminer à chaque instant la position d'une particule. Nous avons mis en œuvre trois méthodes d'intégrations :

- Euler : En utilisant la méthode d'Euler le schéma est le suivant :

$$\begin{cases} \overrightarrow{U_{p1}} = \overrightarrow{U_{p0}} + \Delta t\left(\sum \overrightarrow{F_{ext0}}\right) \\ \vec{r_1} = \vec{r_0} + \Delta t\overrightarrow{U_{p1}} \end{cases} \qquad \textbf{(V-11)}$$

  Avec l'indice 0 signifie à l'instant t et 1 à l'instant $t + \Delta t$;
- Runge-Kutta d'ordre 2 (voir annexe IV) ;
- Runge-Kutta d'ordre 4 (voir annexe IV);

V-3.3. Conclusion :

Après avoir présenté le modèle couplant entre les modèles de trajectoire et de croissance, nous allons voir son application à des cas de coulée semi-continue. Nous résumons les différentes possibilités de calcul que le modèle est capable de réaliser :

- Vitesse du tirage du produit est imposée sur les grains dès leur injection ;
- Vitesse du tirage du produit imposée puis forces activées lorsque les grains atteignent la température de liquidus ;
- La prise en compte de la convection ;
- La prise en compte de la convection et des forces lorsque les grains atteignent la température de liquidus.

V-4. Application à des cas de coulée semi-continue :

V-4.1. Introduction :

Après avoir présenté un modèle capable de prédire une distribution de taille de grain, de Das, et de morphologie sur le plan de sortie, nous allons étudier son application à des coulées de plaques d'alliage d'aluminium. Nous avons repris les deux cas 3D du chapitre précédent qui offrent pour le même format de plaque quatre configurations différentes : avec ou sans combo-bag ; affiné ou non affiné.

Dans le chapitre précédent, nous avons montré la limite d'un calcul de trajectoire des particules, aussi nous avons mené deux types de calcul :

- Les particules se déplacent à la vitesse du produit tout le long de leur trajectoire ;
- Les particules se déplacent à la vitesse du produit jusqu'au moment où la fraction de solide devient non nulle. Le calcul de la trajectoire en prenant en compte les forces qui agissent sur les grains est alors activé.

V-4.2. Conditions de calcul :

Nous avons appliqué le principe décrit précédemment à la coulée de plaque de dimension :

- Hauteur : 2 m ;
- Largeur : 1m 86 ;
- Epaisseur : 0,55 m.

Les caractéristiques de cette coulée ont été décrites dans le chapitre précédent. Nous rappelons que la vitesse de tirage est égale à 0.001m/s ;

Le tableau (tab V-1) présente les principales données utilisées :

Quantités et unités	***Valeur***
Chaleur spécifique des phases liquide et solide (J/kg/°C)	1175
Chaleur latente (J/kg)	$0.39750\ 10^{6}$
Température de liquidus (°C)	634.09
Coefficient de Gibbs Thompson (K.m)	$1.374\ 10^{-7}$
Pas de temps (s)	$5\ 10^{-3}$
Taille initiale des grains (m)	10^{-6}
Magnésium :	
Coefficient de diffusion chimique dans la phase liquide (m²/s)	$3\ 10^{-9}$
Coefficient de diffusion chimique dans la phase solide (m²/s)	$1\ 10^{-13}$
La pente de liquidus (K/wt.pct.)	-6.15
Coefficient de partage	0.49
Composition nominale (%mass)	5

Table V-1 : paramètres utilisés dans la simulation.

La figure V-4 présente les deux lois d'évolution de la température en fonction de la fraction solide pour les deux coulées avec et sans sac de distribution.

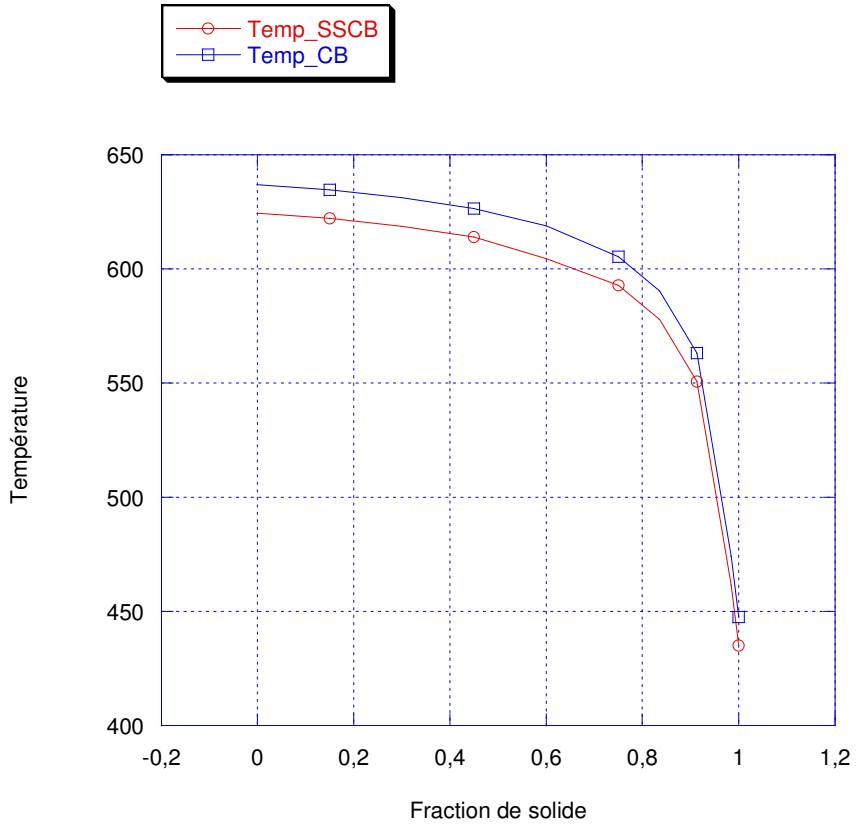


Figure V-4 : paramètres utilisés dans la simulation pour le cas avec et sans sac de distribution.

La loi d'évolution pour le calcul sans combo-bag a été modifiée à notre initiative afin d'abaisser la température de liquidus. La simulation pour le code ALSIM conduisait en effet à un puits liquide en surfusion de quelques degrés. Une telle surfusion perturberait les lois de germination que nous employons dans notre modèle. Ces lois d'évolution nous permettent de recalculer en tout point de la trajectoire d'une particule son enthalpie qui est une donnée d'entrée pour le calcul de la germination et de la croissance des grains.

V-4.3. Résultats et discussions :

Le but de cette partie est d'appliquer le modèle à deux coulées réalisées avec et sans sac de distribution, afin de montrer la capacité du modèle à décrire la formation des structures de grains dans un lingot de coulée semi-continue. La description de ces coulées a été présentée précédemment. Il s'agit également d'étudier la sensibilité des résultats aux choix de la loi de germination, de la prise en compte de la convection et des forces appliquées sur les grains.

Les résultats présentés ci-dessous, pour la coulée avec sac de distribution, ont été obtenus par l'utilisation d'une loi de germination gaussienne. Ses différents paramètres sont définis tels que :

- La densité totale de grains est de 2.5 10^{10} grains/m^3 ;
- La surfusion est de 1°C ;
- L'écart type est de 0.3.

La convection et les forces n'ont pas été prises en compte. Les particules sont supposées en mouvement à la vitesse de la coulée à chaque instant. Le nombre total de particules injectées est de 2000 particules, et la dimension de la fenêtre d'injection est de :

- Largeur : 0,93 m ;
- Epaisseur : 0,55m.

Compte tenu de ces paramètres, nous avons obtenu une distribution de la taille de grains uniforme sur le plan de sortie. Le diamètre des grains est d'une valeur de 424µm dans la zone centrale. Ce diamètre final de grains correspond à l'activation de tous les germes. Autrement dit, pour cette distribution de germes, les conditions thermiques dans toute la plaque sont telles que tous les germes peuvent être activés.

Pour identifier la morphologie des grains, nous allons étudier la fraction solide interne gipack. Nous rappelons que lorsque cette dernière est proche de l'unité, les grains sont globulaires. Tandis que si gipack est proche de zéro, les grains sont dendritiques. Sur la figure V-5 nous avons représenté, gipack sur le plan de sortie. Nous observons la présence de deux zones :

1- Une zone centrale où les grains sont globulaires ;
2- A l'intérieur de cette zone, les grains sont dendritiques.

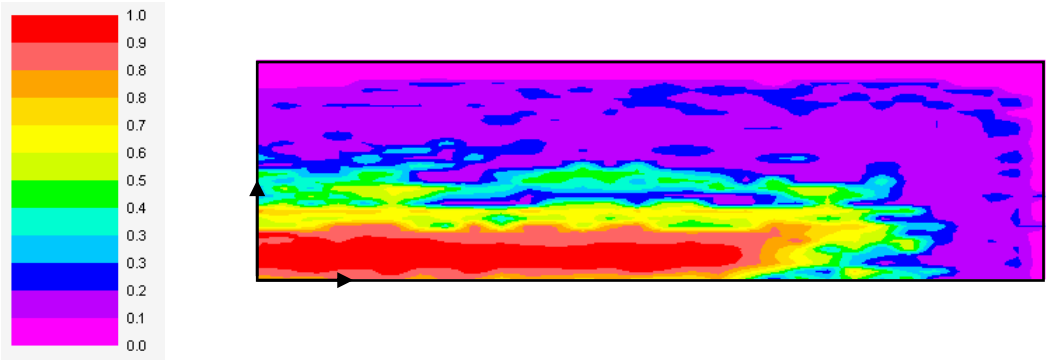


Figure V-5 : distribution de gipack de grains sur le plan de sortie de la coulée avec sac de distribution, sans convection et sans affinant.

V-4.3.1. Influence de l'affinage :

Afin d'étudier l'influence de l'affinage, nous avons appliqué le modèle aux deux coulées : avec et sans sac de distribution, en prenant en compte l'affinage. Pour cela, nous avons utilisé la loi de distribution de Greer.

De même que pour la loi de germination précédente, nous avons obtenu une distribution uniforme de taille de grain dans le plan de sortie pour les deux configurations avec et sans sac de distribution. Le diamètre final des grains est dans les deux cas égal à 220µm, ce qui correspond à l'activation de tous les sites de germination potentiels.

Dans le but d'étudier la morphologie des grains, nous avons présenté sur la figure V-6 la répartition de gipack sur le plan de sortie pour les deux coulées (avec et sans sac de distribution). Nous rappelons que la convection n'a pas été prise en compte.
L'observation des deux figures V-6 a et b, nous permet de constater que :

- Dans les deux cas envisagés, les grains sont globulaires au centre du lingot, et dendritiques en se dirigeant vers la peau.
- L'étendue de la zone de grains globulaires est plus importante dans le cas de l'utilisation d'un sac de distribution.

L'utilisation du sac de distribution dans la coulée permet d'obtenir une répartition des grains plus homogène dans le plan de sortie.

