



**HAL**  
open science

# Influence de la convection, naturelle ou forcée, sur l'apparition des mésoségrégations lors de la solidification des alliages métalliques

Ghislain Quillet

► **To cite this version:**

Ghislain Quillet. Influence de la convection, naturelle ou forcée, sur l'apparition des mésoségrégations lors de la solidification des alliages métalliques. Electromagnétisme. INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE GRENOBLE, 2003. Français. NNT: . tel-01331644

**HAL Id: tel-01331644**

**<https://hal.science/tel-01331644>**

Submitted on 14 Jun 2016

**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.

**N° attribué par la bibliothèque**

□□□□□□□□□□

**THESE**

pour obtenir le grade de

**DOCTEUR DE L'INPG**

**Spécialité : ENERGETIQUE PHYSIQUE**

préparée au laboratoire : **ELABORATION PAR PROCÉDES MAGNETIQUES**

dans le cadre de l'Ecole Doctorale : **MECANIQUE ET ENERGETIQUE**

présentée et soutenue publiquement

par

**Ghislain QUILLET**

le 21 février 2003

**Influence de la convection, naturelle ou forcée,  
sur l'apparition des mésoségrégations  
lors de la solidification des alliages métalliques.**

---

**Directeurs de thèse :**

Yves FAUTRELLE et Peter LEHMANN

---

**JURY**

M.	Y. BRECHET	, Président
M.	D. GOBIN	, Rapporteur
M.	H. COMBEAU	, Rapporteur
M.	Y. FAUTRELLE	, Directeur de thèse
M.	P. LEHMANN	, Directeur de thèse
M.	A. GRELLIER	, Examineur



*A tous ceux qui m'ont encouragé et soutenu.*

*« Les seules limites à nos réalisations de demain  
sont nos doutes et nos hésitations d'aujourd'hui. »*

*(F. D. Roosevelt)*

*« Les théories passent, les expériences restent. »*

*(G. Lesoult)*



# Remerciements

S'il est un exercice plus ardu que de rédiger l'ensemble de ce mémoire, il s'agit certainement la rédaction des remerciements : n'oublier personne, être juste et honnête dans les remerciements apportés, quel ordre pour les personnes citées ? Je profite de ces quelques lignes pour, par avance, présenter mes excuses aux personnes que je pourrais oublier et pour demander au lecteur de n'attacher nulle importance à l'ordre des noms qui vont suivre.

Il va de soit que je tiens à apporter tous mes remerciements à Yves Fautrelle qui fut un directeur de thèse d'une immense disponibilité et de qualité. Merci pour tout Yves. Merci également à Peter Lehmann pour sa grande « imagination scientifique » et l'idée des expériences de validation. Merci à Robert Bolcato pour les solutions techniques et nombre d'astuces.

Merci à Marcel Garnier (†) pour m'avoir accueilli au sein du laboratoire, ceci depuis mon stage de DEA puis pour l'ensemble de cette thèse.

Mes remerciements les plus vifs sont adressés à chacun des membres du jury : Yves Bréchet, André Grellier et plus spécialement Dominique Gobin et Hervé Combeau pour avoir accepté d'être les rapporteurs de ce travail.

Je remercie bien évidemment ceux qui m'ont encadré de près ou de loin ou ceux qui m'ont aidé : Yves du Terrail et Annie Gagnoud pour leur bonne humeur en salle informatique, Yves Delannoy pour toutes les astuces FLUENT, Mabel Medina pour l'ensemble du travail qu'elle mena précédemment, Alexandru Ciobanas pour l'immense aide et le souffle nouveau qu'il sut apporter. Tous mes vœux de succès pour ton doctorat.

N'oublions pas les techniciennes du centre d'analyse de Solèze qui, moyennant une boîte de chocolat, m'ont permis d'obtenir les dosages par dissolution de mes échantillons en une semaine au lieu de huit. Cela ne s'apparenterait-il pas à de la corruption de fonctionnaires ?

Je tiens également à remercier Thierry Mazet et la société Métal Critt 2T de Nancy pour le polissage des échantillons, les cartes de macrostructure et de fraction eutectique. Quiconque a déjà poli des alliages à base étain sait combien cela peut être difficile.

Mes remerciements vont aussi au CEA de Saclay pour la qualité des radiographies effectuées et à Jacques Ligoineaud de la société Thermocoax pour son aide précieuse et sa disponibilité concernant le dimensionnement des éléments chauffants.

Mais s'il est des personnes dont les visages ou les noms me viennent spontanément à l'esprit lorsqu'il est question de remerciements (multiples et variés), ce sont toutes celles qui ont partagé mon quotidien au Madylam (pardon, à l'EPM) ou dans les rues grenobloises au cours de ces différentes années. Merci à Anne et Pascale pour leurs rires, leur bonne humeur permanente, à Denis pour les gâteaux bio dont même ses enfants ne voulaient pas. Je ne vous oublierai pas, ni vous ni les autres membres du laboratoire. Merci à ceux et celles dont je ne peux citer les noms pour avoir supporté mes sautes d'humeur, surtout dans les derniers temps. Merci au Notre-Dame, à son patron, et tous les gens que j'ai pu y croiser, qui m'ont assuré des moments d'évasion bien salutaires.

Merci à tous ceux que j'aurais pu oublier et surtout à celles et ceux qui n'ont pas désiré que je les cite ici.

# Table des matières

<b>Nomenclature.</b>	<b>13</b>
<b>Préambule.</b>	<b>17</b>
<b>Partie A :</b>	
<b>Solidification, simulation, état de l’art et expérience de validation.</b>	<b>21</b>
A.1 : Notions de solidification des alliages métalliques.	22
A.1.1 : Etude expérimentale des diagrammes de solidification.	22
A.1.2 : Solidification, diagrammes de phases et ségrégations.	24
A.2 : Quelques approches numériques.	28
A.2.1 : Moyennage volumique.	29
A.2.1.a : Le concept de volume élémentaire représentatif (VER).	29
A.2.1.b : Fraction volumique et définitions de moyennes.	31
A.2.1.c : Opérateurs et prise de moyenne :	
Relations entre dimensions macroscopiques et microscopiques.	33
A.2.2 : Moyennage statistique de phase.	33
A.2.3 : Des équations au code de simulation : historique du code FHP.	35
A.3 : Le pourquoi d’une expérience de validation.	36



**PARTIE B :**

<b>Quel modèle de solidification ? Implantation dans le logiciel.</b>	<b>39</b>
B.1 : Le modèle Felicelli Heinrich Poirier (FHP).	40
B.1.1 : Description générale du modèle mathématique.	40
B.1.2 : Quelles équations constitutives ?	41
B.1.2.a : Conservation de masse.	41
B.1.2.b : Conservation de la quantité de mouvement.	41
B.1.2.c : Conservation de l'énergie.	43
B.1.2.d : Conservation du soluté.	43
B.1.2.e : Equilibre thermodynamique local.	44
B.1.3 : La refusion, causes et conséquences.	45
B.2 : Quel logiciel employer ? Réécriture des équations.	48
B.2.1 : Réécriture des équations pour leur implantation.	48
B.2.1.a : Implantation de l'équation de conservation de la quantité de mouvement.	48
B.2.1.b : Implantation de l'équation de conservation de l'énergie.	50
B.2.1.c : Implantation de l'équation de conservation du soluté.	50
B.2.1.d : Equations auxiliaires.	51
B.2.2 : Algorithme de résolution.	53
B.3 : Quels paramètres fluctuants dans ce modèle ?	54
B.3.1 : La perméabilité, les choix possibles.	54
B.3.1.a Expression anisotrope de la perméabilité.	54
B.3.1.b Expression isoptrope de la perméabilité. Ecriture de Carman-Kozeny.	55
B.3.2 : Expression des forces magnétiques. Conséquences.	56
B.3.2.a : Les différentes configurations pour le brassage électromagnétique.	57
B.3.2.b : La prise en compte de l'effet Joule est-elle pertinente ?	60
B.4 : Nombres adimensionnels pertinents pour nos problèmes.	62
B.5 : Le modèle en trois dimensions : Quelles modifications ?	65
B.5.1 : Les nouvelles équations.	65
B.5.2 : Expression analytique des forces électromagnétiques correspondantes.	66
B.6 : Conclusion partielle.	67

**PARTIE C :****De la validation partielle du modèle à son exploitation :**

<b>Résultats numériques.</b>	<b>69</b>
C.1 : Validation partielle à partir d'un cas 2D.	70
C.1.1 : Description du cas type.	70
C.1.1.a : Géométrie du cas type.	70
C.1.1.b : Conditions initiales.	71
C.1.1.c : Conditions aux limites.	72
C.1.2 : Nombres adimensionnels appliqués au cas type.	73
C.1.3 : Les résultats en convection naturelle.	77
C.1.3.a : Les résultats de référence.	77
C.1.3.b : Analyse de l'évolution des grandeurs.	86
C.1.3.c : Comparaison du cas type avec les résultats d'autres codes de calcul.	92
C.1.3.d : Quelle influence pour l'ordre du schéma de calcul ?	93
C.1.3.e : Quelle est l'influence de la perméabilité sur la zone pâteuse ?	96
C.1.3.f : La taille de maillage modifie-t-elle les résultats ?	98
C.2 : Exploitation : Analyse de l'influence de la convection forcée.	99
C.2.1 : Quelles nouvelles valeurs pour les nombres sans dimension ?	
Quelles conséquences ?	100
C.2.1.a : En zone liquide.	100
C.2.1.b : En zone pâteuse.	100
C.2.2 : Influence du brassage sur les résultats.	101
C.2.2.a : Double vortex ascendant au milieu.	101
C.2.2.b : Effet Joule : Modification ou non des résultats ?	103
C.2.2.c : Double vortex ascendant sur les côtés.	105
C.2.2.d : Le simple vortex.	106
C.2.3 : Conclusion partielle sur l'influence du brassage sur la solidification.	108
C.3 : De la bidimensionnalité à la tridimensionnalité.	108
C.3.1 : Géométrie, conditions aux limites et conditions initiales.	108
C.3.1.a : Quelle géométrie ?	108
C.3.1.b : Conditions initiales.	109
C.3.1.c : Conditions aux limites.	110
C.3.2 : Des cheminées en convection naturelle...	111
C.3.3 : ... au canal central en convection forcée.	116
C.4 : Conclusion partielle.	119

**Partie D :****Description et conception de l'expérience de validation. 121**

D.1 : Comparer une expérience et une simulation, quelles contraintes ?	122
D.1.1 : Une géométrie et une configuration adaptées.	122
D.1.1.a : Quelles dimensions pour quel alliage ?	122
D.1.1.b : Quelle configuration ?	123
D.1.2 : Description générale du dispositif expérimental.	123
D.2 : Assurer un refroidissement contrôlé.	125
D.3 : Un creuset virtuel et adiabatique.	128
D.3.1 : Quelle problématique ?	128
D.3.2 : Quel constituant pour le creuset ?	128
D.3.3 : Rendre le creuset adiabatique.	129
D.3.3.a : Les pertes thermiques par rayonnement.	129
D.3.3.b : La boîte de Kirchhoff.	130
D.3.4 : Les autres fuites thermiques.	131
D.4 : La circulation d'eau thermostatée.	131
D.5 : La chaîne de mesure.	133
D.6 : Autres considérations techniques.	134
D.6.1 : Fabrication des échantillons.	134
D.6.2 : Fixation des thermocouples sur le creuset.	135
D.6.3 : « Amorçage » des thermocouples sans soudures froides.	136
D.7 : Conclusion partielle.	138

**Partie E :****Résultats de mesures****et simulations numériques du dispositif expérimental. 139**

E.1 : Analyse et étude des conditions expérimentales grâce aux mesures.	140
E.1.4 : De l'adiabaticité du creuset.	140
E.1.2 : La paroi cuivre de l'échangeur est-elle isotherme ?	142
E.1.3 : Température de la paroi et flux extrait.	143
E.1.3 : De la reproductibilité des expériences.	144
E.1.5 : Conclusion sur le système expérimental	145
E.2 : Exploitation des mesures effectuées sur le Benchmark.	146

E.2.1 : Les mesures de température et le corps pur.	146
E.2.1.a : Solidification du corps pur.	147
E.2.1.b : Fusion du corps pur.	156
E.2.2 : Les mesures de température et l'alliage étain-bismuth.	159
E.2.2.a : Mesures de température et refroidissement de $2\text{ }^{\circ}\text{.mn}^{-1}$ .	159
E.2.2.b : Mesures de température et refroidissement de $5\text{ }^{\circ}\text{.mn}^{-1}$ .	164
E.2.3 : Mesures de température et estimation de la convection.	169
E.3 : Radiographies X et analyses chimiques des échantillons.	170
E.3.1 : Quelles informations tirer des radiographies ?	171
E.3.2 : De l'échantillon brut à une carte maillée de concentration.	172
E.3.3 : Analyses chimiques : macrostructures et fraction eutectique.	177
E.4 : Simulation numérique du Benchmark.	180
E.4.1 : Quelles conditions initiales ? Quelles conditions aux limites ?	180
E.4.2 : Quelques nombres adimensionnels.	181
E.4.3 : Simulations bidimensionnelles du benchmark.	182
E.4.3.a : Deux degrés par minute de refroidissement.	182
E.4.3.b : Cinq degrés par minute de refroidissement.	188
E.4.4 : Simulation tridimensionnelle du benchmark.	192
E.5 : Conclusion partielle.	195
<b>Conclusion et perspectives.</b>	<b>197</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>203</b>
<b>Annexes.</b>	
Annexe A : Données numériques et diagrammes de phases.	A1
Annexe B : Moyennage statistique de phase.	B1
Annexe C : Présentation succincte du code SOLID.	C1
Annexe D : Protocole de radiographie.	D1



# Nomenclature

## Liste des principales notations utilisées

$Le$	Nombre de Lewis.
$M$	Rapport entre les forces électromagnétiques et les forces d'Archimède.
$M_1$	Rapport entre les forces électromagnétiques et les forces d'Archimède thermiques.
$M_2$	Rapport entre les forces électromagnétiques et les forces d'Archimède solutales.
$M_3$	Rapport entre les forces électromagnétiques et les forces de Darcy en zone pâteuse.
$N$	Nombre de flottaison.
$Pe$	Nombre de Peclet.
$Pr$	Nombre de Prandtl.
$Ra_P$	Nombre de Rayleigh pâteux.
$Ra_S$	Nombre de Rayleigh solutal.
$Ra_T$	Nombre de Rayleigh thermique.
$Re$	Nombre de Reynolds.
$Sc$	Nombre de Schmidt.