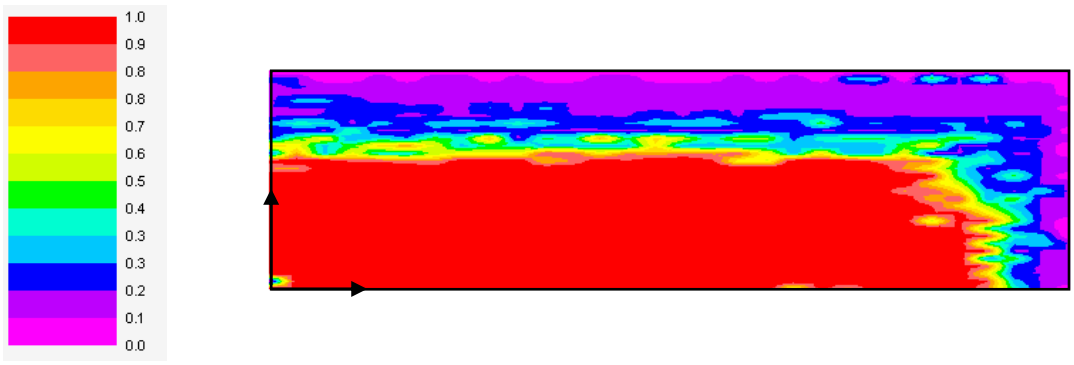


Figure V-6a : distribution de gipack de grains sur le plan de sortie de la coulée sans sac de distribution, sans convection et avec grains affinés.

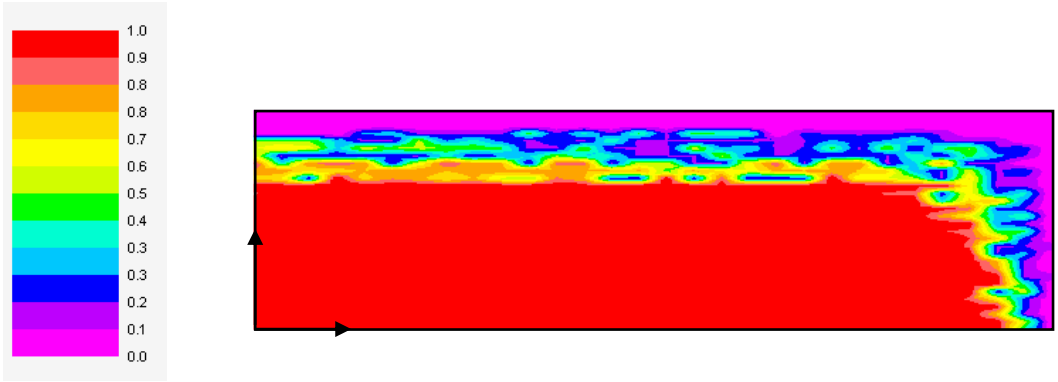


Figure V-6b : distribution de gipack de grains sur le plan de sortie de la coulée avec sac de distribution, sans convection et avec grains affinés.

V-4.3.2. Influence des forces :

Dans ce qui va suivre, nous allons étudier l'influence des forces sur l'évolution des grains. En effet, nous avons appliqué le modèle aux deux coulées (avec et sans sac de distribution) pour les cas affiné et non affiné. Les grains sont considérés en mouvement à la vitesse du produit jusqu'à ce qu'ils atteignent la température du liquidus. A cet instant là, on tient compte des forces appliquées sur les grains en mouvement. Les grains se retrouvent à nouveau avec la vitesse du produit imposée lorsque la fraction de liquide extradendritique atteint une valeur critique que nous avons fixée à 0,5.

L'application du modèle avec prise en considération des forces mène de nouveau à une taille de grain uniforme dans le plan de sortie. Le diamètre final des grains étant égal à :

- 220µm pour le cas où les grains sont affinés ;
- 423µm pour le cas où les grains ne sont pas affinés.

On note sur la figure V-7 que pour les deux systèmes de distribution les grains se trouvant dans les zones les plus pentues du marais se déplacent et l'on ne trouve pas de grains arrivant dans ces zones. Ce résultat s'observe sur ces figures par la couleur rose qui correspond aux zones où aucune particule n'arrive (la distribution de particules sur le plan de sortie présentée dans l'annexe IV). Il vient alimenter l'hypothèse de l'accumulation de grains au fond du marais.

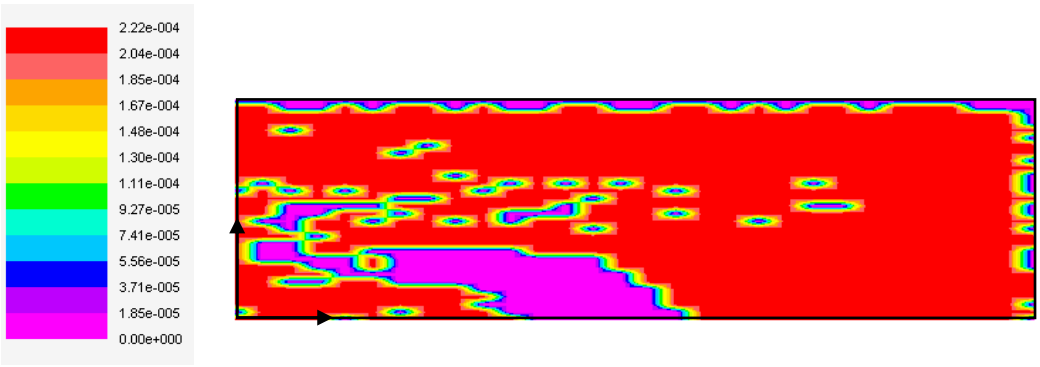


Figure V-7a : distribution de la taille de grains sur le plan de sortie pour la coulée sans sac de distribution, sans convection, avec grains affinés et forces activées au liquidus.



Figure V-7b : distribution de la taille de grains sur le plan de sortie pour la coulée avec sac de distribution, sans convection, avec grains affinés et forces activées au liquidus.

Nous abordons maintenant la morphologie des grains. Sur les figures V-8 a et b nous observons que pour le cas où la coulée est sans sac de distribution, les grains sont globulaires au centre du lingot et dendritiques en se dirigeant vers la peau.

En outre, pour les cas sans ajout d'affinant, sur les figures V-9 a et b, nous observons que :

- Les grains sont majoritairement dendritiques dans le cas où la coulée est sans sac de distribution ;
- Les grains sont globulaires au centre du lingot et dendritiques en se dirigeant vers la peau dans le cas avec sac de distribution.

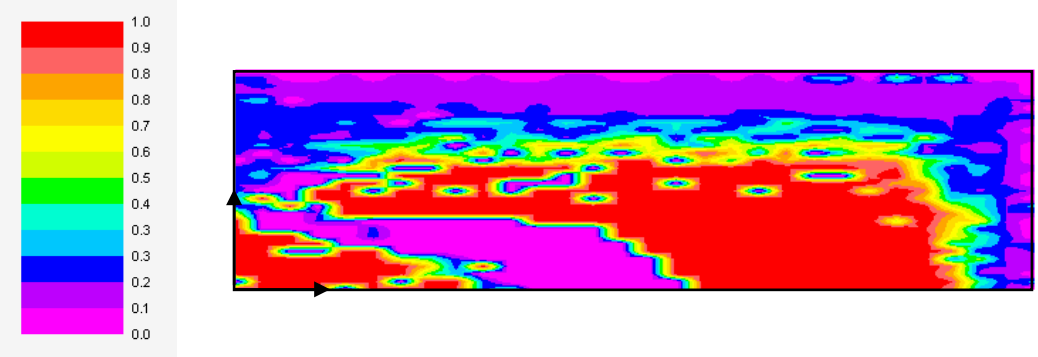


Figure V-8a : distribution de gipack de grains sur le plan de sortie de la coulée sans sac de distribution, sans convection et avec grains affinés et forces activées au liquidus.

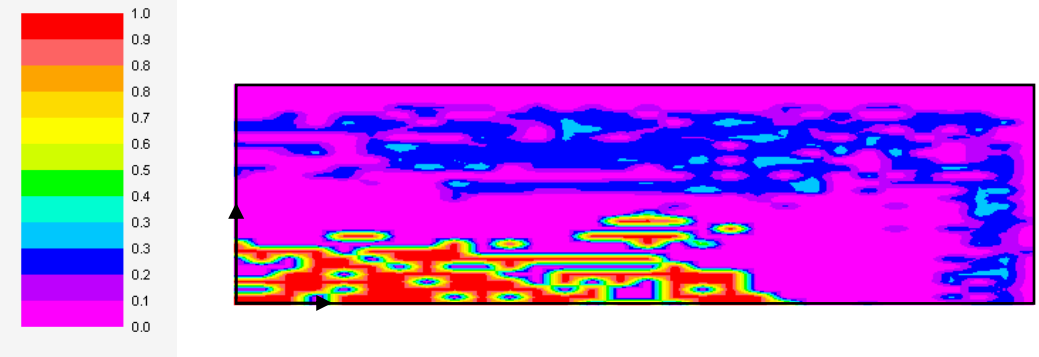


Figure V-8b : distribution de gipack de grains sur le plan de sortie de la coulée avec sac de distribution, sans convection et avec grains affinés et forces activées au liquidus.

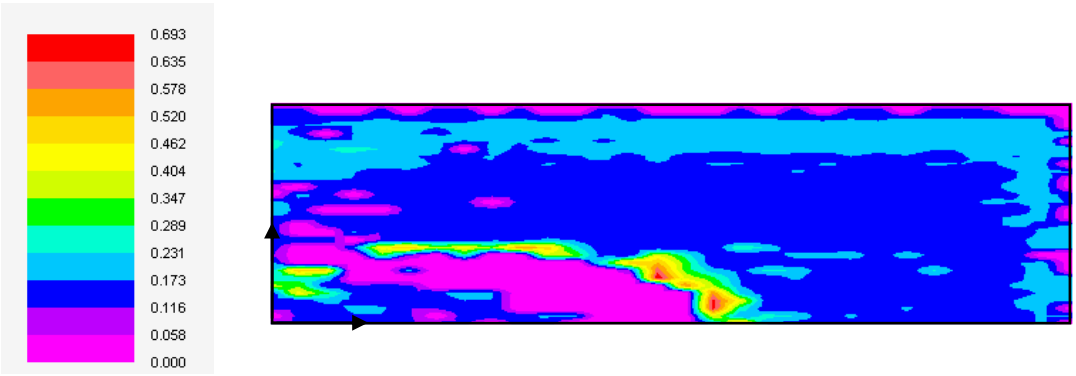


Figure V-9a : distribution de la taille de grains sur le plan de sortie pour la coulée sans sac de distribution, sans convection, sans grains affinés et forces activées au liquidus.