$B_0$	Intensité du champ magnétique ( $T$ ).
$\vec{B} = (B_x, B_y, B_z)$	Champ magnétique et ses composantes.
$C_m$	Concentration moyenne (% wt).

$C_l$	Concentration liquide (% wt).
$\bar{C}_s$	Concentration solide moyenne (% wt).
$C_L$	Concentration liquide en rapport avec la courbe de liquidus (% wt).
$C_S$	Concentration solide en rapport avec la courbe de solidus (% wt).
$C_0$	Concentration liquide de référence (% wt).
$C_s^*$	Concentration solide locale d'une couche formée (% wt).
$C_l^*$	Concentration liquide locale correspondant à une concentration solide $C_s^*$ (% wt).
$C_p$	Chaleur spécifique ( $J.kg^{-1}.K^{-1}$ ).
$D$	Coefficient de diffusion chimique dans le liquide ( $m^2.s^{-1}$ ).
$d_l$	Espacement primaire des dendrites ( $m$ ).
$dm$	Echelle de grandeur microscopique ( $m$ ).
$f$	Fréquence (Hz).
$\vec{F}_m$	Force électromagnétique de Laplace-Lorentz.
$F_0$	Amplitude de la force électromagnétique ( $N.m^{-3}$ ).
$f_l$	Fraction liquide.
$f_s$	Fraction solide.
$g$	Gravité ( $m^2.s^{-1}$ ).
$G$	Gradient thermique ( $K.m^{-1}$ ).
$H$	Longueur de référence ( $m$ ).
$H_T$	Longueur du domaine bidimensionnel ( $m$ ).
$\bar{h}_s$	Enthalpie moyenne du solide ( $J$ ).
$h_l$	Enthalpie du liquide ( $J$ ).
$I$	Intégrale de refusion (% wt).
$J$	Densité de courant ( $A.m^{-2}$ ).
$k$	Coefficient de partage.
$K_x, K_y, K_z$	Composantes du tenseur de perméabilité ( $m^2$ ).
$K_m$	Valeur moyenne de la perméabilité pour une fraction liquide de 0,5 ( $m^2$ ).
$L$	Chaleur latente de fusion ( $J.kg^{-1}$ ).
$l_{pat}$	Hauteur du domaine pâteux ( $m$ ).
$m$	Pente de liquidus ( $K.\%^{-1} wt$ ).
$m_{lingot}$	Masse du lingot (g).
$\mathbf{n}_s$	Vecteur normal à l'interface.
$p$	Pression (Pa).
$P_J$	Densité de puissance due à l'effet Joule ( $W.m^{-3}$ ).
$Q$	Quantité de chaleur ( $J$ ).

$r$	Rayon en coordonnées cylindriques ( $m$ ).
$R$	Rayon des barreaux à solidifier ( $m$ ).
$t$	Temps ( $s$ ).
$T$	Température ( $K$ ).
$T_0$	Température de référence ( $K$ ).
$T_c$	Température de nucléation ( $K$ ).
$T_E$	Température eutectique ( $K$ ).
$T_L$	Température de liquidus ( $K$ ).
$T_S$	Température de solidus ( $K$ ).
$T_m, T_f$	Température de fusion ( $K$ ).
$U$	Vitesse de référence ( $m.s^{-1}$ ).
$U_{mp}$	Vitesse moyenne en zone pâteuse ( $m.s^{-1}$ ).
$u, v, w$	Composantes de la vitesse dans un système de coordonnées $(x, y, z)$ ( $m.s^{-1}$ ).
$u_b, v_b, w_b$	Composantes de la vitesse de débit interdendritique ( $m.s^{-1}$ ).
$V$	Volume ( $m^3$ ).
$V_0$	Volume élémentaire de référence ( $m^3$ ).
$W_f$	Vitesse d'avancée du front de solidification ( $m.s^{-1}$ ).
$x, y, z$	Système de coordonnées ( $m$ ).
$\vec{x}$	Vecteur position ( $m$ ).
$\alpha$	Diffusivité thermique ( $m^2.s^{-1}$ ).
$\beta_T$	Coefficient d'expansion thermique ( $K^{-1}$ ).
$\beta_S$	Coefficient d'expansion solutale ( $\%^{-1} wt$ ).
$\delta$	Épaisseur de peau électromagnétique ( $m$ ).
$\Delta$	Largeur du creuset ( $m$ ).
$\Delta T_0$	Intervalle de solidification déterminé à partir du diagramme de phases ( $K$ ).
$\Delta t$	Pas de temps ( $s$ ).
$\varepsilon$	Emissivité.
$\rho$	Masse volumique ( $kg.m^{-3}$ ).
$\rho_0$	Masse volumique de référence ( $kg.m^{-3}$ ).
$\rho_s$	Masse volumique du solide ( $kg.m^{-3}$ ).
$\bar{\rho}$	Masse volumique moyenne du mélange liquide-solide ( $kg.m^{-3}$ ).
$\rho_l$	Masse volumique du liquide ( $kg.m^{-3}$ ).
$\nu_0$	Viscosité cinématique du liquide ( $m^2.s^{-1}$ ).



$\lambda$	Conductivité thermique ( $W.m^{-1}.K^{-1}$ ).
$\lambda_2$	Espacement secondaire des dendrites ( $m$ ).
$\mu_0$	Perméabilité magnétique.
$\lambda_m$	Pas polaire ( $rad.m^{-1}$ ).
$\omega$	Pulsation du champ magnétique ( $rad.s^{-1}$ ).
$\sigma$	Conductivité électrique ( $\Omega^{-1}.m^{-1}$ ).
$\sigma_{Stefan}$	Constante de Stefan ( $W.m^{-2}.K^{-4}$ ).
$\psi$	Grandeur physique scalaire.
$\psi^\alpha$	Grandeur physique scalaire associée à la phase $\alpha$
$\gamma^\alpha$	Fonction de phase associée à la phase $\alpha$

# Préambule

A certaines exceptions près (frittage, métallurgie des poudres...), l'élaboration des alliages métalliques se fait généralement à partir de l'état liquide, ne serait-ce que pour réaliser une composition chimique précise. Sorti de l'industrie agroalimentaire du produit surgelé, du chocolat et des sorbetières, ce passage de l'état liquide à l'état solide peut paraître sans intérêt et quelconque dans la vie de tous les jours : qui s'est déjà posé la moindre question en mettant un bac à glaçons dans un congélateur ? En revanche, il n'en va pas de même en métallurgie où les différentes propriétés du produit final sont un enjeu important. Or la solidification des alliages métalliques est à un carrefour scientifique pluridisciplinaire qui rend son approche complexe, carrefour mêlant transferts thermiques, mécanique des fluides, thermodynamique, métallurgie, génie des procédés...

Les transformations qui ont lieu durant ce changement de phase conditionnent les propriétés mécaniques et électroniques des alliages métalliques solides obtenus (durcissement structural, industrie du silicium...etc.). Certaines de ces propriétés mécaniques peuvent être mises à mal par des écarts de composition sur des échelles de grandeur différentes. Cela peut également entraîner des modifications de propriétés chimiques (par exemple de la corrosion localisée). Si les microségrégations (échelle de grandeur de quelques dizaines de micromètres) peuvent être supprimées par des traitements thermiques post-solidification, il n'en va pas de même pour les mésoségrégations ou les macroségrégations. Ces écarts de composition à plus grande échelle sont d'autant plus contraignants qu'ils apparaissent principalement durant le processus de transformation, obligeant à user de traitements d'homogénéisation chimique post-solidification avant tout traitement thermique usuel de correction des microségrégations. Ces traitements sont d'autant plus longs et pénalisants que les ségrégations sont sévères. La réussite de ces traitements, dans le cas des mésoségrégations est d'ailleurs loin d'être systématique. En outre, certaines de ces ségrégations, désignées sous le nom de canaux ou freckles (taches de rousseur), peuvent créer des zones de rupture dans les pièces métalliques

(aubes de turbines, ailettes...). Les alliages obtenus sont alors impropres pour des utilisations à hautes contraintes. Comprendre la physique de ces défauts que sont les canaux ségrévés, les supprimer ou les diminuer dès la transformation liquide / solide, détecter leur apparition *in situ* (par effet Seebeck par exemple) sont un des enjeux majeurs des études menées sur les processus de solidification. La corrélation forte entre l'écoulement du soluté (dans le liquide et à travers la zone pâteuse) et l'apparition de ces canaux en zone pâteuse est communément admise. La convection, qu'elle soit thermosolutale ou forcée, est le moteur majeur des écoulements. L'utilisation de brassages électromagnétiques (déjà utilisés dans la coulée continue des aciers) pourrait, dans certaines conditions, être d'une aide bénéfique. Cet apport de l'électromagnétisme à la solidification est une des thématiques que nous aborderons dans ce travail, et plus spécifiquement dans la question de savoir quels champs magnétiques utiliser (glissants, rotatifs...) pour quels effets dans la pièce à solidifier. Les simulations numériques sont d'une grande utilité dans la prédiction de ces effets électromagnétiques sur les ségrégations.

Ce travail rentre dans le cadre d'un projet européen nommé MAP MICAST (*Microgravity Application Program « Microstructure formation in CASTing »*), soutenu par l'Agence Spatiale Européenne. Ce programme se situe dans la perspective d'améliorer à terme la maîtrise des microstructures de solidification grâce à un brassage contrôlé obtenu par application de champs magnétiques tournants ou glissants. Son objectif est d'élaborer un modèle global du processus en s'appuyant sur des démarches expérimentales conjointes, dans laquelle il est envisagé, à terme, de recourir à des expérimentations en microgravité. En effet, alors qu'au sol la convection forcée est couplée de façon complexe à la convection naturelle (thermique et surtout solutale), ainsi qu'aux mouvements de décantation des particules et des cristaux dans le cas de la solidification équiaxe, la microgravité offre une possibilité unique de séparer les mécanismes mis en jeu, en partant d'une situation contrôlée par la diffusion, puis en appliquant des niveaux de brassage croissants.

La contribution de cette thèse et du laboratoire EPM dans ce programme MICAST concerne la modélisation de la macroségrégation et de la convection forcée (brassage électromagnétique) dans des creusets rectangulaires et cylindriques, ainsi que la réalisation et l'instrumentation d'expériences modèles afin d'apporter des éléments de validation au modèle numérique. Les travaux se concentreront sur des structures de solidification colonnaires, plus faciles à aborder et à intégrer dans les modèles globaux. Cette première étape est indispensable avant toute perspective de traitement des structures équiaxes.

La présentation de ce travail se fera en cinq parties :

La première partie permettra de poser des notions de solidification, d'établir les bases sur lesquelles se construira le reste du travail. Elle permettra également de faire un bref état des lieux sur la thématique étudiée, les modèles d'équations et l'intérêt porté à une expérience de validation en solidification.

La seconde partie décrit le modèle de solidification utilisé pour les simulations numériques, les différentes équations employées ainsi que les modifications introduites. Elle regroupe aussi les définitions de l'ensemble des nombres adimensionnels utiles à l'étude des résultats ainsi que les définitions de certains paramètres fluctuants tels que les forces électromagnétiques ou la perméabilité de la zone pâteuse.

Dans la troisième partie, nous trouverons une synthèse des études numériques menées afin d'apporter une validation (partielle), dans des cas à deux dimensions, au code de calcul programmé ainsi que les résultats numériques obtenus dans le cadre de l'exploitation du logiciel. L'ensemble des études de ce chapitre concernera un alliage plomb-étain 10 % en masse. L'influence du maillage, de l'ordre du schéma de calcul ainsi que celle de la perméabilité, en convection naturelle sera montrée. L'influence de la convection forcée sur les résultats sera présentée et commentée. Des comparaisons avec les résultats d'autres logiciels de simulation de solidification seront ponctuellement effectuées. Une brève étude en trois dimensions sur un barreau cylindrique, tant en convection naturelle qu'avec un brassage rotatif, conclura cette partie.

La quatrième partie, quant à elle, se veut une synthèse de la conception d'une expérience de solidification : des objectifs initiaux à la conception technique, des problèmes rencontrés aux solutions apportées, du plan d'ensemble à la description élément par élément.

Pour finir, la cinquième partie sera consacrée à une présentation des résultats obtenus grâce à l'expérience de solidification conçue. Nous essaierons d'y dimensionner les grandeurs physiques accessibles afin d'établir des points de comparaison ou des tendances utilisables pour faire des comparaisons avec des résultats de simulations numériques, cela même s'il reste un travail important de dépouillement et surtout de correction de certaines mesures à effectuer. De plus, nous nous essaierons nous même à la simulation numérique de cette expérience à partir de notre code de calcul.



## Partie A

# Solidification, simulation, état de l'art et expérience de validation

L'essentiel des notions de solidification ici présentées est directement inspiré de la littérature classique telle que Flemings [34], [35], [36], [37], Kurz et Fisher [55] ou encore Rappaz et al. [77]. Ces notions permettront d'appréhender les problématiques développées par la suite. Un bref état des lieux sera présenté afin de situer les études menées dans un cadre scientifique plus global.

## A.1 : Notions de solidification des alliages métalliques.

### A.1.1 : Etude expérimentale des diagrammes de solidification.

Dans un premier temps, penchons-nous sur la solidification d'un métal pur soumis à un refroidissement lent dans un creuset. Si l'on mesure en fonction du temps la température d'un point donné, on obtient une courbe de refroidissement du métal. Cette courbe se divise en trois parties : une décroissance, un palier puis une dernière décroissance (cf. figure A-1). Ce palier est d'autant plus marqué que le masse de métal est grande et le refroidissement lent. Il correspond à la période de coexistence du métal liquide et du métal solide. Cela permet de définir la température de fusion  $T_f$  du métal.

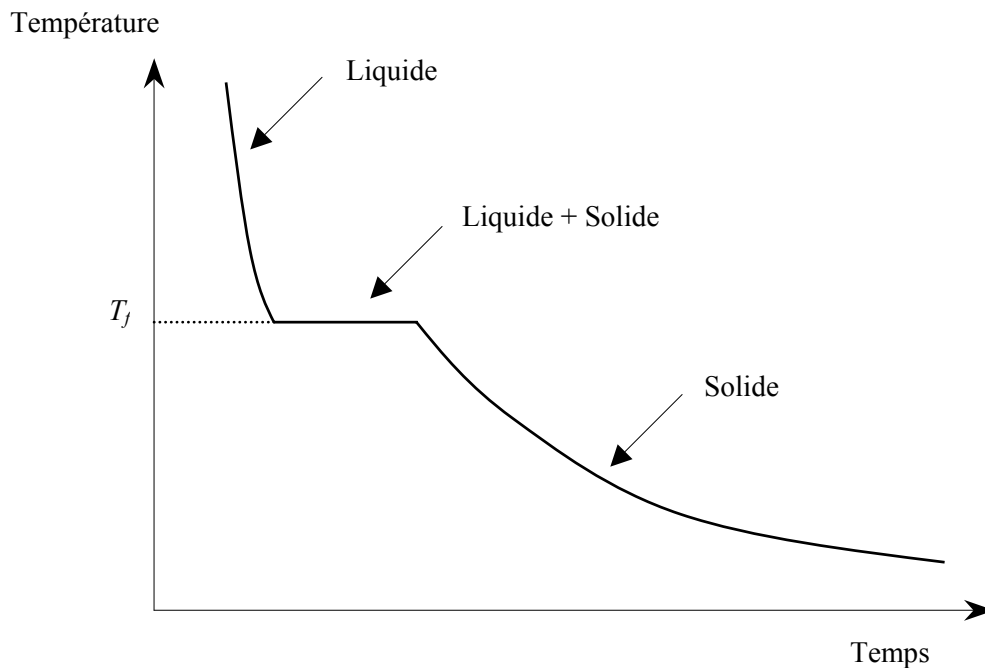


Figure A-1 : Courbe de refroidissement d'un métal pur.

Si l'on étudie par cette méthode, non plus la solidification d'un métal pur, mais celle d'un alliage binaire, la courbe de refroidissement paraît légèrement plus complexe. Une telle étude fait partie de celles qui seront menées dans le cadre de l'expérience de validation réalisée et présentée dans les parties D et E de cet exposé. Cette courbe comporte, en règle générale, une ou plusieurs branches de courbes raccordées par des points anguleux. Ces branches de courbes peuvent parfois coexister avec un palier de solidification isotherme (comme pour un métal pur). Toutefois, il est très exceptionnel que la solidification d'un alliage binaire puisse s'opérer entièrement à une température constante. Chaque point singulier de la courbe correspond à un changement du nombre de phases. Ainsi, le relevé de ces températures caractéristiques permet de déterminer les intervalles de température à l'intérieur desquels le système comporte un même nombre de phases. Les plus importantes sont la température de début de solidification à laquelle apparaît le premier cristal de solide dans le bain liquide et la température de fin de solidification qui correspond à la disparition totale de toute trace liquide dans le système. Si l'on enregistre les différentes courbes de refroidissement d'un « même » alliage binaire en modifiant la teneur des constituants, cela peut contribuer à interpréter le diagramme de solidification de ce système. Toutefois, l'exploitation des courbes d'analyse thermique en vue du tracé des diagrammes d'équilibre est, en pratique, rendue fréquemment délicate pour deux raisons liées aux particularités de la solidification réelle :

- Le début de la solidification s'opère avec un certain retard. En effet, le solide est une phase plus ordonnée que le liquide et le système connaît des difficultés à s'ordonner du liquide vers le solide. Le premier cristal apparaît à une température  $T_c$  inférieure à la température de fusion  $T_f$ . Cette surfusion  $T_f - T_c$  traduit la difficulté du système à créer ce premier germe solide (barrière de nucléation) et joue le rôle de force motrice pour la solidification. Ce phénomène de « surfusion » est suivi, lorsque la solidification s'amorce enfin, d'une remontée de la température jusqu'à la température du palier de solidification, remontée due au rejet de chaleur latente résultant de la solidification (réaction exothermique). Dans le cas d'une solution solide, ceci oblige à déterminer la température de début de solidification  $T_I$  par extrapolation comme il est indiqué sur la figure A-2.
- La température de fin de solidification est généralement très mal définie en raison de la non-homogénéité du solide (par exemple avec le liquide interdendritique à la composition plus élevée). Cf. paragraphe A.1.2.



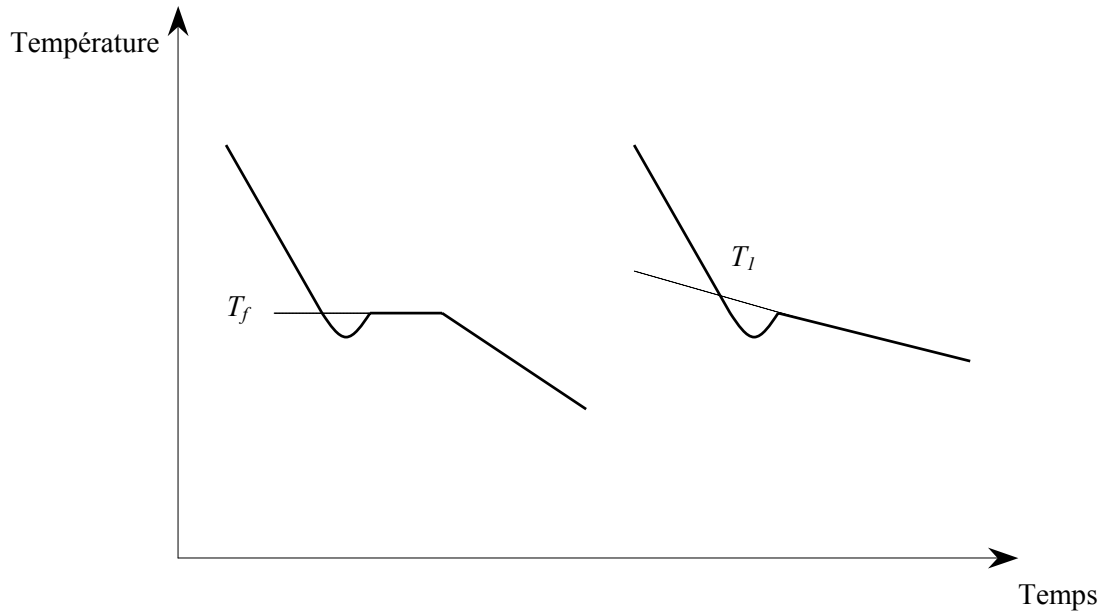


Figure A-2 : Allure réelle des courbes d'analyse thermique.

### A.1.2 : Solidification, diagrammes de phases et ségrégations.

Durant les procédés de solidification, si l'on se place à l'échelle locale, les couches de solide formées ont une concentration solide  $C_s^*$  différente de celle du liquide  $C_l^*$  en contact avec l'interface solide-liquide. Cette concentration liquide à l'interface est celle qui donne naissance à la couche de solide formée, dont la concentration est définie de par le coefficient de partage (Flemings, [34] ; Lesoult, [58]). Si l'on se place dans l'hypothèse de mélange parfait durant la solidification, ces différentes concentrations correspondent aux concentrations d'équilibre, à la température considérée, du diagramme de phases (courbe de liquidus pour la concentration liquide, courbe de solidus pour la concentration solide). Les diagrammes de phases des alliages étudiés peuvent être consultés dans l'annexe A. Ceci n'est réalisé que si la température, la composition du liquide et celle du solide restent uniformes dans toute l'étendue du système au cours de la solidification. En pratique, la solidification n'est presque jamais réalisée dans ces conditions de mélange parfait à l'échelle du système. En revanche cela peut l'être au niveau local. Si l'on considère un alliage binaire simple (cas traité dans l'ensemble de ce travail), l'équilibre thermodynamique du diagramme de phases prévoit une dépendance uniquement en température des différentes concentrations solide et liquide (à pression constante) :

$$C_s^{eq} = C_S(T) \quad (\text{A.1})$$

$$C_l^{eq} = C_L(T) \quad (\text{A.2})$$

Il est parfois possible d'assimiler à des droites les courbes de liquidus et de solidus d'un diagramme de phases donné. On peut toujours définir le coefficient de distribution à l'équilibre ou coefficient de partage de la manière suivante :

$$k(T) = \frac{C_s^{eq}(T)}{C_l^{eq}(T)}, \quad (\text{A.3})$$

Le coefficient de partage est constant lorsque les courbes de liquidus et de solidus sont assimilées à des droites. La courbe de liquidus se définit par l'équation :

$$T = T_m + mC_L, \text{ où } m \text{ est la pente du liquidus.} \quad (\text{A.4})$$

Dans l'approximation présente ( $k$  et  $m$  constants), l'intervalle de solidification, à la concentration  $C_0$ , est représenté par :

$$\Delta T_0 = T_L - T_S = mC_0 \left( 1 - \frac{1}{k} \right) \quad (\text{A.5})$$

Si l'on reste dans l'approximation d'état quasi-réversible, la diffusion homogénéise au fur et à mesure le solide. Consécutivement, la conservation locale du soluté s'écrit :

$$C_0 = f_l C_l + f_s C_s = f_l C_l + (1 - f_l) C_s \quad (\text{A.6})$$

De cette relation, il est possible de déduire la règle des segments inverses plus connue sous le nom de règle du levier qui donne à chaque température la proportion (en atomes ou en masse) des deux phases à l'équilibre, c'est à dire, en ce qui nous concerne, liquide et solide. Cette relation est une approximation simple de la fraction liquide (en conséquence de la fraction solide).

$$f_l = \frac{C_0 - C_s}{C_l - C_s} \text{ et } f_s = \frac{C_l - C_0}{C_l - C_s}. \quad (\text{A.7})$$

Dans les cas réels de solidification, les considérations précédentes s'appliquent à l'interface, où le liquide et le solide sont en contact, et à l'échelle pour laquelle l'homogénéité de  $C_s$  et  $C_l$  existe.

Dans la réalité et les conditions techniques usuelles, l'hypothèse de diffusion totale est imparfaite : la composition du solide est loin d'être homogène et est sensible aux positions successives

de l'interface liquide-solide ainsi qu'au régime de croissance du front de solidification (plan, cellulaire, dendritique). Fréquemment, l'interface prend la forme d'arborescences nommées dendrites (du grec *dendron*, petit arbre). Cette dernière présente une double périodicité spatiale : une qui concerne les bras primaires de dendrites de l'ordre de la centaine de micromètres, une autre qui concerne les bras secondaires de dendrites de l'ordre de la dizaine de micromètres. La déformation de l'interface liquide-solide correspond à une optimisation de surface d'échange pour les transferts thermiques et solutaux. Le liquide occupe cet espace interdendritique au sein de la zone pâteuse, zone de coexistence entre liquide et solide. Une formulation simplifiée consiste à considérer ce système liquide + solide comme un système fermé, cloisonné par les branches de dendrites. Ce liquide interdendritique est à l'origine de la ségrégation dite dendritique (microségrégation). On définit à partir de là trois zones distinctes dans l'alliage en cours de solidification : une zone solide, une zone pâteuse et une zone liquide. Si l'on peut communément admettre que le liquide en zone liquide seule s'homogénéise « suffisamment rapidement », il n'en va pas de même en zone pâteuse. A l'interface liquide-solide, il est admis que l'équilibre thermodynamique du diagramme de phases est respecté, conformément à ce qui a été présenté dans les paragraphes précédents. Au contraire, la concentration en soluté va varier entre deux dendrites (cf. Allen [2], Flemings [34] ou Tanaka [88]). La concentration  $y$  est supérieure à celle de l'interface : le liquide a, à concentration donnée, une température en dessous de celle du liquidus. Le liquide est donc surfondu au sens littéral du terme. Il faut alors utiliser une loi de sélection de l'espacement dendritique afin de calculer cette surfusion. Remarquons que Brody et Flemings postulent que l'espacement s'adapte afin de la minimiser. La surfusion deviendrait alors négligeable et le liquide en serait consécutivement « parfaitement mélangé » et à l'équilibre thermodynamique. L'hypothèse de mélange parfait est toutefois communément acceptée. La thermique fixe alors la concentration du liquide en zone pâteuse. Les travaux de Allen [2] à partir de données expérimentales confortent cette hypothèse même s'ils montrent que la surfusion n'est pas toujours aussi faible que l'affirme Flemings.

La solidification débute à la température de liquidus pour s'achever à la température eutectique lorsque l'on se trouve dans des conditions réversibles. En pratique, elle commence aux alentours de la température de liquidus pour ne terminer qu'aux environs de la température eutectique. Cela définit une zone de température et de concentration, visible sur le diagramme de phases (cf. annexe A) qui correspond à la zone d'existence de la zone pâteuse dont il est question.

Si l'on admet, contrairement à l'hypothèse de diffusion, que chaque couche de solide formée se trouve figée dans sa concentration, et que l'on applique une loi de type Scheil-Gulliver sous une forme locale, on a, pour une transformation de la fraction liquide  $f_l \rightarrow f_l - df_l$  :

$$(C_l - C_s) df_l = f_l dC_l = (1 - k) C_l df_l \quad (\text{A.8})$$

Si  $k > 1$ , liquide et solide sont appauvris à chaque couche formée, et ceci jusqu'à obtenir le solvant pur.