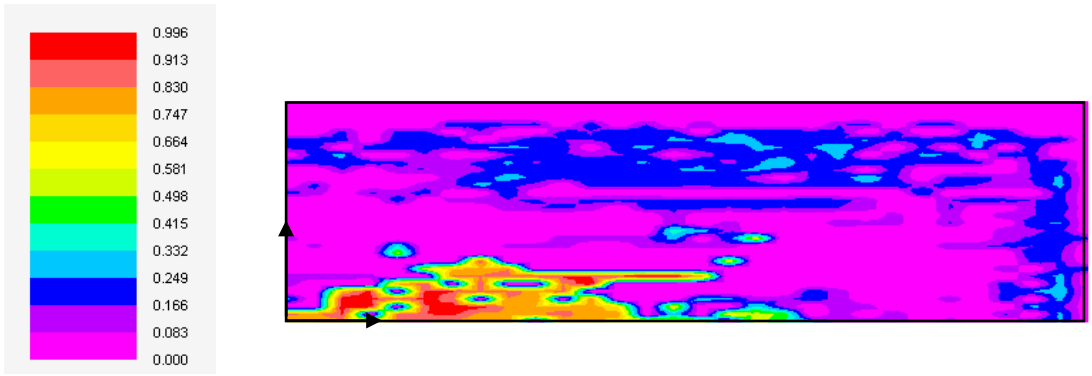


Figure V-9b : distribution de la taille de grains sur le plan de sortie pour la coulée avec sac de distribution, sans convection, sans grains affinés et forces activées au liquidus.

Dans la partie suivante, nous allons utiliser l'ensemble des résultats obtenus pour interpréter les mesures de tailles de grains faites sur les plaques EMPACT.

V-4.4. Comparaison avec les résultats expérimentaux :

Dans cette partie, nous allons présenter une étude comparative des résultats obtenus par le modèle, avec les résultats expérimentaux obtenus, dans le cadre du projet Brite-Euram BE-1112 Empact, pour les deux lingots d'alliage 5182 coulés avec combo-bag. Ces derniers ont été coulés dans les mêmes conditions exceptées l'affinage de grains. Le premier a été obtenu par addition de 1kg/tonne de AlTi3%B2% et le deuxième sans affinage de grains.

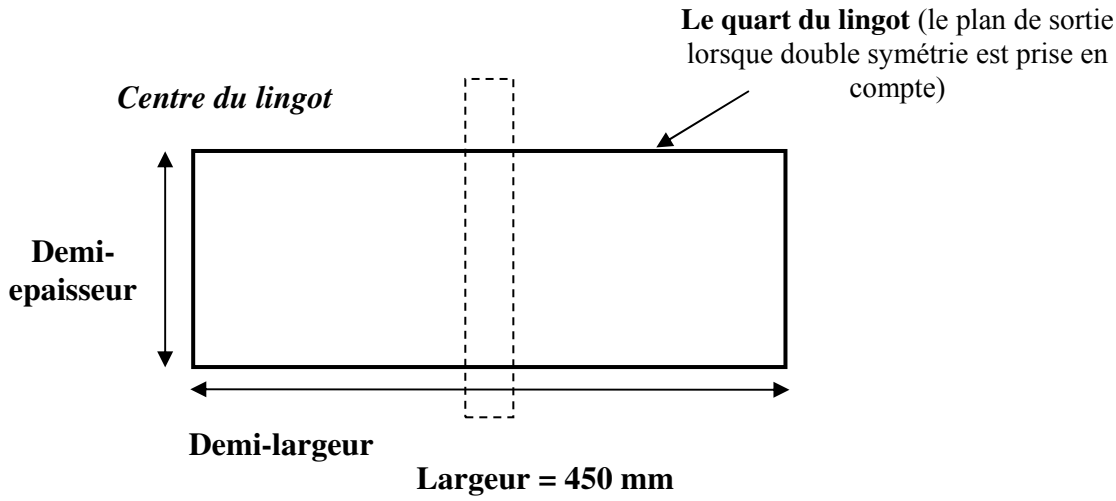


Figure V-10 : schéma de la zone de comparaison.

La figure V-11 présente l'évolution mesurée de la taille de grains en fonction de la distance à la peau, le long de la demie-épaisseur située à 450 mm dans le sens de la largeur, (figure V-10). Cette figure présente une étude comparative entre les résultats obtenus en utilisant la loi gaussienne comme loi de germination, et les résultats expérimentaux obtenus (EMPACT) dans le cas d'une coulée à convection naturelle et sans grains affinés.

D'après la figure V-11, nous observons qu'à partir de la courbe expérimentale, nous remarquons que la taille des grains augmente de 350 µm à 550µm, pour le cas où la coulée est sans affinage. Celle-ci diminue ensuite jusqu'à 300µm au centre de la plaque. En revanche, la taille des grains obtenue numériquement pour la distribution Gaussienne est uniforme de l'ordre de 423µm.

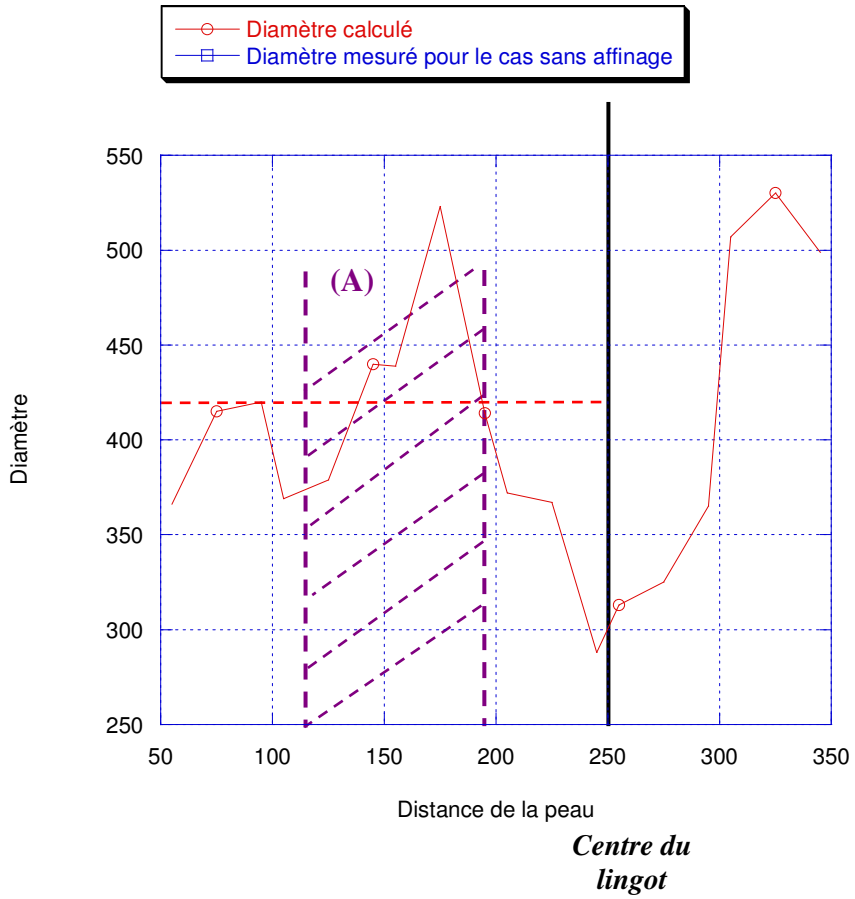


Figure V-11 : évolution de taille de grains en fonction de la distance de la peau vers le centre, comparaison entre les résultats expérimentaux (grains non affinés) et les résultats numériques en utilisant la loi de distribution Gaussienne.

Pour la coulée avec grains affinés, nous allons comparer les résultats expérimentaux de taille de grains, avec les résultats numériques en utilisant la distribution de germes de Greer.

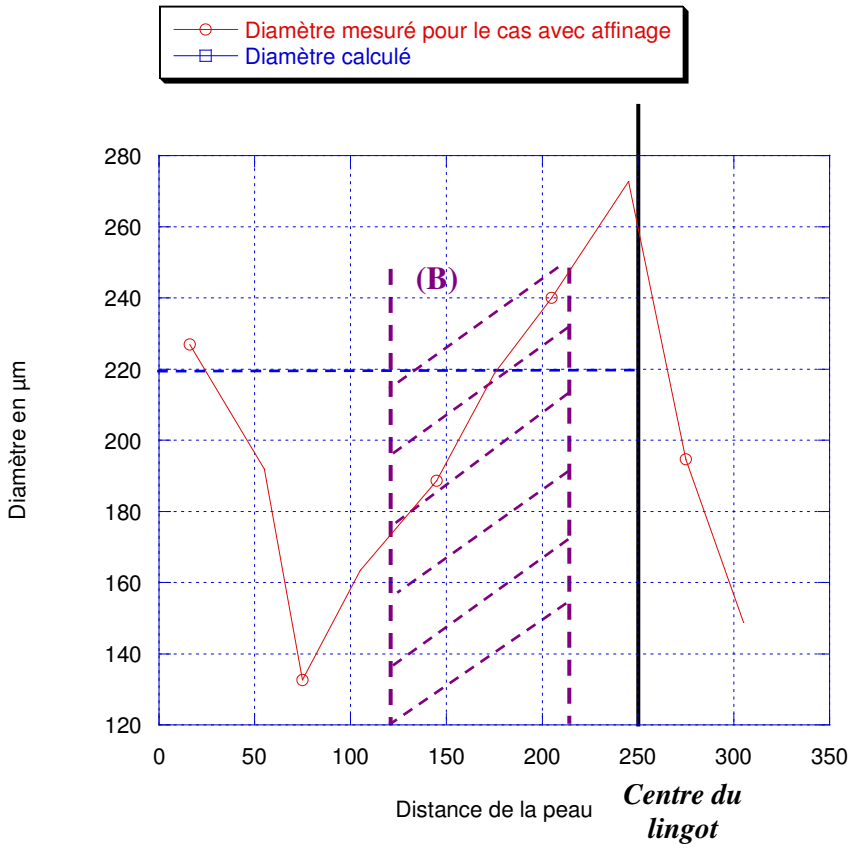


Figure V-12 : évolution de taille de grains en fonction de la distance de la peau vers le centre, comparaison entre les résultats expérimentaux (grains affinés) et les résultats numériques en utilisant la loi de distribution de Greer.

Les résultats expérimentaux, figure V-12, ont montré que les grains sont de type dendritiques en surface et globulaires au centre du lingot [DAL, 02]. L'évolution de la taille de grains en fonction de la distance à peau vers le centre obtenue expérimentalement, nous montre que lorsque les grains sont affinés la taille des grains diminue d'un facteur deux.

L'étude comparative des figures V-11 et V12 sur une distance de la peau de l'ordre de 100mm nous permet d'observer que dans le cas où les grains ne sont pas affinés, nous remarquons l'absence de diminution de la taille de grains moyenne mesurée. Nous avons montré dans le chapitre III que le fait de tenir compte de la présence de fragments nous induit une taille de grains moyenne calculée petite. Cette observation nous permet d'interpréter le résultat de taille de grains petite obtenue expérimentalement dans la figure V-11. Cependant, cette taille de grains peut être encore plus faible si on prend en compte en plus l'affinage. D'autre part, à l'échelle de notre modèle, nous avons obtenu ces mêmes résultats par calcul dans le chapitre III.

Si on continue l'étude de ces deux figures de 100mm à 250mm de la peau, on constate que l'évolution de la taille de grains en fonction de la distance à la peau, est identique dans les deux cas, avec ou sans affinage. En outre, pour une épaisseur de 200mm, la taille de grains augmente pour atteindre une valeur de l'ordre de 270µm, taille due principalement au phénomène de transport des grains vers le centre du lingot. Ce dernier conduit à une diminution de la taille de grains jusqu'à une valeur de 150µm au centre.

Le chapitre précédent nous a permit de remarquer que la taille de grains obtenue par calcul est uniforme et est égale à 220µm pour le cas où les grains sont affinés et lorsque les forces appliquées sur les grains n'ont pas été prises en compte. Pour mieux appréhender les résultats obtenus expérimentalement nous avons partagé la figure V-12 en deux zones principales où les grains y ont migré vers le centre. La zone A représente le cas où les grains sont affinés, et la zone B pour le cas de non affinage. Ce phénomène de migration des grains est à l'origine de l'évolution de la taille de grains obtenue sur les figures V-11 et V-12.

V-5. Conclusion :

Dans le cas d'une coulée semi-continue, des phénomènes influencent à différentes échelle la macro et microstructure comme : la germination, la fragmentation, et la croissance des grains sur les échelles microscopique, le mouvement de grain et leur histoire thermique à une échelle macroscopique. Afin d'obtenir une description précise, nous avons couplé entre un modèle micro et un modèle macro en 3D.

Le modèle a été appliqué à deux cas expérimentaux 3D cartésien. Une étude de sensibilité a été faite afin de montrer la capacité du modèle à prédire des micro/macro structure. Les résultats obtenus ont été comparé avec des résultats expérimentaux, nous concluons que le modèle est capable d'aider à l'interprétation de la distribution de taille de grain et de la morphologie des grains dans une section d'une plaque.

Chapitre VI : CONCLUSION GENERALE :

VI- Conclusion générale :

Au cours de cette étude, nous nous sommes intéressés au mouvement des grains équiaxes, afin d'obtenir un code de calcul capable de prédire les ségrégations chimiques et les structure de solidification observées dans les zones équiaxes des lingots d'aluminium coulés en semi-continue. En effet, dans le cas de ce processus, des phénomènes se produisent à différentes échelles influençant la formation des macro et micro structures. Parmi ces phénomènes, on cite la germination, la croissance des grains à l'échelle microscopique, leur mouvement et leur histoire thermique à l'échelle macroscopique.

Afin d'obtenir une description complète de la solidification, nous avons développé dans un premier lieu, un modèle qui prend en compte à la fois la germination et la croissance des grains équiaxes. Ce modèle permet d'illustrer l'influence des différentes lois de germination, permettant de décrire aisément l'évolution de la densité de grains en fonction de la surfusion, sur la taille moyenne et la morphologie de ces derniers.

Cette première étude a permis de conclure que le choix de la loi de distribution influence directement la taille et la morphologie des grains. En utilisant la loi de distribution de Greer, nous obtenons généralement des grains globulaires. En utilisant la loi de distribution gaussienne, et en fonction de l'ajustement des paramètres décrivant cette loi, la morphologie des grains peut être globulaire ou dendritique. En fonction de la densité des grains injectés, les grains sont, soit globulaires, soit dendritiques. Et enfin, le couplage entre la loi de distribution de Greer et l'injection des grains, arbore que les grains sont globulaires et plus fins.

Nous avons essayé par la suite de mettre en place des critères simples à partir d'une analyse de l'hydrodynamique et de la thermique de la coulée semi-continue, permettant de prédire les zones de macroségrégation.

A partir de l'analyse thermique, nous avons montré qu'à partir des cartes de temps de séjour de particules, nous pouvons interpréter la distribution de la microstructure et la macroségrégation sur le plan de sortie.

Finalement, nous avons couplé entre le modèle micro et macro en 3D. Il a été appliqué à deux cas expérimentaux 3D cartésien afin de montrer la capacité du modèle à prédire des micro/macro structures. Les résultats obtenus ont été comparés avec des résultats expérimentaux, ce qui nous a permis de démontrer que le modèle est capable d'aider à l'interprétation de la distribution de la taille de grains dans une section d'un lingot coulée en semi-continue.

BIBLIOGRAPHIE

[Abr, 65] M. Abramowitz et I.A Stegun (eds), Handbook of Mathematical Functions, Dover, New York, 1965.

[Ahu, 92] S. Ahuja, C.Beckermann, R. Zakhem, P.D. Weidman et H.C. de Groh III, HTD-vol. 218/AMD-vol. 139, Micro/Macro Scale Phenomena in solidification, ASME, 1992, p.85.

[App, 00] B.Appolaire, thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Lorraine, 2000.

[Alu, 64] Utilisez l'aluminium, Les onférences du centre téchnique des industries mécaniques, la journée téchnique du 3 novembre 1999.

[Bec, 96] C.Beckermann and J.Ni, Int. Comm. Heat Mass Transfer, Vol.23, No3, pp. 315-324, 1996.

[Bob, 88] M.Bobadilla, J.Lacaze et G.Lesoult, J.Cryst.Growth 89, 1988, 531.

[Bri, 47] H.C. Brinkman, Appl. Scient. Res. A1, 1947, 27;81.

[Cam, 91] J.Campbell, casting, Butterworth-Heinemann, oxford, Royaumes-unies,1991.

[Chu, 90] Chu M.G. and Jacoby J.E., 1990. Light Metals 1990, pp. 925-930;

[Cli, 78] R. Clift, J.R. Grace et M.E. Weber, Bubbles, Drops ans particles, Academic Press, New York, 1978.

[Cro, 98] C. Crowe, M. Sommerfeld et Y. Tsuji, Multiphase Flows with droplets and particles, CRC Press, Boca Raton, USA, 1998.

[Coa, 68] D.E.Coates, S.V. Subramanian et G.R. Purdy, Trans. Metall.Soc.AIME 242, 1968, 800.

[Com, 96] H.Combeau, J.M.Drezet, A.Mo et M.Rappaz, Metall. Mater. Trans. A 27, 1996, 2314.

[Dal, 02] D.Daloz, H. Combeau, A. Joly, G. Lesoult, G.U. Grün, P. Jarry, B. Commet, Etude sur l'origine de la macroségrégation centrale dans la coulée semi-continue d'aluminium. Tours, 21-25 Octobre 2002, CD-ROM 'Congrès Matériaux 2002 de la conception à la mise en œuvre'.

[Des, 88] P.Desnain, F.Durant, Y.Fautrelle, D. Bloch, J.L.Meyer, J.P.Riquet, in "Light Metals 1988", L.G. Boxall ed., The Met. Soc. AIME1988, pp. 487-494.

[Dor, 90] Dorward R.C. and Beernsten D.J., 1990, Light Metals 1990, pp. 919 – 924.

[Dre, 96] J.M Drezet, Direct chill on electromagnetic casting of aluminium alloys: thermomechanical effects and solidification aspect, Thèse de Doctorat, LMPH, Ecole Polytéchnique Fédérale de Lausanne, Suisse, 1996.

[Finn] Finn T.L., Chu M.G., and Bennon W.D., "The influence of mushy region microstructure on macrosegregation in direct chill cast aluminum-copper round ingots.

[Fin, 92] T.L.Finn, M.G. Chu, and W.D.Bennon, "the influence of mushy region microstructure on macrosegregation in direct chill cast aluminium copper round ingots", Micro/Macro scale phenomena in solidification, ed.C.Beckermann, L.A.Bertram, S.A. Pien and R.E.Smelser(The American Society of Mechanical Engineers, HTD-Vol.218/AMD-Vol.139,1992), 17-26.

[Fle, 74] M.C. Flemings, solidification Processing, Materials science and Engneering, ed. Mc Graw-Hill USA, 1974.

[Fle, 67] M. C. Fleming, , and T.F. Bower, : Trans. AIME, 239, 1620 (1967).

[Fle, 68] Flemings M.C. and Nereo G.E., 1968, Trans. TMS-AIME, 242, (1968),pp. 50-55.

[Gri, 97] Griffiths W.D. and McCartney D.G., 1997, Materials Science and Engineering, A222, 1997, pp. 140- 148.

[Gre, 00] A.L. Greer, A.M. Bunn, Modelling of inoculation of metallic melts: Application to grain refinement of aluminium, acta mater. 48 (2000), 2823-2835.

[Hak, 95] A.Hakonsen, and D. Mortensen, The Minerals, Metals & Materials Society, 1995.

[Hua, 81] S-C Huang et M.E. Glicksman, Acta Metall.29, 1981, 1088.

[Iva, 47] G.P. Ivantsov, Doklady Akademii Nauk SSSR 58, 1947, 567.

[Jal, 00] T.Jalanti, Thèse de Doctorat, LMPH, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Suisse, 2000.

[Jol, 99] A. Joly, G.U. Grün, D. Daloz, H. Combeau, G.Lessoult: effect of grain refinement on macrosegregation in direct chille semi-countinous casting of aluminium sheet ingot. Proc of the 3d INT Conf on Solidification and Gravity, Miskolc, Hungary, April 25-28, 1999 ed. Materials Science Forum 3 Trans Tech Publications. 329-330 (2000) Switzerland-11-12.

[Kaj, 99] T.Kajitani et M.Rappaz, journées d'automne 1999 de la SF2M, Revue de métallurgie, Nanterre, France, 1999, p.143.

[Kaj, 00] T.Kajitani, J-M. Drezet et M.Rappaz, Numerical simulation of deformation induced segregation in continuous casting of steel, soumis à Metall-Mater. Trans, 2000.

[Lan, 77] J.S. Langer et Müller-Krumbhaar, Acta Metall. 26, 1977, 1681; 1689; 1697.

[Mas, 80] J.H. Masliyah et M. Polikar, can. J. Chem. Eng. 58, 1980, 299.

[Max, 75] I.Maxwell, A. Hellawell, Acta. Metall. 23, 1975, 229-237.

[Mo, 97] A.Mo, T.Rusten, H.J. Thevik, B.R. Henriksen et E.K. Jensen, Light Metals 1997, Ed. Reidar Huglen, TMS, 1997, pp 667-674.

[Mor, 91] A. Mortensen, Metall. Trans. A 22, 1991, 569.

[Nea, 73] G. Neale, N. Epstein et W. Nader, Chem. Eng. Esci. 28, 1973, 1865.

[Ni, 91] Ni and Beckermann, Metall.Trans. B. 22B 1991,349-361.

[Ni, 93] J.Ni and C.Beckermann, Int. Comm. Heat Mass Transfer, Vol.23, No3, pp. 315-324, 1993.

[Pet, 48] E.S. PEttyjohn et E.B. Christiansen, Chem. Eng. Progress 44 (2), 1948, 157.

[Rap, 87] M. Rappaz et Ph. Thévoz, Act Metall. 35, 1978, 1487, 2929.

[Red, 95] A.V.Reddy and C.Beckermann, Materials Processing in the Computer Age - II, eds. V.R. Voller, S.P. Marsh and N. El-Kaddah, TMS, Warrendale, PA, 1995, pp. 89-102.

[Red, 97] A.V.Reddy and C.Beckermann, " Simulation of the effects of thermosolutal convection, shrinkage induced flow and solid transport on macrosegregation and equiaxed grain size distribution in a DC continous cast Al-Cu round", 1997.

[Spi, 95] J.A. Spittle and S. Sadli, Materials Science and technology, 11, 1995, p 533-537.