Si  $k < 1$ , liquide et solide s'enrichissent à chaque couche formée et ceci jusqu'à un équilibre avec une phase solide supplémentaire. Cet équilibre est souvent un équilibre eutectique. L'alliage garde des traces majeures de ségrégations.

Les ségrégations dont il est question sont de l'ordre de grandeur de l'espacement interdendritique, c'est à dire la centaine de micromètres. On parle alors de microségrégations. Par traitement d'homogénéisation (par exemple un recuit qui accélère la diffusion), il est possible de les faire disparaître. Toutefois, dans certains alliages, il est possible d'avoir des écarts de composition à l'échelle du lingot tout entier : on parle de macroségrégations. L'équation de Scheil-Gulliver laisse prévoir, pour un coefficient de partage inférieur à un, une ségrégation dans le sens des fractions liquides décroissantes, due au rejet de soluté dans le liquide durant la solidification. Cela correspond à la macroségrégation normale, bien connue des fondeurs. Ces macroségrégations peuvent prendre différentes formes (cf. Lesoult [58]) : canaux ségrégés (*freckles* ou taches de rousseurs), veines sombres (*hot tears*). Cf. figure A-3. L'apparition de ces défauts est directement liée à l'influence de la convection sur la zone pâteuse (cf. Prescott et Incropera [76]). Ces ségrégations en canaux sont observables dans les lingots d'acier riches en carbone ou autres éléments (soufre, manganèse, molybdène...) [58], sur des matériaux transparents (Sarazin et Hellawell [83], Copley et al. [16], McDonald et Hunt [60]) et sur des alliages types tels que Al-Cu (Flemings [34]), Pb-Sn (Ridder [79], Sarazin et Hellawell [83]). Dans des configurations horizontales avec des procédés de solidification de type Bridgman sur un alliage Sn-Bi 10 % en masse, il est possible d'observer une zone ségrégée sur la partie basse du cylindre ainsi que des canaux ségrégés qui l'alimente en soluté (cf. Lehmann [56] et figure A-4). Cette dernière est due à un couplage entre une orientation verticale, vers le bas, de la gravité, la convection thermosolutale et un soluté plus dense que son solvant. L'application d'un champ magnétique continu durant le processus de solidification permet de déplacer ou d'éliminer ces ségrégations majeures grâce aux forces de Laplace-Lorentz créées et qui s'appliquent au liquide en mouvement (Lehmann et al. [57]).

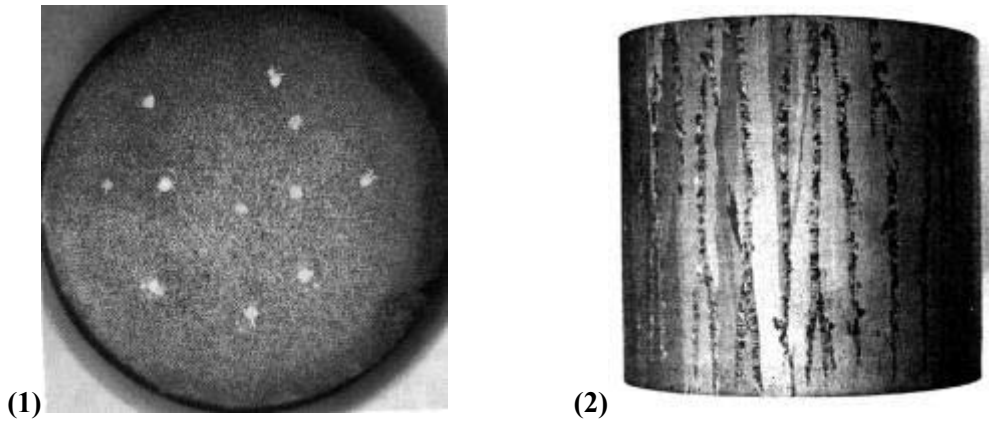


Figure A-3 : (1) Freckles dans un alliage Pb-Sn. Diamètre égal à 38 mm.

J.R. Sarazin et A. Hellawell [83].

(2) Ségrégations en canaux dans un alliage à base Nickel. Diamètre égal à 100 mm.

A.F. Giamei et B.H. Kear [44].

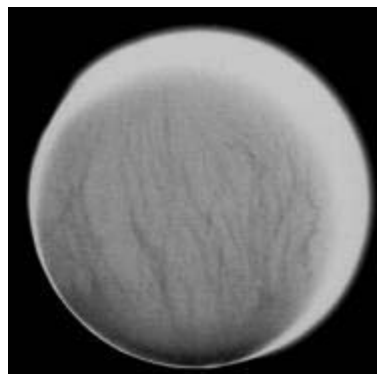


Figure A-4 : Négatif de radiographie X. Alliage Etain-Bismuth 10 % en masse. Diamètre 15 mm.

(Zones plus riches en Bismuth en noir)

## A.2 : Quelques approches numériques.

Afin de prédire l'apparition et l'importance de ces ségrégations (défauts majeurs des processus de solidification), il est nécessaire d'établir un système d'équations couplées permettant de décrire au mieux les phénomènes de transfert et transport ayant lieu lors de la solidification d'un alliage métallique, ceci afin d'en permettre la modélisation numérique. Une grande quantité de travaux sur ces problématiques est apparue depuis 1987 (Benetton et Incropera [9]). L'élaboration d'un tel système d'équations connut différentes étapes dont :

- Une modélisation multi-domaines décrivant les trois régions (liquide, solide et pâteuse) par trois systèmes d'équations distincts (Szekely et Jassal [87], Ridder et al. [78]). Une telle modélisation posait des difficultés au niveau des frontières entre les trois domaines, surtout lorsque ces dernières devenaient irrégulières.
- Une modélisation de milieu continu, où un même système d'équations décrit l'ensemble du domaine en cours de solidification. Une des approches ayant permis le développement d'un tel modèle est la méthode de prise de moyenne volumique (Beckerman et Viskanta [3], [5], Ganesan et Poirier [41]...). Ce procédé de prise de moyenne fera l'objet du paragraphe suivant. Ce dernier est à la base du modèle dont nous nous servirons par la suite. Les limites d'une telle description sont présentées dans les travaux de Bousquet-Mélou [11], travaux dans lesquels sont affinées, entre autres, les propriétés effectives de la zone pâteuse. Cette problématique ne sera pas abordée dans la suite de cet exposé.

### **A.2.1 : Moyennage volumique.**

Le but n'est pas ici d'établir les équations de solidification par moyennage volumique mais de présenter certains des éléments et hypothèses importants de la méthode. Pour de plus amples détails, on peut se référer à Rappaz et al. [77], Beckermann et al. [4]...

Dans le cadre de l'étude des macroségrégations ou des mésoségrégations, il apparaît que la principale origine de ces défauts est le transport de soluté à large échelle. Il est important d'avoir une bonne description des différents phénomènes de transport (chaleur, soluté, quantité de mouvement...) durant la solidification afin d'envisager la prédiction de telles ségrégations. Si le traitement en zone solide et/ou zone liquide est assez aisé (zone monophasique), le problème devient tout autre en ce qui concerne la zone pâteuse. En effet, sans changement d'échelle, il est difficile de décrire la géométrie de cette zone et d'y appliquer les lois de la mécanique des milieux continus. Ce changement d'échelle s'effectue grâce au VER, Volume Élémentaire Représentatif. Il permet d'établir une équivalence entre le milieu réel dispersé et un milieu continu imaginaire. Une fois cette nouvelle échelle définie, les phénomènes de transport sont décrits par des équations moyennées sur ce dernier.

#### *A.2.1.a : Le concept de Volume Élémentaire Représentatif (VER).*

Pour introduire plus précisément le concept de volume élémentaire représentatif, considérons  $\Psi^\alpha$  grandeur physique associée à la phase  $\alpha$  (vitesse, densité, température...) définie à l'échelle microscopique. La moyenne de  $\Psi^\alpha$  est définie par :

$$\langle \Psi^\alpha \rangle = \frac{1}{V} \int_V \Psi^\alpha dV \quad (\text{moyenne volumique sur le volume } V \text{ de } \Psi^\alpha) \quad (\text{A.9})$$

En général, cette moyenne est fonction de la taille, de la forme et de l'orientation du volume d'intégration. C'est pourquoi on définit un volume  $V_0$  tel que cette moyenne y soit stationnaire :

$$\left. \frac{\partial \langle \Psi^\alpha \rangle}{\partial V} \right)_{V=V_0} = 0 \quad (\text{A.10})$$

Ce volume  $V_0$  est le VER, qui permet de définir une échelle de continuité pour la moyenne de  $\Psi^\alpha$ . La zone pâteuse peut être traitée comme un milieu continu pour cette grandeur scalaire s'il existe une échelle continue  $V_0$  commune aux phases liquide et solide.

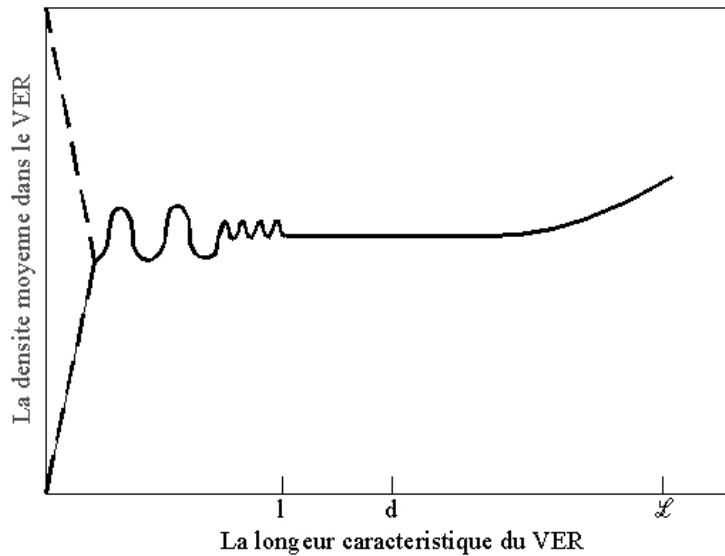


Figure A-5 : Variation de densité moyenne dans le VER.

Si l'on considère un point  $P$  dans la zone pâteuse et que l'on se penche, par exemple, sur la variation de la densité en fonction de la taille du VER, on obtient la courbe illustrée par la figure A-5. Il y a une séparation des échelles microscopique-macroscopique qui permet de trouver un seuil  $l$  pour la longueur caractéristique du VER, à partir duquel la densité est une fonction continue et indépendante de la taille de  $V_0$ . Pour un volume représentatif très petit, la densité est une fonction discontinue de par le fait que le VER peut ne concerner qu'une zone toute liquide ou toute solide de la zone pâteuse. La moyenne prend alors la valeur  $0$  ou  $\Psi^\alpha$  suivant que l'on est dans la phase considérée ou non.  $V_0$  doit donc répondre à une double restriction :

- $V_0 \gg dm$ , échelle microscopique, pour éviter les fluctuations de la moyenne de  $\Psi^\alpha$ .
- $V_0 \ll L$ , dimension de la zone pâteuse, pour être dans la zone où la moyenne de  $\Psi^\alpha$  est constante (cf. figure A-5).

L'existence physique de ce volume élémentaire représentatif pose problème même si elle est communément acceptée. Quelle considération donner à un volume de dimension caractéristique  $500 \mu m$  environ lorsque l'espacement interdendritique primaire est de l'ordre de  $100$  à  $300 \mu m$ , le tout sur un échantillon métallique de quelques millimètres ? Les équations que nous utiliserons par la suite sont toutefois celles issues de cette méthode de moyennage.

#### A.2.1.b : Fractions volumiques et définitions de moyennes.

Si l'on considère ce volume  $V_0$ , maintenant défini, dont  $O'$  est le barycentre et  $\vec{x}$  le vecteur position (cf. figure A-6) qui identifie celui-ci par rapport au système de référence  $(Oxyz)$ , il est désormais possible de définir la fraction volumique moyenne et les opérateurs de prises de moyenne. En premier lieu est définie une fonction de phase  $\gamma^\alpha$  telle que :

$$\gamma^\alpha = \begin{cases} 1 & \text{dans la phase } \alpha \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (\text{A.11})$$

Un point  $P$  se trouvant à l'intérieur du VER est identifié par le vecteur  $\vec{r}$  par rapport au système fixe et par le vecteur  $\vec{\xi}$  par rapport au barycentre du volume élémentaire. Soit :

$$\vec{r} = \vec{x} + \vec{\xi} \quad (\text{A.12})$$

La fraction volumique de la phase  $\alpha$  présente dans le VER est alors définie par :

$$f_\alpha(\vec{x}, t) = \frac{1}{V_0} \cdot \int_{V_0} \gamma^\alpha(\vec{r}, t) \cdot dV \quad (\text{A.13})$$

où  $t$  est le temps,  $\gamma^\alpha(\vec{r}, t)$  la fonction de phase  $\alpha$ . Une première hypothèse consiste à supposer que le VER existe en tout point. Il n'est pas évident qu'il puisse être défini à la fois dans les zones à faible ou haute fraction volumique. La moyenne sur le VER d'une grandeur définie sur la phase  $\alpha$  est alors :