[Wan, 93] C.Y. Wang et C. Beckermann, Mater. Sc. Eng. A171, 1993,199.

[Yu, 84] Yu A. and Granger D.A., 1984, Fundamental of alloy solidification applied to industrial processes, Nasa symposium, 1984, 157 – 168;

ANNEXES I :

1. Coefficient de restriction :

Selon le bilan de soluté à l'interface d'un cristal, la vitesse de la croissance d'un cristal s'écrit suivant la relation suivant :

- Le bilan de soluté :

$$w^{l*}(1-k)\frac{dR}{dt} = D_i^l \frac{\partial w_i^l}{\partial r} \qquad (1)$$

On définit une épaisseur de couche limite solutale, l'équation (1) devient :

$$w^{l*}(1-k)\frac{dR}{dt} = D_i^l \frac{w_i^{l*} - w_i^l}{\delta} \qquad (2)$$

- La vitesse de croissance :

$$\frac{dR}{dt} = \frac{D_i^l}{\delta}\frac{\left(w_i^{l*} - w_i^l\right)}{w^{l*}(1-k)} \qquad (3)$$

D'autre part, l'expression de la surfusion s'écrit :

$$\Delta T = T - \left(Tm + m\overline{w}^{l}\right) \qquad (4)$$

On remplace cette équation dans (4), on obtient :

$$\frac{dR}{dt} = \frac{D_i^l}{\delta}\frac{\Delta T}{Q} \qquad (5)$$

Avec Q est le coefficient de restriction défini par la relation suivante :

$$Q = m(1-k)w_i^{l*} \qquad (6)$$

ANNEXES II :

1. Maillage 2D cartésien :

Notre modèle ne traite pas que le cas d'un calcul cartésien en 3D, il traite aussi deux autres cas qui sont :

- le 2D cartésien ;
- le 2D axisymétrique.

Les figures 1 et 2 présentent schématiquement le maillage effectue dans les deux cas respectivement : 2D cartésien et 2D axisymétrique.

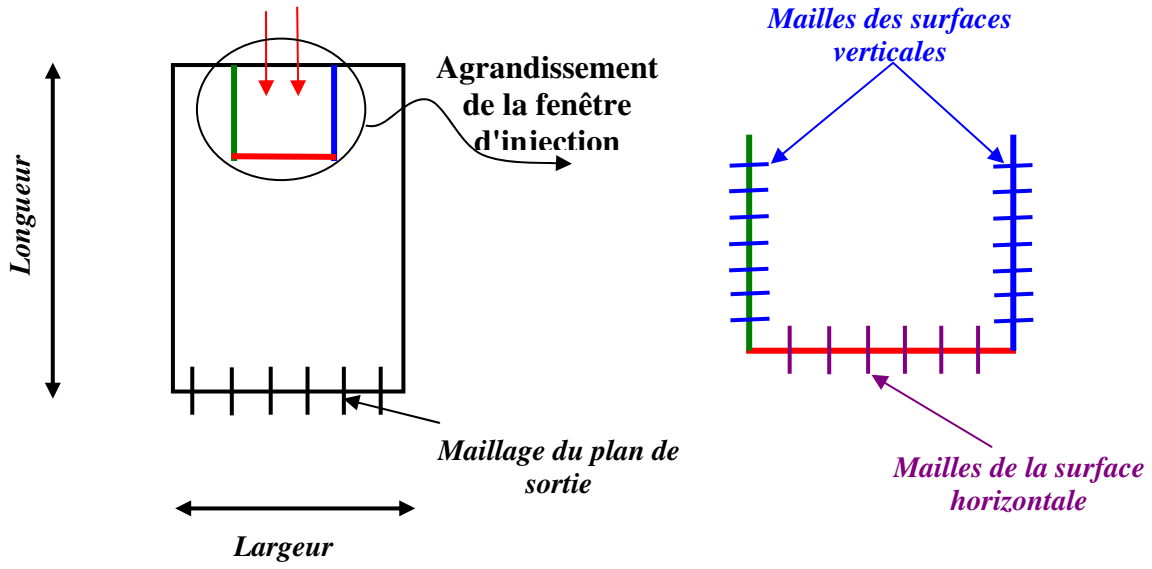


Figure 1 : description du maillage de la fenêtre d'injection et du plan de sortie pour un calcul 2D cartésien.

La figure 1 présente schématiquement le maillage effectué sur la fenêtre d'injection ainsi que sur le plan de sortie pour le cas de calcul 2D cartésien.

2. Maillage 2D cylindrique :

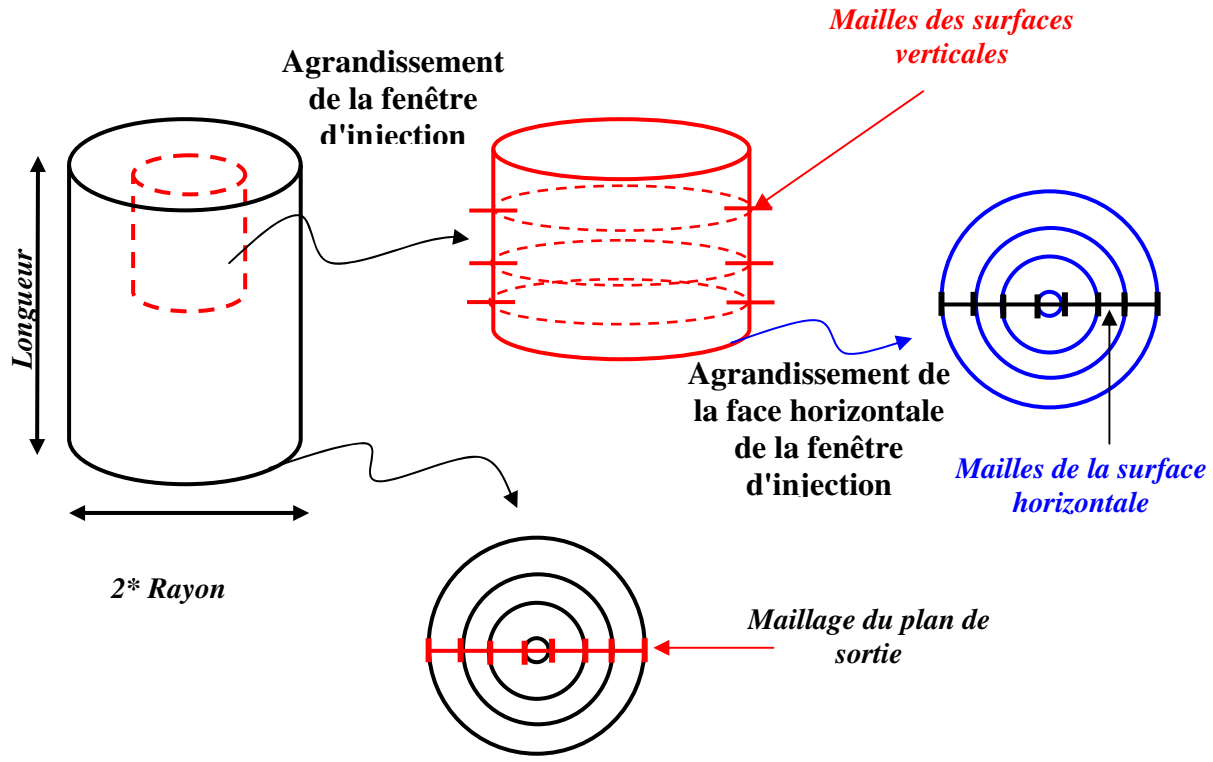


Figure 2: description du maillage de la fenêtre d'injection et du plan de sortie pour un calcul 2D cylindrique.

La figure 2 présente schématiquement le maillage effectué sur la fenêtre d'injection ainsi que sur le plan de sortie pour le cas de calcul 2D axisymétrique.

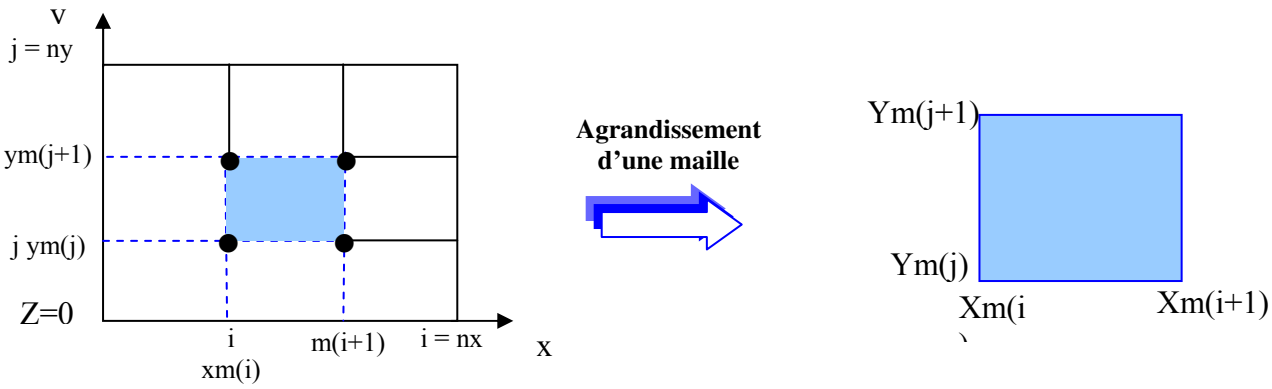
D'après les deux figures 1 et 2 on observe que les coordonnées des centres des mailles se calcule de la même façon pour les trois cas de calcul.

3. Maillage sur le plan de sortie et détection de l'emplacement final des particules :

Apres avoir suivi le mouvement de chaque particule, il faut alors détecter son emplacement. Pour cela, un maillage rectangulaire a été effectué au plan (xy) à z = 0, et grâce auquel on peut savoir dans quel maille la particule se trouve :

On connaît x, y et z ;

On effectue le maillage suivant :



Xm(i) : est l'abscisse du nœud de la maille.

Ym(j) : est l'ordonné du nœud de la maille

Figure 3 : schéma de la détection de l'endroit où se trouve la particule.

On cherche dans quel rectangle la particule se trouve, c'est à dire on regarde si les coordonnées x, y vérifient les deux relations suivantes :

$$\begin{aligned} &(x - xm(i)) \times (xm(i+1) - x) \geq 0 \\ &\qquad et \qquad\qquad\qquad\qquad (1) \\ &(y - ym(j)) \times (ym(j+1) - y) \geq 0 \end{aligned}$$

Si ces deux relations sont vérifiées alors la particule appartient au rectangle numéro $nx \times (j-1)+i$, tel que nx est le nombre de maille suivant x et ny est le nombre de maille suivant y. Cette opération a été appelée dans Particule détection de l'endroit où la particule se trouve.