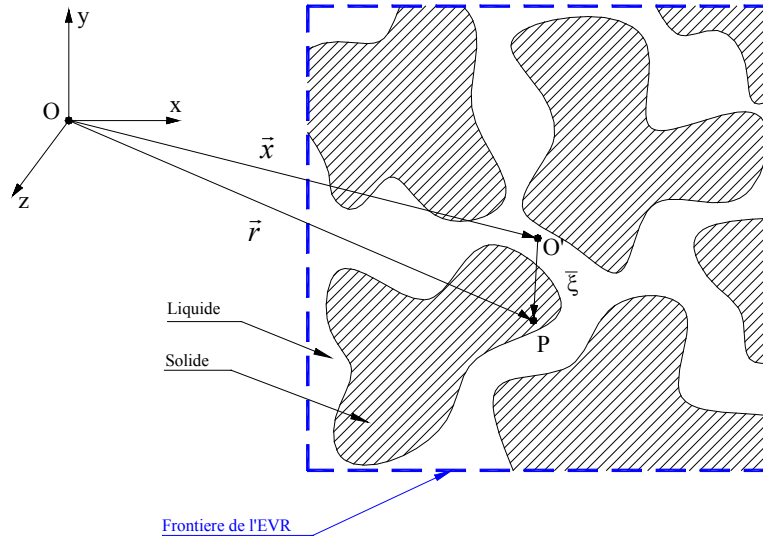


$$\langle \Psi^\alpha \rangle = \frac{1}{V_0} \int_{V_0} \Psi^\alpha \gamma^\alpha dV \quad (\text{A.14})$$

On peut définir également une moyenne dite intrinsèque qui représente la moyenne de  $\Psi^\alpha$  sur le volume occupé par la phase  $\alpha$  à l'intérieur de  $V_0$  :

$$\langle \Psi^\alpha \rangle^\alpha = \frac{1}{V_\alpha} \int_{V_\alpha} \Psi^\alpha dV \quad (\text{A.15})$$

où  $V_\alpha$  est le volume occupé par la phase  $\alpha$  à l'intérieur de  $V_0$  :  $V^\alpha = \int_{V_0} \gamma^\alpha dV$  (A.16)



**Figure A-6 :** Le VER dans la zone pâteuse.

On a alors  $\langle \Psi^\alpha \rangle = f^\alpha \langle \Psi^\alpha \rangle^\alpha$  avec  $f^\alpha = \frac{V_\alpha}{V_0}$ . (A.17)

Chaque grandeur physique (que ce soit la densité, la température, la vitesse, la concentration...) peut être décomposée entre sa partie moyenne et sa partie fluctuante (cf. Gray [46]) :

$$\Psi^\alpha = \gamma^\alpha \langle \Psi^\alpha \rangle^\alpha + \tilde{\Psi}^\alpha \quad \text{où } \tilde{\Psi}^\alpha \text{ est la partie fluctuante.} \quad (\text{A.18})$$

*A.2.1.c : Opérateurs et prise de moyenne :**Relations entre dimensions macroscopiques et microscopiques.*

Les définitions précédentes étant posées, il est possible d'établir les relations permettant la prise de moyenne des équations locales, en considérant désormais la phase liquide. Une démonstration de ces relations peut être trouvée dans Marle [59] ou Whitaker [91].

$$\left\langle \frac{\partial \Psi^l}{\partial x_i} \right\rangle = \frac{\partial \langle \Psi^l \rangle}{\partial x_i} + \frac{1}{V_0} \int_{A_{ls}} n_{lsi} \Psi^l dA \quad (\text{A.19})$$

$$\left\langle \frac{\partial \Psi^l}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial \langle \Psi^l \rangle}{\partial t} - \frac{1}{V_0} \int_{A_{ls}} \mathbf{n}_{lsi} \cdot \mathbf{v}_{ls} \Psi^l dA \quad (\text{A.20})$$

où  $x_i$  est une des variables d'espace,  $\mathbf{n}_{ls}$  le vecteur normal à l'interface, orienté du liquide vers le solide et qui a pour composante  $n_{lsi}$ .  $v_{ls}$  est la vitesse d'un point de l'interface liquide-solide. Ces théorèmes sont directement appliqués aux équations locales de transport. Ils permettent d'aboutir aux équations moyennées présentées dans la partie B de cet exposé. Ce genre de modèle a été développé entre autres par Beckermann et Viskanta [3] et [5], Ganesan et Poirier [39], Ni et Beckermann [71]...

**A.2.2 : Moyennage statistique de phase.**

Quoi que fructueuse en terme de résultats, la méthode d'établissement des équations par moyennage volumique met de côté d'une part le problème d'existence du V.E.R. (notamment au niveau des canaux ségrévés), cf. paragraphe A.2.1.a, et d'autre part le problème de la turbulence du bain liquide (particulièrement lorsque l'on use de champs magnétiques). La décomposition en partie moyenne et partie fluctuante d'une grandeur donnée, telle que faite dans la description du moyennage volumique, rappelle les traitements mathématiques classiques faits en turbulence et sert de point de départ à un traitement par moyennage statistique pour établir les équations de transport nécessaires à la description du problème envisagé. En solidification, cette méthode statistique reviendrait à effectuer la moyenne des résultats d'une expérience répétée un grand nombre de fois. On peut alors se poser la question de la présence de canaux ségrévés avec une telle méthode si la configuration de solidification n'est pas déterministe au niveau des ségrégations. Les méthodes utilisées dans le traitement des écoulements multiphasiques (cf. Morioka et Nakajima [67]) sont généralisées. On pourra en trouver les bases mathématiques chez Drew [19] en ce qui concerne les écoulements diphasiques. Considérons une fonction  $\Psi(\vec{r}, t)$  et une fonction de phase  $\gamma^\alpha(\vec{r}, t)$  définie de la même manière que précédemment. A

partir de cette fonction de phase, on définit une valeur moyenne de phase pour la fonction  $\Psi$ . Soit  $\bar{\Psi}(\vec{r}, t)$  cette valeur moyenne. Elle s'exprime de la manière suivante :

$$f_\alpha \bar{\Psi}(\vec{r}, t) = \langle \gamma^\alpha(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) \rangle \quad (\text{A.21})$$

$$\text{où } f_\alpha \text{ est la fraction volumique de la phase } \alpha \text{ définie par } f_\alpha = \langle \gamma^\alpha(\vec{r}, t) \rangle. \quad (\text{A.22})$$

Les différents champs instantanés (vitesse, composition, température, pression...) sont décomposés en deux termes : un terme moyen et un terme de fluctuation.

$$\Psi = \bar{\Psi} + \psi' \text{ avec } \langle \gamma^\alpha \bar{\Psi} \rangle = f_\alpha \bar{\Psi} \text{ et } \langle \gamma^\alpha \psi' \rangle = 0. \quad (\text{A.23})$$

Les théorèmes classiques sont également vérifiés par ce type de moyennage (loi de Leibnitz, loi de Gauss...). Pour finir, on a, pour la prise de moyenne du produit de deux quantités instantanées  $\Phi$  et  $\Psi$ :

$$\langle \gamma^\alpha \Psi \Phi \rangle = f_\alpha \bar{\Psi} \bar{\Phi} + \langle f_\alpha \psi' \phi' \rangle \quad (\text{A.24})$$

$$\text{Notons quelques propriétés de la fonction de phase : } \frac{\partial \gamma^\alpha}{\partial t} + v_j \frac{\partial \gamma^\alpha}{\partial x_j} = 0 \text{ avec } \frac{\partial \gamma^\alpha}{\partial x_j} = -n_{\alpha j} \delta_\alpha \quad (\text{A.25})$$

$\delta_\alpha$  étant proportionnel à une fonction dirac dont la valeur est zéro exceptée à l'interface liquide-solide,  $v_j$  composantes de la vitesse de l'interface liquide-solide.

$$\frac{\partial \gamma^\alpha}{\partial t} - v_j n_{\alpha j} \delta_\alpha = 0 ; \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} = \left\langle \frac{\partial \gamma^\alpha}{\partial t} \right\rangle ; \frac{\partial f_\alpha}{\partial x_j} = \left\langle \frac{\partial \gamma^\alpha}{\partial x_j} \right\rangle = -\langle n_{\alpha j} \delta_\alpha \rangle \quad (\text{A.26})$$

Ces propriétés étant mises en évidence, le processus de moyennage est appliqué aux équations locales habituelles (cf. annexe B). L'approche reste très similaire au procédé de moyennage volumique, essentiellement dans la zone pâteuse, même si le travail à effectuer sur la fermeture des équations macroscopiques de conservation présente une plus grande difficulté. L'intérêt d'une telle approche est de pouvoir, à terme, mieux prendre en compte la solidification équiaxe, les écoulements turbulents, le transport de particules solides... Il n'est pas dans notre propos de développer plus ici cette méthode somme toute prometteuse déjà évoquée par Fautrelle et al. [22] et Furmanski [38].

### **A.2.3 : Des équations au code de simulation : historique du modèle FHP.**

Il est très ardu de faire une liste exhaustive des codes de simulation de solidification et qui correspondrait à tous les cas de figure, tant sur les équations que sur les algorithmes de résolution. Ne seront abordés dans ce travail, de près ou de loin, que deux codes de calcul. Le premier, modèle de Felicelli- Heinrich-Poirier est celui dont sont issues les équations que nous utiliserons dans le logiciel FLUENT 6. Cela permettra de mettre en exergue l'effet logiciel ou l'effet algorithmique par rapport aux programmations antérieures de ce modèle. Le deuxième, code SOLID du LSG2M (Laboratoire de Sciences et Génie des Matériaux Métalliques de l'Ecole des Mines de Nancy), servira ponctuellement de comparaison aux calculs que nous effectuerons et permettra de comparer qualitativement deux codes de simulation aux équations initiales quelque peu différentes. Une présentation succincte du code SOLID est consultable en annexe C.

L'histoire du code FHP date d'une quinzaine d'années. Heinrich [47], dans ses travaux présentés en 1984, propose un modèle de résolution des équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement, de la température et du soluté, le tout à partir d'un algorithme de résolution éléments finis. La résolution est effectuée à travers une fonction pénalité pour la pression et le concept d'éléments de Petrov-Galerkin pour le décentrage. Cette méthode de Petrov-Galerkin n'est pas adaptée aux problèmes de convection à nombres de Reynolds ou de Peclet élevés. Ce genre de considérations est mentionné dans les travaux de Zienkiewicz, Heinrich [95] ou Kelly [54] et la formulation par pénalisation pour la pression par Heinrich, Marshall [51] (en lieu et place d'une formulation pression-vitesse, pour un écoulement visqueux et incompressible). Dans ses travaux, Heinrich inclut des comparaisons avec les travaux expérimentaux de Chen [12]. Son exactitude, dans le cadre de cylindres horizontaux et maillages irréguliers est vérifiée par Heinrich et Yu [52].

Cette méthode de Petrov-Galerkin et la méthode de résolution des vitesses (effectuée avant la résolution des autres champs physiques) sont une des motivations de l'implantation des équations dans un logiciel à la résolution pression-vitesse plus rigoureuse et plus couplée avec la résolution des autres grandeurs, travail que nous avons effectué et qui sera présenté dans le chapitre B.

Heinrich, par la suite, a perfectionné son modèle dans le cas de la simulation de solidification directionnelle des alliages binaires sous influence de la convection solutale (cf. Nandapurkar, Heinrich et al. [68]) : les équations résolues sont alors les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement (telles que définies par Beckermann [4]), de conservation de l'énergie avec changement de phase, de conservation du soluté où, désormais, la zone pâteuse est considérée comme un milieu poreux à fraction liquide imposée. Dès 1991, Felicelli, Heinrich et Poirier [50], étudient différents modèles (front plan, zone pâteuse à fraction liquide dépendante du temps et zone pâteuse à évolution dictée par des états locaux d'équilibre) et décrivent pour chacun d'entre eux des modèles éléments finis pour la convection thermosolutale afin d'étudier la convection non-linéaire lorsque les systèmes sont instables. Felicelli [26] s'est attelé à la prédiction de la formation des canaux ségrégués

de par la résolution des équations décrivant l'écoulement du fluide, les transports de chaleur (avec changement de phase) et transport du soluté. Les équations sont valables sur l'ensemble du domaine, en accord avec les modèles à moyennage volumique (cf. paragraphe A.2.1). La zone pâteuse reste traitée comme un milieu poreux à perméabilité anisotrope. Les détails des calculs mathématiques sont présentés dans Felicelli et al. [27]. Les équations que nous utiliserons par la suite seront présentées dans la partie B de cet exposé car elles nécessitent un lourd travail de réécriture afin de les adapter au logiciel de résolution. Un certain nombre de comparaisons qualitatives sont effectuées par Heinrich au fur et à mesure de la progression du modèle : avec des solutions aqueuses de chlorure d'ammonium (cf. Copley et al. [16], Sample et Hellawell [80], [81], Chen et Chen [13]) ou avec un alliage binaire Plomb-Etain (cf. Sarazin, Hellawell [83], Nguyen Thi [69]).

Une étude de ce modèle et de ce code a été effectuée par Médina [61], dans un cadre bidimensionnel, pour étudier l'influence de la convection forcée d'origine électromagnétique sur la solidification d'alliage Plomb-Etain. Nous nous situons dans la continuité de ce travail. Le code employé utilise une méthode de discrétisation spatiale par éléments finis bilinéaires, lagrangiens, isoparamétriques et par décentrage amont par éléments de Petrov-Galerkin. La discrétisation temporelle y est, suivant les équations, traitée implicitement ou explicitement. Au niveau de l'algorithme, à chaque pas de temps, le champ de vitesse est calculé en une fois ; puis les autres inconnues font l'objet d'itérations, dans les autres équations, jusqu'à la convergence. Des comparaisons avec les résultats d'autres codes de calcul y ont également été effectuées.

De son côté, Felicelli a poursuivi récemment ses travaux sur une extension à des alliages multiconstitués (cf. Felicelli et al. [28], [30], [31], [33] ou Poirier et al. [73]). Un passage à trois dimensions du modèle a été effectué (cf. Felicelli et al. [25], [29] et [32]).

Ce modèle est la base du travail numérique qui sera mené et présenté dans cet exposé. Les équations seront toutefois réécrites afin de les adapter au logiciel de résolution choisi.