4. Calcul des coordonnés du centre des mailles :

Le calcul des coordonnées des centres des mailles sert à calculer la vitesse à cette position. Cette dernière nous aide à calculer le débit du métal liquide traversant chaque maille. L'injection des particules se calcule en fonction de la probabilité (calculée en fonction du débit traversant chaque maille) pour qu'un nombre de particules données quitte une maille donnée. Ainsi, le calcul des coordonnées se fait comme suit :

- Soit nr le nombre de pas de maillage suivant la direction, r : représente les trois directions x, y, et z ;
- Soit r_f et r_0 les coordonnées de la fenêtre d'injection sur le plan perpendiculaire à la direction fixée, (voir la figure 1 ci-dessous). Le pas de maillage suivant la direction e s'écrit selon la relation suivante.

$$\Delta r = \frac{r_f - r_0}{nr} \qquad \textbf{(2)}$$

Les coordonnées de chaque maille i sont définit par la relation suivante :

$$rmesh(i) = i \times \Delta r - \Delta r/2 \qquad \textbf{(3)}$$

Avec :

rmesh(i) est le coordonné de la maille i suivant la direction r.

Pour les autres cas de calcul 3D cartésien, 2D cartésien et axisymétrique, on calcule les coordonnées de la même façon décrite par la relation (3). La même chose pour chaque direction.

5. Prise de moyenne :

Le calcul de ces temps donne une idée sur le comportement des particules dans la zone pâteuse ce qui nous permet de déduire la ségrégation finale sur le plan de sorti. Le schéma présenté sur la figure 4 présente les trois temps calculés

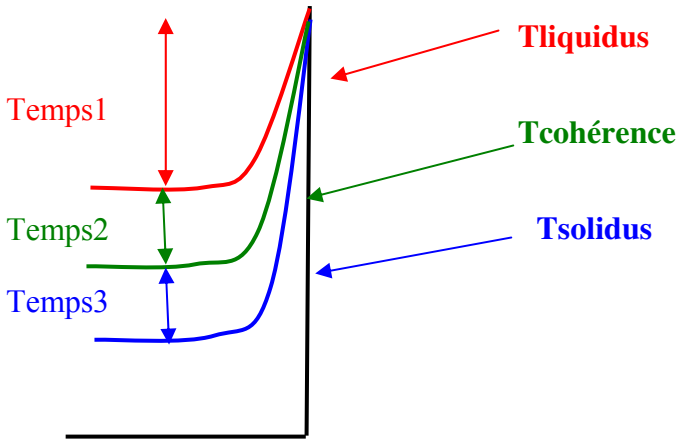


Figure 4 : Définition de tremps1, temps2 et temp3

Le temps moyen mis par une particule pour arriver à la sortie ainsi que les trois temps définit précédement, se calculent comme suit :

- Soit im(l) le nombre total de particules qui se trouvent dans la maille l ;
- Soit tpt(l) la somme des temps mis par les particules qui se trouvent dans la maille l, pour arriver à z = 0;
- Soit tpm(l), tpm1(l), tpm2(l) et tpm3(l) le temps total moyen mis par les particules pour arriver à la sortie, le temps moyen entre température pour atteindre le liquidus, le temps moyens entre le liquidus et la cohérence, et le temps moyen entre la cohérence et le solidus de chaque maille, alors :

$$tpm(l) = \frac{tpt(l)}{im(l)}$$
$$tpmi(l) = \frac{tempsi(l)}{im(l)} \qquad \textbf{(4)}$$

Avec i est égale à 1, 2 ou 3.

Dans cette étude, nous nous sommes intéressés à moyenner la moyenne du trois temps (temps1, temps2, et temps3). Ces temps sont définis respectivement comme le temps de séjour des particules dans le liquide, le temps moyen mis par les particules entre la température de liquidus et une température de cohérence, et le temps moyen mis par les particules entre la température de cohérence et la température de solidus. La température de cohérence est une température prise entre le liquidus et le solidus.

ANNEXES III :

1. Calcul de la vitesse du liquide :

Les composantes de la vitesse du liquide sont interpolées en utilisant des subroutines développées par la société ESI dans le cadre du projet «Vircast ». Les interfaces Vircast sont des industriels et des laboratoires de recherche qui établissent ou développent des codes de calcul macroscopique de vitesse, de température et de fraction solide :

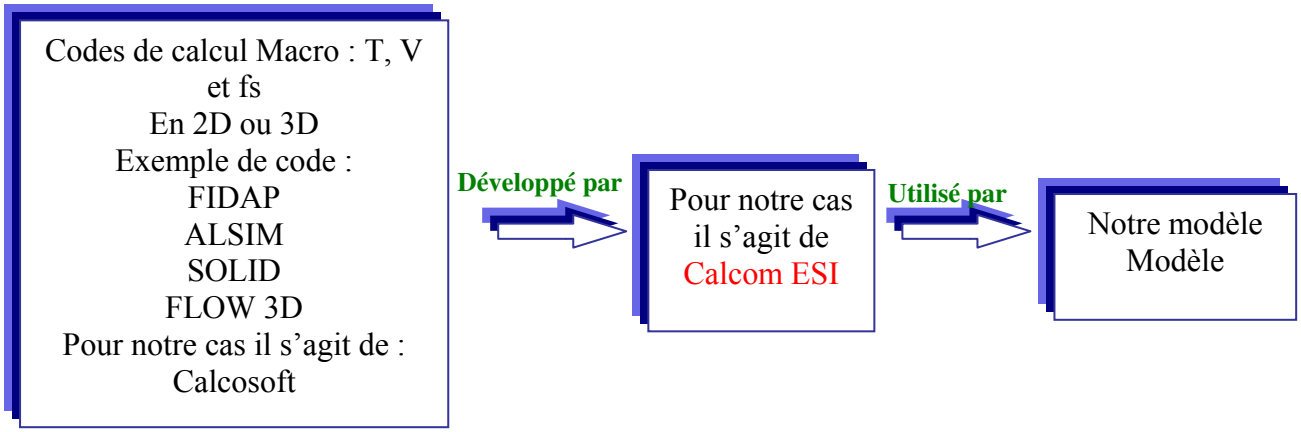


Figure 1 : schéma de l'intervention des interfaces Vircast.

Comme expliqué dans le schéma ci-dessus, Calcom a développé des sous-programmes et des fonctions qui préparent le champ de calcul ; (Figure1). Ces dernières sont :

- Une subroutine dans laquelle les opérations suivantes sont réalisées :
  - Numérotation de tous les nœuds et tous les éléments.
  - Calcul des coordonnées de tous les nœuds, nombre de nœud par élément et le nombre d'éléments dans le domaine.
- Une subroutine qui calcule le champ de la vitesse, de la température et de la fraction solide dans chaque nœud de chaque élément.

a) b)

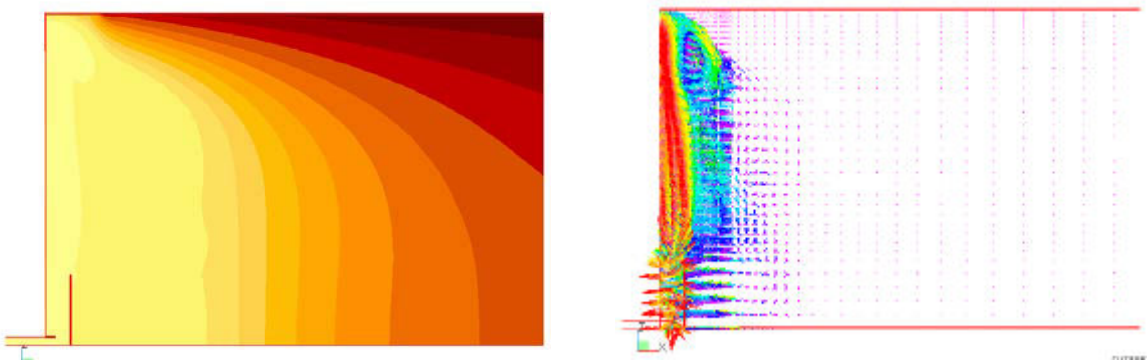


Figure 2 : a) le champ de température du code de calcul Calcosoft développé par Calcom ; b) le champ de vitesse du même code.

La figure 2 présente les champs de calcul de vitesse et de température post-traités par Calcom.

- Une fonction qui nous calcule le numéro de l'élément auquel la particule appartient ainsi que le numéro de noeud le plus proche à la particule, voir figure 3 :

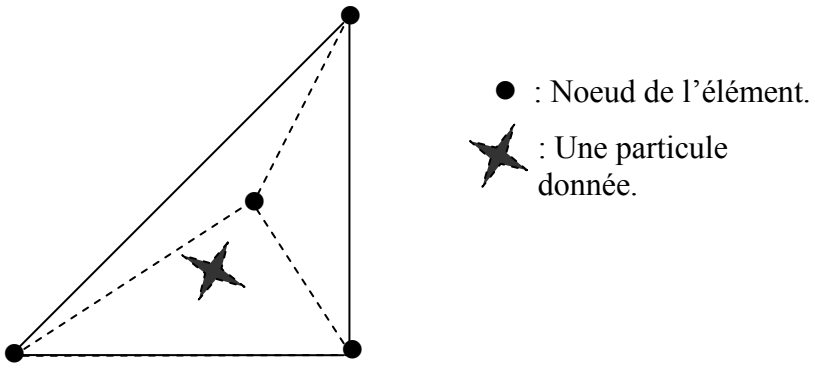


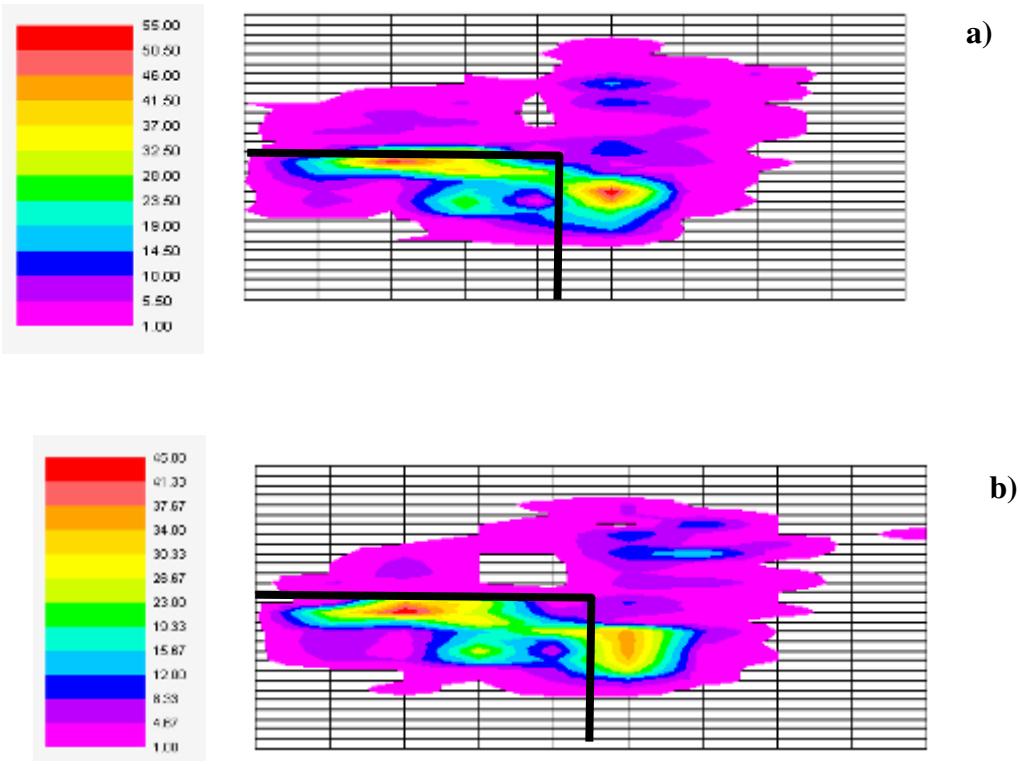
Figure 3 : schéma d'un élément et des nœuds de l'élément.