### **A.3 : Le pourquoi d'une expérience de validation.**

Le second point important du travail qui sera présenté par la suite consiste en la réalisation et l'exploitation d'une expérience de validation dénommée benchmark. En effet, force est de constater l'existence et la prolifération d'un grand nombre de codes numériques de simulation. Toutefois, les études effectuées, par exemple, dans le cadre du benchmark Ameth, montrent des différences entre les résultats fournis par différents codes sur un même cas [10]. Les grandes tendances restent tout de même similaires. Il en va de même lors de l'estimation des ordres de grandeurs, pour les différents champs et grandeurs théoriques, confrontés aux valeurs calculées. Si ces phases de comparaisons entre codes sont nécessaires et utiles, elles n'en demeurent pas moins partielles. Nous nous livrerons nous même à ce genre de comparaison lors de la validation partielle du code implanté dans le logiciel

FLUENT, validation partielle qui fera l'objet de la partie C de l'exposé. Ces premières comparaisons étant faites, il semble utile d'établir des comparaisons avec un cas réel de solidification, comparaisons tant qualitatives que quantitatives. En effet, la difficulté principale de la modélisation est l'évaluation expérimentale de la validité des résultats obtenus. Le nombre de paramètres entrant en jeu rendent les conclusions très qualitatives. Toutefois, au regard de la littérature, peu de comparaisons entre les résultats des simulations numériques et des expérimentations sous conditions contrôlées ont été réalisées (Ahmad, Combeau et al. [1], Xu et al. [94], Shahani et al. [86], Flemings et Nereo [37]).

La plupart des dispositifs expérimentaux dont l'objet d'étude est l'apparition des canaux ségrégués ne concerne pas (dans leur immense majorité) les alliages métalliques binaires mais des solutions telles que  $NH_4Cl$  hypereutectique (Chen [12]),  $NaNO_3$  hypoeutectique (Worster [92]) ou bien encore un mélange hypereutectique de  $Na_2CO_3$  (Tanny [89])... De nombreuses expérimentations concernant des solutions de succinonitrile sont très présentes dans la littérature. Ces différentes solutions présentent des facilités expérimentales : faibles températures de solidification ou de fusion, transparence qui permet d'observer l'évolution de la zone pâteuse ou l'évolution des mouvements convectifs par ajout de traceurs colorés... Les dispositifs mettant en jeu des alliages métalliques n'ont pas pour but, dans leur ensemble, l'établissement d'un cas test de validation pour codes numériques de simulation de la solidification. Ils ne sont donc pas instrumentés en conséquence.

Ainsi, l'utilité d'une nouvelle expérience de validation pour un alliage métallique binaire semble indiscutable malgré les difficultés dues aux incertitudes sur les mesures. Une des expériences de référence reste, malgré le temps (1974), l'expérience d'Hebditch et Hunt [46]. Cette dernière consiste en la solidification d'un parallélépipède de dimensions  $6\text{ cm} \times 10\text{ cm} \times 1,3\text{ cm}$ . Cette cavité est thermiquement isolée par de la céramique. L'expérience est supposée bidimensionnelle. Quelques thermocouples (2 à 8) permettent d'estimer la position du front de solidification. Un système de trempe permet de compléter ces mesures. Des cartes de concentration sont établies post-mortem. Les temps de solidification et les champs de température n'étant pas accessibles, l'utilisation des résultats d'Hebditch et Hunt nécessitent d'estimer les conditions de refroidissement pour toute utilisation. Celles-ci peuvent être ramenées à un coefficient de transfert constant. C'est partant de ce constat que la réalisation d'une expérience de solidification a été décidée. Un soin particulier sur l'instrumentation doit être apporté afin de déterminer les champs de température et les conditions de refroidissement. Ce point est le plus difficile car la mesure de températures « précises » est un exercice périlleux. Des analyses post-mortem sont nécessaires afin d'établir des cartes de composition et d'étudier la présence et la forme des canaux ségrégués. Notons que les publications d'Hebditch et Hunt ne mentionnent pas la présence de canaux. Il est donc nécessaire d'adapter la configuration de l'expérience afin de favoriser l'apparition de ces derniers. Ces questions feront l'objet de la partie D de cet exposé.



## Partie B

# Quel modèle de solidification ? Implantation dans le logiciel



Dans ce chapitre, nous nous attacherons à décrire le modèle de solidification développé par Felicelli, Heinrich et Poirier [26], [27] ainsi que les modifications nécessaires apportées au modèle afin de l'adapter au logiciel de résolution choisi. Certains des paramètres du modèle, dépendant à la fois de la géométrie du domaine à solidifier étudié et de certains choix propres (par exemple l'expression analytique de la perméabilité, des forces magnétiques...etc.) seront ici explicités. Les nombres sans dimension utiles aux études menées seront également décrits dans ce chapitre.

## **B.1 : Le modèle Felicelli Heinrich Poirier (FHP).**

### **B.1.1 : Description générale du modèle mathématique.**

Ce modèle consiste en la modélisation des mésoségrégations lors de la solidification d'un alliage métallique. La solidification traitée est colonnaire, l'alliage métallique est binaire. Le cœur de la problématique se situe au niveau de la résolution des équations couplées régissant l'écoulement du métal liquide, le champ de température, la distribution de soluté et la fraction liquide durant la solidification. En effet, les mésoségrégations sont principalement situées en zone pâteuse de par le mécanisme de rejet de soluté et de transport par l'écoulement [26], [1], [90] et [23]. Notons que le moteur de l'écoulement peut aussi bien être la convection naturelle que la convection forcée (générée par brassage électromagnétique). Le modèle numérique, quant à lui, est aussi bien bidimensionnel que tridimensionnel. Toutefois, il ne prend pas en compte la solidification équiaxe dans la zone liquide.

Le modèle mathématique est basé sur une méthode de moyennage volumique [41], [74], les équations locales étant intégrées sur un Volume Élémentaire Représentatif (VER) dont la dimension est intermédiaire entre les échelles de grandeur du domaine et celles des microstructures. La validité d'une telle méthode rapportée à la taille des domaines étudiés dans ce travail et celle des maillages ne sera pas discutée ici. Elle est toutefois communément acceptée.

Avant de détailler les équations, notons les hypothèses faites :

- L'écoulement est laminaire dans la zone liquide.
- Les propriétés physiques (c'est à dire la densité, la conductivité thermique, la capacité calorifique... etc.) sont identiques dans le liquide et le solide.
- La convection naturelle est décrite par l'approximation de Boussinesq sur la densité.
- La zone pâteuse est considérée comme un milieu poreux.
- Le solide est stationnaire i.e. non soumis à la convection.
- Les forces électromagnétiques sont générées par un champ magnétique alternatif.

La loi de Darcy est utilisée pour le traitement (comme milieu poreux) de la zone pâteuse, ceci avec une perméabilité fonction de la fraction liquide  $f_l$ . Les mêmes équations sont appliquées à l'ensemble du domaine, le domaine étant traité comme un continuum. Ce type de modèle, dit modèle continu, a déjà été utilisé par d'autres auteurs tels que Bennon et al. [9] ou Ahmad, Combeau et al. [1]. Pour plus de détails sur les hypothèses et approximations faites, il est possible de se reporter aux travaux de Ganesan et Poirier [41], [74], ainsi que de Nandapurkar et al. [68].

### **B.1.2 : Quelles équations constitutives ?**

On s'intéressera tout d'abord aux expressions analytiques bidimensionnelles des équations. Les légères modifications pour les expressions tridimensionnelles feront l'objet d'un paragraphe ultérieur. Ainsi, nous prendrons les conventions suivantes :

- Le système de coordonnées est, dans le cas bidimensionnel, un système  $(x, z)$  où la gravité est dirigée suivant  $z$ .
- Le temps est décrit par la variable  $t$ .
- Les inconnues principales sont la température  $T$ , la vitesse  $(u, w)$ , la pression  $p$ , la concentration liquide  $C_l$ .
- Les inconnues secondaires sont la fraction liquide  $f_l$ , la concentration moyenne  $C_m$ , l'intégrale de refusion  $I$  (cette dernière inconnue sera précisément définie par la suite).

Ces équations sont décrites dans les paragraphes suivants :

#### *B.1.2.a : Conservation de masse.*

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (\text{B.1})$$

où  $u$  et  $w$  sont les composantes de la vitesse superficielle :  $u = f_l u_l$  et  $w = f_l w_l$ .  $u_l$  et  $w_l$  sont les composantes de la vitesse de débit interdendritique,  $f_l$  la fraction liquide.

#### *B.1.2.b : Conservation de la quantité de mouvement.*

Les équations initiales s'expriment de la manière suivante :

$$\rho_0 \left[ f_l \frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right] = -f_l \frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho g_i f_l + \rho_0 \nu_0 \frac{\partial^2 f_l u_i}{\partial x_i \partial x_j} - \rho_0 \frac{\nu_0 f_l}{K_i} u_i + f_l F_{mi} \quad (\text{B.2})$$

où  $\nu_0$  est la viscosité cinématique du liquide,  $p$  la pression,  $\rho_0$  la densité de référence.  $K_i$ ,  $u_i$ ,  $g_i$ ,  $F_{mi}$ , sont respectivement les composantes suivant les directions  $x_i$  du tenseur de perméabilité, de la vitesse, de la force de gravité et de la force électromagnétique éventuelle (décrite dans le paragraphe B.3.2).

Les termes  $\rho_0 \frac{\nu_0 f_l}{K_i} u_i$  correspondent aux composantes de la force de Darcy, force de « freinage » en milieu poreux (approximation faite pour la description de la zone pâteuse). La perméabilité est infinie lorsque la fraction liquide est égale à 1. Les équations se réduisent alors aux équations de la zone liquide. De même, la perméabilité tend vers 0 lorsque la fraction liquide fait de même.

Remarque : Il est connu que l'écoulement du fluide dans la zone pâteuse dépend grandement du choix de la perméabilité pour des structures dendritiques colonnaires. Cette grandeur sera détaillée ultérieurement.

De par l'approximation de Boussinesq, la densité  $\rho$  dans le terme de pesanteur dépend linéairement de la température  $T$  et de la concentration en soluté  $C_l$  (convection thermosolutale) :

$$\rho = \rho_0 [1 - \beta_T (T - T_0) - \beta_S (C - C_0)] \quad (\text{B.3})$$

où  $T_0$ ,  $C_0$  sont les valeurs de référence respectivement pour la température et la concentration liquide et moyenne.  $\beta_T$  et  $\beta_S$  sont respectivement les coefficients d'expansion thermique et d'expansion solutale de l'alliage.

Dans la zone pâteuse, on néglige les termes  $\partial(I/f_l)/\partial x_i$  (cf. Poirier et al. [41], [68]). Les équations deviennent alors, rapportées à notre système de coordonnées  $(x, z)$  :

$$\rho_0 \frac{\partial u}{\partial t} + \rho_0 \frac{u}{f_l} \frac{\partial u}{\partial x} + \rho_0 \frac{w}{f_l} \frac{\partial u}{\partial z} = -f_l \frac{\partial p}{\partial x} + \rho_0 \nu_0 \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) - \rho_0 \frac{\nu_0 f_l}{K_x} u \quad (\text{B.4})$$

$$\rho_0 \frac{\partial w}{\partial t} + \rho_0 \frac{u}{f_l} \frac{\partial w}{\partial x} + \rho_0 \frac{w}{f_l} \frac{\partial w}{\partial z} = -f_l \frac{\partial p}{\partial z} + \rho_0 \nu_0 \left( \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) - \rho_0 \frac{\nu_0 f_l}{K_z} w - f_l \rho g + f_l F_{mz} \quad (\text{B.5})$$

### B.1.2.c : Conservation de l'énergie.

La conservation de l'énergie peut être décrite par l'équation suivante (cf. Poirier et al. [74]) :

$$\bar{\rho} \frac{\partial \bar{h}_s}{\partial t} + f_l \rho_l \frac{\partial L}{\partial t} - L \frac{\partial}{\partial t} (f_s \rho_s) = \bar{\nabla} \cdot (\bar{\lambda} \bar{\nabla} T) - \rho_l \bar{u} \cdot (\bar{\nabla} \bar{h}_s + \bar{\nabla} L) \quad (\text{B.6})$$

où  $\bar{\rho}$  est la densité moyenne du mélange liquide-solide,  $L$  la chaleur latente de fusion ( $L = h_l - \bar{h}_s$ ),  $\bar{h}_s$  l'enthalpie moyenne du solide,  $h_l$  l'enthalpie du liquide,  $\rho_l$  et  $\rho_s$  les densités du liquide et du solide,  $\bar{\lambda}$  la conductivité thermique du mélange liquide-solide. Si l'on considère  $L$  constant,  $C_p$  et  $\lambda$  étant supposées identiques dans le liquide et le solide, et si l'on utilise les deux relations suivantes,

$$\begin{cases} \frac{\partial \bar{h}_s}{\partial t} = C_p \frac{\partial T}{\partial t} \\ \bar{\nabla} \bar{h}_s = C_p \bar{\nabla} T \end{cases} \quad (\text{B.7})$$

on obtient, finalement, l'équation de conservation de l'énergie :

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + w \frac{\partial T}{\partial z} = \alpha \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) - \frac{L}{C_p} \frac{\partial f_l}{\partial t} \quad (\text{B.8})$$

où  $\alpha$  est la diffusivité thermique ( $\lambda = \rho_0 C_p \alpha$ ). Le dernier terme de droite correspond au rejet de chaleur latente dû au passage du stade liquide au stade solide (ou inversement lors des phénomènes de refusion, au signe près).