Remarque :

- Les éléments du maillage ont la forme d'un tétraèdre pour un maillage 3D et pour le maillage 2D, la forme des mailles est rectangulaire.
- Une subroutine qui permet d'interpoler les vitesses, la température et la fraction solide, après avoir déterminé l'élément auquel la particule appartient.

2. L'influence de la méthode d'injection :

Afin d'étudier l'influence de la méthode d'injection des particules, nous avons comparés entre la distribution des particules sur le plan de sortie, injectées par la méthode aléatoire et la méthode d'injection pondérée par le débit. Les figures IV-17 a) et b) présentent respectivement les résultats obtenus par les deux méthodes.



Figures 4 : nombre total des particules pour différents mode d'injection : a) injection aléatoire, b) pondérée par le débit. (Euler)

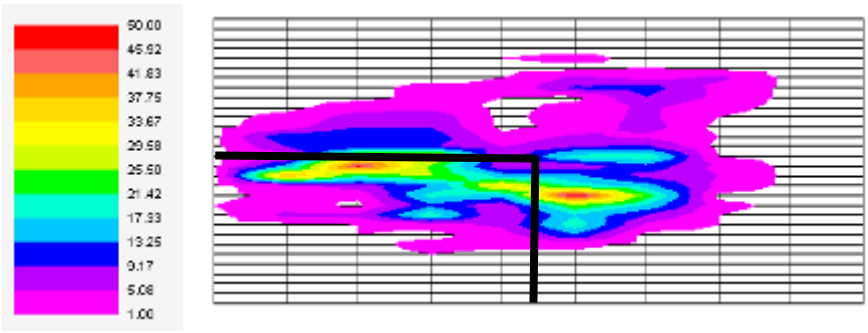
Les figures 4 a et b représentent la distribution des particules sur le plan de sortie pour deux modes d'injections, aléatoire et pondérée par le débit respectivement. La méthode d'intégration utilisée était pour un idivis égale à 10. D'après les figures 3 a et b, on observe

que les particules injectées par chaque face est une fonction de la taille de la fenêtre d'injection. Cette dernière contient 3 faces d'injections, dû à la symétrie prise en compte dans le calcul. Lorsqu'on compare le nombre des particules qui quittent chaque face entre les méthodes utilisées, on observe que pour 1000 particules injectées, le nombre de particule qui quittent chaque face est différent dans les deux cas, le tableau 1 résume ces résultats :

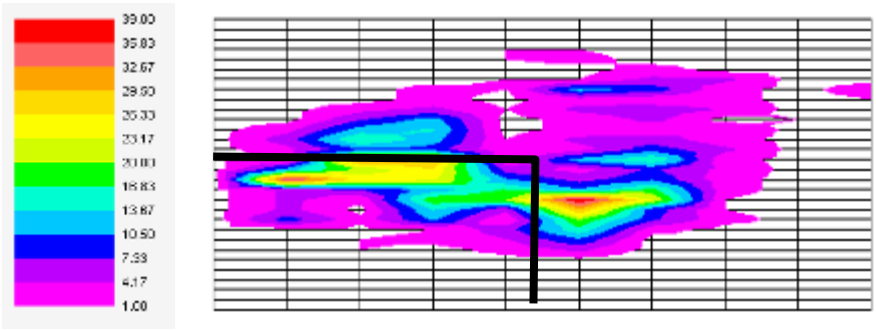
	Aléatoire	***Pondéré par le débit***
Nombre des particules quittant la face horizontale	800	771
Nombre des particules quittant la face verticale 1	0	229
Nombre des particules quittant la face verticale 2	200	0

Tableau 1 : le nombre des particules traversant les faces de la fenêtre d'injection.

Lorsque l'injection est pondérée par le débit, le plus grand nombre de particule quitte la maille dont le débit est plus élevé. Par contre, lorsque l'injection est aléatoire, le seul critère d'injection est la taille des mailles et le nombre de particule injectée. Ce qui explique la différence présenté dans la distribution des particules présentées dans les figures 4 a et b), et confirmer par les résultats dans le tableau 1.



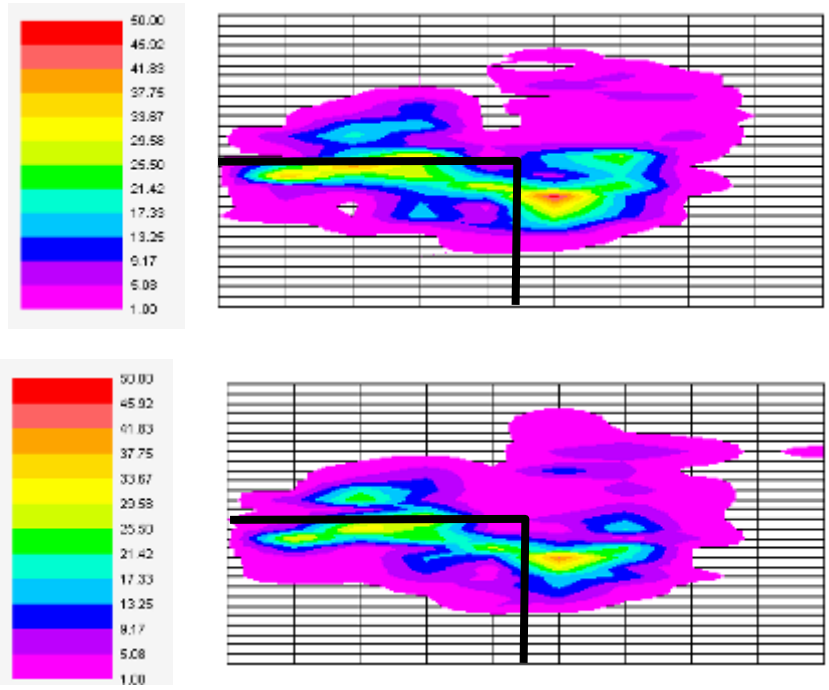
a)



b)

Figures 5 : nombre total des particules : a) injection aléatoire, b) pondérée par le débit. (RK2)

En changeant la méthode d'intégration de la méthode d'Euler à la méthode de Runge-Kutta d'ordre2, la distribution des particules représentent le même résultat de comparaison donné dans les figures 4 a et b. Les figures 5 a et b représentent les distributions des particules obtenues pour les deux méthodes d'injection (aléatoire et pondéré par le débit) en utilisant la méthode de Runge-Kutta d'ordre 2. Cette méthode de Runge-kutta d'ordre 2 a servis à avoir plus de précisions sur les trajectoires des particules, cependant elle ne contrôle pas les positions initiales, c'est à dire l'endroit d'injections des particules. D'autre part, on observe le même résultat dans les figures 6 a et b qui représentent la distribution des particules pour les deux méthodes d'injections, mais en utilisant la méthode de Runge-Kutta d'ordre 4.



Figures 6 : nombre total des particules : a) injection aléatoire, b) pondérée par le débit. (RK4)

Nous rappelons que cette étude nous a révélé que la trajectoire des particules est sensible aux choix de système d'injection, de la méthode d'intégration et au pas de temps. L'emplacement de la sortie de particules change en changeant ces paramètres. Par contre, les informations nécessaire permettant de prévoir la morphologie et la macroségrégation restent les mêmes.

ANNEXES IV :

1. Influence de la forme :

Dans le domaine des très faibles nombres de Reynolds, Pettyjohn et al [Pet, 48] ont proposé la relation V-3. Cette relation a été obtenue en réalisant des expériences de sédimentation :

$$Ks_e = a\log\left(\frac{\Psi}{b}\right) \qquad \textbf{(1)}$$

Avec :

- Ks_e est le rapport de la vitesse limite de stokes réelle U_{ns} d'une particule de forme quelconque à la vitesse limite de stokes U_s de la sphère équivalente :

$$Ks_e = \frac{U_{ns}}{U_s} \qquad \textbf{(2)}$$

- Ψ est un facteur de sphéricité :

$$\Psi = \frac{\textit{la surface de la sphère équivalente } A_s}{\textit{la surface de la particule asphérique } A_{ns}}$$

Selon Pettyjohn a et b sont deux constante égale respectivement à 0,843 et 0,065. La valeur de ces constantes a été modifiée par Ahuja et coll. [Ahu, 92] en se basant sur les données expérimentales de Zakha et al. pour des particules triaxiales sans branches secondaire ce qui donne :

a = 1,2376 et b = 0,1556

Pour chacun de facteur de sphéricité testés par Pettyjohn, le coefficient de traîné est obtenu en extrapolant la relation (V-3) aux plus grands nombre de Reynolds à l'aide de la corrélation de Brauer (V-1) :

$$C_D = B_{CD}(\mathrm{Re})\left[a\log\left(\frac{\Psi}{b}\right)\right]^{-1} \qquad \textbf{(3)}$$

2. Influence de la perméabilité :

Neale et al. [Nea, 73] ont étudié l'effet de la perméabilité de sphère sur la vitesse limite de stokes. Ils simulèrent l'intérieure de la sphère perméable à un milieu continu poreux homogène et isotrope dans lequel la circulation du liquide peut être décrit par une extension de la loi de Darcy obtenue par Brinkman [Bri, 47] :

$$-\frac{\mu^l}{K_p}\vec{U}_i^l + \tilde{\mu}^l \Delta\vec{U}_i^l = \vec{\nabla}P \qquad \textbf{(4)}$$

Avec :

- μ^l : la viscosité dynamique réelle du liquide ;
- K_p : la perméabilité isotrope du milieu ;
- $\vec{U}_i^l$: la vitesse locale du liquide dans la sphère ;
- $\tilde{\mu}^l$: la viscosité dynamique effective généralement choisie égale à la viscosité moyenne réelle ;
- P : la pression interstitielle moyenne dans la sphère poreuse.

La résolution analytique de ces équations mène à la relation suivante :

$$\frac{U_{perm}}{U_{imp}} = \frac{1}{\Omega_\beta} = \frac{2\beta^2 + 3\left(1 - \tanh\beta/\beta\right)}{2\beta^2\left(1 - \tanh\beta/\beta\right)} \qquad \textbf{(5)}$$

Avec :

- U_{perm} : la vitesse limite de stokes de la sphère poreuse ;
- U_{imp} : la vitesse limite de stokes d'une sphère non poreuse de dimension et de densité égale à celle de la sphère poreuse ;
- β : le rapport du diamètre de la sphère poreuse à la racine carré de sa perméabilité : $\beta = \frac{2R}{\sqrt{K_p}}$.

La perméabilité des particules K_p peut être estimée à l'aide de la relation de Carman-Kozeny en connaissant exactement la géométrie des modèles en plastique :

$$K_p = \frac{(1-g_i)^3}{5\left(\frac{S_s}{V_{env}}\right)^2} \qquad \textbf{(6)}$$

Le coefficient de traîné est calculé à l'aide d'expériences réalisées sur des sphères poreuses dont la variable est β comprise entre 15 et 33, Mashiyah et al. [Mas, 80] proposèrent la relation suivante :

$$C_d = \Omega_\beta F(\mathrm{Re}) \qquad \textbf{(7)}$$

Avec :

- $F(\mathrm{Re}) = \frac{24}{\mathrm{Re}}\left(1 + 0{,}1315\,\mathrm{Re}^{(0{,}82-0{,}05\log(\mathrm{Re}))}\right)$ pour $0{,}1 \le \mathrm{Re} \prec 7$;
- $F(\mathrm{Re}) = \frac{24}{\mathrm{Re}}\left(1 + 0{,}0853\,\mathrm{Re}^{(1{,}093-0{,}105\log(\mathrm{Re}))}\right)$ pour $7 \le \mathrm{Re} \le 120$.

$$F_{ext} = \frac{\left(\rho_{liq} - \rho_p\right)}{\rho_p} g_r \text{ avec } g_r = g_x, g_y, ou\ g_z \qquad \textbf{(9)}$$

$$F_D = \frac{1}{2} C d S_p \rho_{liq} \left\| \overrightarrow{U_p} - \overrightarrow{U_{liq}} \right\| \times \frac{1}{\rho_p vol_p} \qquad \textbf{(10)}$$

L'équation (V-13) devient :

$$\frac{dU_p}{dt} = -F_D U_p + \left(F_{ext} + F_D U_{liq}\right) \qquad \textbf{(11)}$$

D'où :

$$\begin{cases} U_{p1} = U_{p0} + \Delta t \times \left(- F_D U_{p0} + \left(F_{ext} + F_D U_{liq}\right)\right) \\ r_1 = r_0 + \Delta t \times U_{p1} \end{cases} \qquad \textbf{(12)}$$

V - 3.2.2. Runge Kutta d'ordre 2 et d'ordre 4 :

Nous rappelons de les méthodes de Runge kutta d'ordre 2 et 4 propagent une solution sur un intervalle en combinant les informations provenant de plusieurs pas de calculs de type de ceux mis en œuvre dans le processus d'Euler.

L'équation (V-13) est de la forme suivante :

$$\frac{d^2 y}{dx^2} = y\left(x, y, y'\right) \quad \textbf{(13)}$$

En remplaçant les relations (9) et (10) dans l'équation (7), cette dernière devient :

$$\frac{d^2 r}{dt^2} = -F_D U_p + \left(F_{ext} + F_D U_{liq}\right) \qquad \textbf{(14)}$$

Avec :

$$\begin{cases} \dfrac{dr}{dt} = f\left(t, r, U_p\right) \\ \dfrac{dU_p}{dt} = -F_D U_p + \left(F_{ext} + F_D U_{liq}\right) \end{cases} \qquad \textbf{(15)}$$

r représente les coordonnés x, y ou z.

Si on pose $h = \Delta t$ le pas de temps et si on applique la relation de Runge Kutta d'ordre 2, nous obtiendrons la relation suivante :

- ***Runge Kutta d'ordre 2 :***

$$\begin{cases} k_0 = \Delta t U_p\left(t_0, r_0\right) = \Delta t U_{p0} \\ U_0 = \Delta t\left(-F_D U_{p0} + \left(F_D U_{liq} + F_{ext}\right)\right) \end{cases} \quad \textbf{(16)}$$

$$\begin{cases} k_1 = \Delta t U_p\left(t_0 + \dfrac{\Delta t}{2}, r_0 + \dfrac{k_0 \Delta t}{2}\right) = -\Delta t U_{p1} \\ U_1 = \Delta t\left(-F_D\left(U_p\left(t_0 + \dfrac{\Delta t}{2}, r_0\right) + \dfrac{U_0}{2}\right) + \left(F_D U_{liq} + F_{ext}\right)\right) \end{cases} \quad \textbf{(17)}$$

$$\begin{cases} U_p\left(t_0 + \Delta t\right) = U_{p0} + \left(U_1 + U_2\right) \times \dfrac{1}{2} \\ r\left(t_0 + \Delta t\right) = r_0 + \left(k_1 + k_2\right) \times \dfrac{1}{2} \end{cases} \quad \textbf{(18)}$$

- ***Runge Kutta d'ordre4:***

Nous rappelons que la méthode de Runge Kutta d'ordre 4 n'est qu'une extension de Runge-Kutta d'ordre 2. On peut définir cette méthode par la relation suivante :

$$\begin{cases} k_0 = \Delta t U_p\left(t_0, r_0\right) = \Delta t U_{p0} \\ U_0 = \Delta t\left(-F_D U_{p0} + \left(F_D U_{liq} + F_{ext}\right)\right) \end{cases} \quad \textbf{(19)}$$

$$\begin{cases} k_1 = \Delta t U_p\left(t_0 + \dfrac{\Delta t}{2}, r_0 + \dfrac{k_0}{2}\right) = -\Delta t U_{p1} \\ U_1 = \Delta t\left(-F_D\left(U_p\left(t_0 + \dfrac{\Delta t}{2}, r_0\right) + \dfrac{U_0}{2}\right) + \left(F_D U_{liq} + F_{ext}\right)\right) \end{cases} \quad \textbf{(20)}$$

$$\begin{cases} k_2 = \Delta t U_p\left(t_0 + \dfrac{\Delta t}{2}, r_0 + \dfrac{k_1}{2}\right) = \Delta t U_{p2} \\ U_2 = \Delta t\left(-F_D\left(U_p\left(t_0 + \dfrac{\Delta t}{2}, r_0\right) - \dfrac{U_1}{2}\right) + \left(F_D U_{liq} + F_{ext}\right)\right) \end{cases} \quad \textbf{(21)}$$

$$\begin{cases} k_3 = \Delta t U_p\left(t_0 + \Delta t, r_0 + k_2\right) = \Delta t U_{p0} \\ U_3 = \Delta t\left(-F_D\left(U_p\left(t_0 + \Delta t, r_0\right) + U_2\right) + \left(F_D U_{liq} + F_{ext}\right)\right) \end{cases} \quad \textbf{(22)}$$

En remplaçant les solutions des équations (19), (20), (21) et (22) dans l'expression finale de la solution de Runge Kutta d'ordre 4, nous obtenons l'équation finale qui permet d'obtenir la trajectoire de la particule :

$$\begin{cases} U_p\left(t_0 + \Delta t\right) = U_{p0} + \left(\dfrac{U_0}{6} + \dfrac{U_1}{3} + \dfrac{U_2}{3} + \dfrac{U_3}{6}\right) \\ r\left(t_0 + \Delta t\right) = r_0 + \left(\dfrac{k_0}{6} + \dfrac{k_1}{3} + \dfrac{k_2}{3} + \dfrac{k_3}{6}\right) \end{cases} \quad \textbf{(23)}$$

3. Distribution de particules sur le plan de sortie :



Figure 1 : distribution de particules sur le plan de sortie lorsque les forces sont activés pour le cas où la coulée est sans sac de distribution.



Figure 2 : distribution de particules sur le plan de sortie lorsque les forces sont activés pour le cas où la coulée est avec sac de distribution.

Les figures 1 et deux présentent la distribution de particules sur le plan de sortie lorsque les forces appliquées sur les grains ont été activées, obtenue pour les deux coulées avec et sans sac de distribution.

D'après ces figures nous observons que lorsque les forces sont activées, les grains ont tendance à atterrir au centre du lingot avec un maximum de 297 particules et de 60 particules respectivement pour la coulée avec et sans sac de distribution, en provoquant des zones où aucune particule n'arrive.

INSTITUT NATIONAL
POLYTECHNIQUE
DE LORRAINE

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

o0o

VU LES RAPPORTS ETABLIS PAR :
Madame Véronique FAVIER, Maître de Conférences, LPMM, ENSAM, Metz

Monsieur Benoît GOYEAU, Maître de Conférences, Lab. FAST, Université Paris sud, Orsay

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

Madame HOUTI Najat Épouse LEFAY

NANCY BRABOIS
2, AVENUE DE LA
FORET-DE-HAYE
BOITE POSTALE 3
F - 54501
VANDŒUVRE CEDEX

à soutenir devant un jury de l'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE LORRAINE, une thèse intitulée :

"Etude de l'influence du mouvement et de la croissance des grains équiaxes sur la macroségrégation en coulée semi-continue d'aluminium"

en vue de l'obtention du titre de :

DOCTEUR DE L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE LORRAINE

Spécialité : **« Mécanique et énergétique »**

Fait à Vandoeuvre, le 25 octobre 2005
Le Président de l'I.N.P.L.
L. SCHUFFENECKER

TEL. 33/03.83.59.59.59
FAX. 33/03.83.59.59.55

Résumé

La prédiction des structures de solidification est d'un grand interêt pour le fabriquant d'aluminium. Dans le cas du processus de coulée semi-continue de l'aluminium des phénomènes qui se produisent à différents échelles influencent la formation des macro et micro structures: germination, fragmentation, des branches de dendrites, croissance de grains et le mouvement des grains ainsi que leur histoire thermique à l'échelle microscopique.

Dans le cadre du projet Vircarst, nous avons développé un modèle de croissance et de mouvement de groupe de grains en respectant le couplage entre les échelles micro et macro. Le mouvement et la croissance des grains sont calculés en utilisant les données d'entrées de l'extraction de la chaleur locale et des champs de vitesse calculés à partir de l'équation en 3D : de la chaleur, de conservation de la masse et de la quantité de mouvement en coulée semi-continue.

Ce modèle prédit la distribution de la taille de grains, le DAS et la morphologie au plan de sortie de la coulée. A la fois le phénomène de l'innoculation et la fragmentation sont pris en compte, par une loi de germination dans le volume de la particule et par un flux régulier à travers la surface de la particule.

Mots clés : Modélisation - Solidification – Germination - Coulée semi-continue - Mouvement de grains - Croissance de grains – Transfert thermique - Micro/Macroségrégation – Micro/Macrostructure.

Abstract

The prediction of the macro and microstructures obtained at the end of the solidification is of great interest for the manufacturer of aluminium. In the case of the aluminium DC casting process, phenomena occurring at different scales influence the formation of the macro and microstructures: inoculation, fragmentation of dendrite arms, and growth of the grains at a microscopic scale; motion of the grains and their thermal history at a macroscopic scale.

A model of growth and motion of groups of grains has been developed in the frame of the VIRCAST project. This model is simplified with regards to the coupling between the macro and micro scales. The motion and the growth of the grains are calculated using as input data the local heat extraction and the velocity fields computed from a 3D computation of heat, mass and momentum transfers in a DC casting.

This model predicts the distribution of grain size, secondary dendrite arm spacing and morphology at the outlet of the casting. Both inoculation and fragmentation phenomena are taken into account.

Keywords : Modelling - Solidification – Inoculation– Direct-chill casting - Grains motion– Grains growth – Heat transfer – Micro/Macro-segregation – Micro/Macrostructure.