### B.1.2.d : Conservation du soluté.

Il est nécessaire de définir avant tout la concentration moyenne pour le mélange liquide-solide :

$$C_m = f_l C_l + f_s \bar{C}_s \quad (\text{B.9})$$

où  $\bar{C}_s$  et  $f_s$  sont respectivement la concentration solide moyenne et la fraction solide. Notons que la fraction solide est directement reliée à la fraction liquide par la relation  $f_s = 1 - f_l$ . Raisonner sur l'une ou sur l'autre est strictement identique. Dans le travail à venir, la diffusion du soluté dans le solide est considérée comme nulle. On a alors l'équation suivante pour la concentration moyenne (cf. Poirier et al. [74]) :

$$\frac{\partial C_m}{\partial t} + u \frac{\partial C_l}{\partial x} + w \frac{\partial C_l}{\partial z} = D \left( \frac{\partial}{\partial x} \left( f_l \frac{\partial C_l}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( f_l \frac{\partial C_l}{\partial z} \right) \right) \quad (\text{B.10})$$

où  $C_l$  est la concentration liquide,  $D$  la diffusivité chimique du soluté dans le liquide (supposée constante).

### B.1.2.e : Equilibre thermodynamique local.

Dans la zone pâteuse, la concentration liquide est quasiment égale à la valeur d'équilibre donnée par le diagramme de phases, c'est à dire :

$$C_l = C_L(T) = \frac{T - T_{melt}}{m} \quad \text{si } f_l < 1 \quad (\text{B.11})$$

$$\text{et } C_l = C_m \quad \text{si } f_l = 1 \quad (\text{B.12})$$

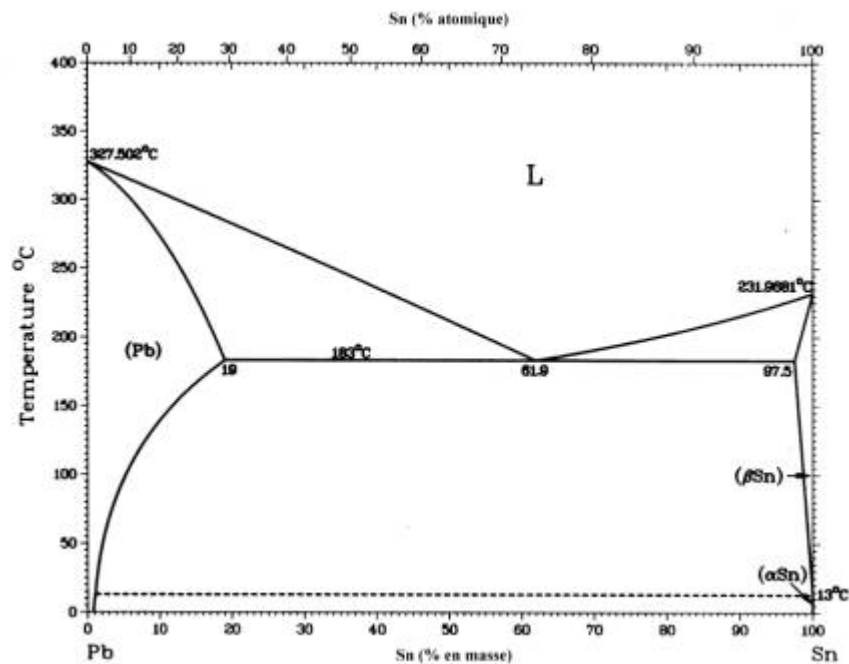


Figure B-1 : Exemple de diagramme de phases. Plomb - Etain. (cf. Metals, [65]).

Le solide est, quant à lui, formé de couches successives dont la concentration locale est donnée par le diagramme de phases : chaque couche formée a une concentration  $kC_l$ . Au fur et à mesure de l'enrichissement en soluté du liquide lors de l'avancement de la solidification, les couches de solide formées sont de plus en plus riches d'où une inhomogénéité du solide (microségrégations). Il en résulte que la concentration solide moyenne est déterminée à partir de l'intégration des différentes valeurs, couche par couche (pas de diffusion dans le solide) :

$$\bar{C}_s = \frac{I}{f_s} \int_0^{f_s} C_s^* df_s = \frac{I}{1-f_l} \int_{f_l}^1 kC_l df_l \quad (\text{B.13})$$

où  $k$  est le coefficient de partage, considéré comme constant,  $C_s^*$  la concentration du solide par couche successive.

La notation suivante sera prise dans tout le reste de l'exposé :

$$I = I(t) = \int_{f_l}^1 kC_l df_l \quad (\text{B.14})$$

L'équation de concentration moyenne devient alors  $C_m = f_l C_l + I$ . Le traitement de l'intégrale  $I$  est d'une importance majeure tant dans le domaine de la refusion que dans celui de la prédiction des canaux ségrégés.

### B.1.3 : La refusion, causes et conséquences.

A faible vitesse de solidification (i.e. dans les cas qui seront étudiés ici), un phénomène de refusion apparaît dont l'importance n'est pas à négliger. En effet, certaines parties de la zone pâteuse peuvent être sujettes à ce phénomène : du solide formé précédemment retourne à l'état liquide (les raisons en seront détaillées par la suite). Il apparaît que ce phénomène est fortement responsable de l'apparition et du maintien des canaux ségrégés durant la solidification du lingot. Le modèle ici présenté essaie de pleinement tenir compte de ce mécanisme.

Durant la solidification, on a  $\partial f_l / \partial t < 0$ . Or localement, différents facteurs se conjuguent de telle sorte que l'on puisse avoir  $\partial f_l / \partial t > 0$ . Il y a alors refusion. A un instant donné, considérons un élément différentiel de volume (en zone pâteuse) caractérisé par une fraction liquide  $f_{la}$  (cf. figure B-2). A cette fraction liquide et ce volume différentiel étudié est aussi associée une concentration liquide, notée  $C_{la}$ , donnée par la courbe de liquidus du diagramme de phases (cf. figure B-1). Les contraintes

thermodynamiques du diagramme de phases impliquent qu'à une concentration liquide en zone pâteuse est automatiquement associée une température et inversement. Quels facteurs peuvent alors provoquer la refusion de cet élément de volume ?

- Une augmentation locale de température. Cette augmentation de chaleur ne serait possible que par une advection de liquide plus chaud à travers notre élément de volume. Toutefois, la faible valeur du nombre de Prandtl dans les alliages métalliques liquides discrédite cette explication : la diffusion thermique est de loin trop prépondérante. La faible vitesse de solidification agit dans le même sens.
- Une augmentation de concentration liquide (dans les cas où le coefficient de partage  $k$  est inférieur à 1, ce qui sera le cas dans toutes nos études). Cette augmentation de concentration est favorisée par l'advection de liquide plus riche en soluté à travers notre volume d'étude. Elle est toutefois contradictoire avec l'hypothèse d'équilibre thermodynamique en zone pâteuse. Le seul « paramètre de relaxation » est alors la fraction liquide qui doit augmenter afin de sortir de la contrainte de l'équilibre thermodynamique. Cette explication est donc celle privilégiée.

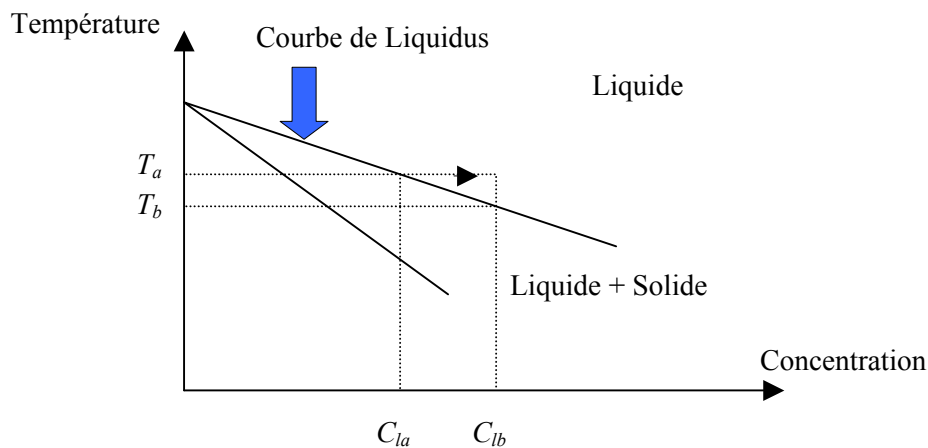


Figure B-2 : Evolution de la concentration rapportée au diagramme de phases durant la refusion.

De par cet enrichissement en soluté, la concentration de l'élément de volume considéré devient alors  $C_{lb}$  avec  $C_{lb} > C_{la}$ . La température de solidification s'ajuste automatiquement à la valeur  $T_b$  de la courbe de liquidus correspondant à la nouvelle concentration liquide, le tout dans le respect de l'équilibre thermodynamique local imposé par le diagramme de phases.

$$C_{lb} > C_{la} \quad \Rightarrow \quad T_b = (mC_{lb} + T_{melt}) < T_a \quad (\text{B.15})$$

La température  $T_a$  de l'élément de volume ne changeant pas, nous nous retrouvons au-dessus de la nouvelle température de solidification, i.e. dans la zone liquide du diagramme de phases. Il y a donc refusion d'une partie de l'élément de volume pour nous réajuster au diagramme (le solide étant formé de couches, au fur et à mesure de la solidification).

Le phénomène de refusion a des conséquences sur la concentration moyenne du solide  $\bar{C}_s$ . Celle-ci est déterminée à partir de l'historique de solidification du solide se trouvant dans le volume analysé. Chaque couche du solide est à une concentration  $C_s^* = k C_l$  correspondant à la concentration à l'interface liquide-solide à chaque valeur de la concentration liquide. Si l'on trace la courbe concentration solide par couche en fonction de la fraction solide (courbe dite « de microségrégation », figure B-3), on s'aperçoit que l'intégrale  $I_a(t)$  qui permet de calculer la concentration solide moyenne correspond à l'aire hachurée en noir et blanc. Toutefois, lors de la refusion (passage du point  $a$  au point  $b$  sur la figure B-2), on peut être tenté de dire, si l'on utilise l'expression B.14 sans se référer à la courbe de la figure B-3, que la nouvelle intégrale  $I_b(t)$  correspondant à la nouvelle concentration moyenne du solide est donnée par la relation :

$$I_b(t) = I_a(t) - dI_{\text{faux}} \quad (\text{B.16})$$

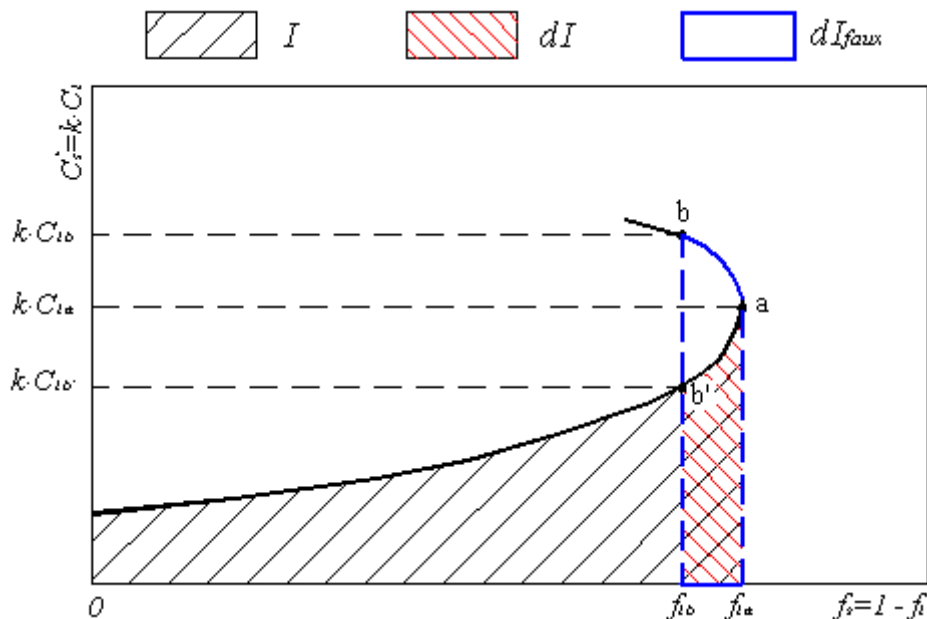


Figure B-3 : Courbe de microségrégation dans le solide

Or, il est évident, au vu du graphe, que  $dI$  est donné par l'aire hachurée en rouge : localement, on fait refondre la couche  $df_l = f_{lb} - f_{la}$  dont la concentration solide correspondante varie entre  $kC_{lb'}$  et  $kC_{la}$  et non pas entre  $kC_{lb}$  et  $kC_{la}$ . Il apparaît alors que, durant la refusion, on ne peut calculer la



concentration liquide moyenne à partir de la simple relation linéaire précédemment citée mais seulement à partir de la courbe de microségrégation qui est discrétisée au fur et à mesure du calcul dans un double tableau (concentration liquide / fraction solide) fonction du temps  $t$ . Comme il est impossible de prévoir où et quand aura lieu la (les) éventuelle(s) refusion(s), il est nécessaire d'effectuer ce double stockage sur l'ensemble du domaine.

## **B.2 : Quel logiciel employer ? Réécriture des équations.**

Après réflexion, le logiciel FLUENT 6.0 a été choisi afin de résoudre notre système couplé d'équations. Il s'agit d'un logiciel commercial spécialisé en modélisation numérique d'écoulements fluides et transferts thermiques. La résolution se fait par une méthode de volumes finis. De plus, un logiciel performant de maillage (GAMBIT) y est associé, permettant de varier facilement les géométries étudiées, lorsque besoin est. L'avantage d'un tel choix de logiciel est la robustesse du solveur, ainsi qu'une fiabilité déjà établie en ce qui concerne le calcul d'écoulements. En effet, comme il sera montré par la suite, un calcul « propre » de l'écoulement est un préalable obligatoire à toute modélisation de solidification, l'écoulement influençant de manière conséquente les mésoségrégations. Ajoutons à cela l'extrême facilité du passage de la bidimensionnalité à la tridimensionnalité. Dans des perspectives à plus long terme, il est possible d'opérer avec des écoulements turbulents aussi bien que laminaires. Toutefois, le logiciel présente quelques rigidités concernant le traitement des équations nous obligeant parfois à les réécrire ou les adapter pour tenir compte des standards FLUENT. Il est à noter que les équations résolues par FLUENT sont dimensionnelles. Elles ne seront donc pas adimensionnalisées dans la suite de l'exposé. Les définitions de certains nombres adimensionnels seront toutefois présentées afin de permettre de situer nos simulations par rapport à d'autres codes.

### **B.2.1 : Réécriture des équations pour leur implantation.**

L'équation de continuité est la seule à pouvoir être implantée telle quelle (déjà prise en charge). Les équations de conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie nécessitent quelques aménagements afin de tenir compte des termes déjà présents dans le logiciel. L'équation de conservation du soluté, quant à elle, doit être intégralement implantée.

#### *B.2.1.a : Implantation de l'équation de conservation de la quantité de mouvement.*

Pour les écoulements incompressibles et sans source de masse (notre cas), FLUENT résout automatiquement les équations de conservation de quantité de mouvement suivantes :

$$\frac{\partial(\rho_0 u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_0 u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho_0 \nu_0 \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + \rho g_i + F_i \quad (\text{B.17})$$

où  $F_i$  représente un terme source homogène à une densité volumique de force (par exemple les forces gravitationnelles volumiques ou les forces externes). Les autres termes, quant à eux, sont rigidelement programmés dans le solveur FLUENT. Le logiciel permet à travers des fonctions « utilisateur » (*UDF - User defined functions*) de définir ce terme source avec une très grande souplesse. Ces fonctions « utilisateur » sont des programmes externes écrits en langage C.

On voit aisément que les équations de conservation de quantité de mouvement du logiciel diffèrent de celles de notre modèle, entre autre de par l'apparition de la fraction liquide dans les termes non linéaires de convection, de pression et de pesanteur. En conséquence, il est nécessaire de réécrire ces équations pour les rendre compatibles. On obtient alors :

$$\frac{\partial(\rho_0 u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_0 u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho_0 \nu_0 \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + F_{pi} + F_{ui} + F_{gi} + F_{Ki} + F_{mi} \quad (\text{B.18})$$

où  $F_{pi}$ ,  $F_{ui}$ ,  $F_{gi}$ ,  $F_{Ki}$  et  $F_{mi}$  sont cinq termes sources dont les deux premiers sont des termes de « compensation » pour rendre les écritures équivalentes et les trois suivant des forces pour décrire respectivement le terme de pesanteur avec l'approximation de Boussinesq, la force de freinage de Darcy caractéristique des milieux poreux et le brassage électromagnétique. Ces termes s'écrivent tour à tour de la manière suivante :

$$F_{pi} = (1 - f_l) \frac{\partial p}{\partial x_i} \quad (\text{B.19})$$

$$F_{ui} = \rho_0 \left( 1 - \frac{1}{f_l} \right) u_j \frac{\partial(u_i)}{\partial x_j} \quad (\text{B.20})$$

$$F_{gi} = f_l \rho g_i = f_l \rho_0 g_i [1 - \beta_T (T - T_0) - \beta_C (C_l - C_0)] \quad (\text{B.21})$$

$$F_{Ki} = \rho_0 \nu_0 \frac{f_l}{K_i} u_i \quad (\text{B.22})$$

La force de Laplace-Lorenz incluse dans le terme source  $F_{mi}$  sera décrite ultérieurement, son expression analytique dépendant de la géométrie étudiée et de certaines approximations.

*B.2.1.b : Implantation de l'équation de conservation de l'énergie.*

L'équation de conservation de l'énergie résolue par FLUENT est la suivante :

$$\rho_0 c_p \left( \frac{\partial T}{\partial t} + u_i \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + S_h \quad (\text{B.23})$$

où  $S_h$  est un terme source paramétrable. On observe que la partie fixe de l'équation ci-dessus est identique à l'équation de notre modèle. Il suffit de rajouter le terme de rejet de chaleur latente comme terme source :

$$S_h = -\rho_0 L \frac{\partial f_l}{\partial t} \quad (\text{B.24})$$

*B.2.1.c : Implantation de l'équation de conservation du soluté.*

En dehors des équations classiques de conservation, (équation de conservation de masse, de quantité de mouvement et de l'énergie), FLUENT permet d'ajouter de nouvelles équations de transport (nommées *UDS - user defined scalars*). Cette possibilité a été utilisée pour implanter ex nihilo l'équation de conservation du soluté. Considérons une grandeur scalaire  $\phi_k$ . FLUENT peut résoudre l'équation de transport scalaire suivante :

$$\frac{\partial(\rho_0 \phi_k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( F_k \phi_k - \rho_0 \Gamma_k \frac{\partial^2 \phi_k}{\partial x_i} \right) = S_k \quad (\text{B.25})$$

où  $F_k$  représente le flux massique du scalaire (flux qui peut être défini par l'utilisateur),  $\Gamma_k$  coefficient de diffusion (également définissable par l'utilisateur) et finalement  $S_k$  terme source de l'équation.

L'équation du soluté que l'on désire implanter présente deux inconnues  $C_l$  et  $C_m$ . Il est nécessaire de définir quelle est l'inconnue principale et quelle est celle qui sera extrapolée à partir des valeurs calculées. Les essais menés avec la concentration moyenne  $C_m$  comme inconnue principale n'ont pas été concluants tant au niveau des résultats obtenus qu'au niveau de la convergence ou de la stabilité de l'équation. La concentration liquide a donc été choisie comme inconnue principale (cf. A. Ciobanas [14]). L'équation réécrite en éliminant la concentration moyenne a alors la forme suivante :

$$\frac{\partial(\rho_0 f_l C_l)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho_0 u_i C_l - \rho_0 (f_l D) \frac{\partial C_l}{\partial x_i} \right) = \frac{\partial(\rho_0 I)}{\partial t} \quad (\text{B.26})$$

Il est désormais facile d'identifier le flux, le coefficient de diffusion et le terme source à rajouter :

$$F_k = \rho_0 u_i \quad (\text{B.27})$$

$$\Gamma_k = f_l D \quad (\text{B.28})$$

$$S_k = \frac{\partial(\rho_0 I)}{\partial t} \quad (\text{B.29})$$

Le terme temporel peut également être décomposé dans le logiciel en un terme explicite et un terme implicite afin de tenir compte de la fraction liquide.

#### B.2.1.d : Equations auxiliaires.

Pour introduire les contraintes du diagramme de phases (ajustement de la valeur  $C_l$  dans la zone pâteuse), calculer la fraction liquide et le terme de refusion, on définit des équations auxiliaires en utilisant les possibilités des fonctions scalaires afin que chaque grandeur soit calculée de manière itérative au même titre que les inconnues classiques. Quatre équations sont nécessaires :

- La première réalise l'ajustement de la concentration liquide en zone pâteuse sur la valeur imposée par le diagramme de phases.
- La deuxième calcule la fraction liquide dans le volume fini correspondant.
- La troisième, à partir de la nouvelle fraction liquide et de la courbe de microségrégation stockée en « double tableau » pour chaque maille du domaine, calcule la variation  $dI$  du terme de refusion  $I$ .
- La quatrième réalise simplement le calcul de la nouvelle valeur de l'intégrale  $I$  (nécessaire dans le calcul de la fraction liquide, de l'extrapolation de la concentration moyenne et de la concentration du solide).

Dans la présentation de l'algorithme de calcul, ces équations auxiliaires seront respectivement nommées  $UDS\_0$ ,  $UDS\_1$ ,  $UDS\_2$  et  $UDS\_3$ . L'équation de conservation du soluté sera quant à elle nommée  $UDS\_4$ . Ces numérotations correspondent à la numérotation d'implantation dans le logiciel FLUENT.

Remarque : Un tel système de stockage en « double tableau » sur l'ensemble du domaine pour la courbe de microségrégation a été utilisé pour un certain nombre des résultats qui seront présentés. Toutefois, un tel système de stockage est très gourmand en mémoire informatique : (*nombres de bits*

de stockage)  $\times$  (2 tableaux)  $\times$  (nombre d'éléments du maillage)  $\times$  (nombre de pas de temps durant la simulation). Or le pas de temps est de l'ordre de 30 ms pour des durées de simulation de 15 ou 20 minutes voire plus. On peut rapidement arriver à des dimensions de tableaux difficilement gérables voire totalement ingérables. Ainsi, au fur et à mesure que les difficultés se présentaient, un système de stockage en « zone tampon » a été préféré. On continue de stocker toutes les valeurs durant le calcul mais on ne conserve les valeurs de la fraction liquide et de la concentration liquide que pour un certain nombre d'itérations de calcul (i.e. pour un certain nombre de pas de temps). En effet, lorsque ces « tableaux réduits » sont proches d'être remplis, l'ensemble des valeurs est déplacé dans les tableaux (cf. figure B-4) afin de libérer de l'espace et de ne conserver que les valeurs utiles. La seule contrainte d'un tel système de stockage est de déterminer préalablement le nombre maximum de couches de solide concernées par les phénomènes de refusion. De plus, il reste nécessaire d'implanter une grandeur de contrôle permettant de vérifier durant le calcul que l'on n'excède pas la dimension de ces « tableaux réduits » afin de ne pas douter de la validité du résultat numérique obtenu. Bien entendu, les deux systèmes de stockage donnent, pour les durées de calculs identiques, exactement les mêmes résultats.

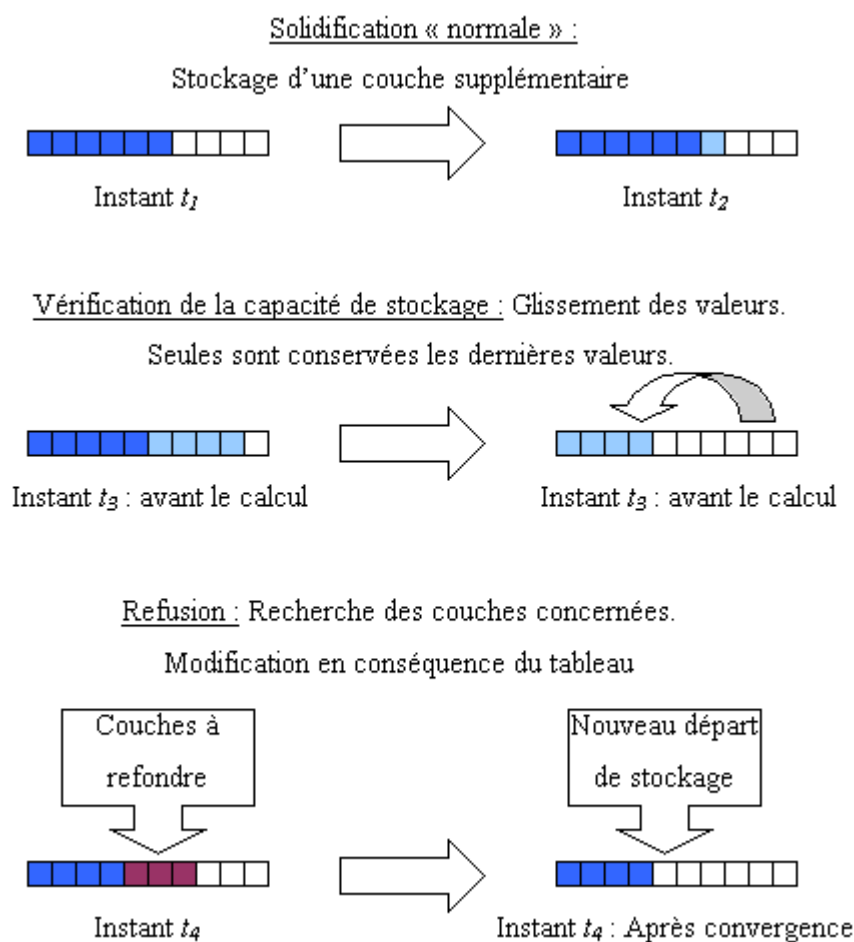


Figure B-4 : Schémas de fonctionnement des tableaux de stockage pour la courbe de microségrégation. Exemples donnés pour un seul tableau et de dimension 10.

Ces précisions faites, il est désormais possible de présenter l'algorithme de résolution retenu après différents essais de convergence et de stabilité.

### B.2.2 : Algorithme de résolution.

Toutes les variables sont connues au temps  $t^0$  de par l'initialisation. On les suppose alors connues au temps  $t = t^n$  :  $(p, u, w, T, f, C_l, I)^n$ . Pour avancer au pas de temps suivant, toutes les équations du modèle sont calculées de manière itérative :

Etape 1 : Incrémentation du pas de temps :  $t^{n+1} = t^n + \Delta t$  ; Vérification de l'espace libre dans les tableaux de stockage pour la courbe de microségrégation. Dans la négative, « glissement » des valeurs stockées dans les tableaux.

Etape 2 : Entrée dans la boucle d'itération  $i = 0$  :  $p_i^{n+1} = p^n$ ,  $u_i^{n+1} = u^n$ ,  $w_i^{n+1} = w^n$ ,  $T_i^{n+1} = T^n$ ,  $f_{li}^{n+1} = f_{li}^n$ ,  $C_{li}^{n+1} = C_{li}^n$ ,  $I_i^{n+1} = I_i^n$  ;

Etape 3 : Itération  $i + 1$  ;

A - Calcul en fonction de l'algorithme de discrétisation spatiale, temporelle et de la méthode couplage pression-vitesse du logiciel:  $p_{i+1}^{n+1}$ ,  $u_{i+1}^{n+1}$ ,  $w_{i+1}^{n+1}$ ,  $T_{i+1}^{n+1}$  ;

B- Résolution des fonctions scalaires (UDS) :

UDS 0 : Réajustement de la valeur de la concentration liquide à la valeur imposée par la courbe de liquidus :

$$C_{li+1}^{n+1} = \begin{cases} C_l(T_{i+1}^{n+1}) & \text{pour } C_{li}^{n+1} \leq C_l(T_{i+1}^{n+1}) \\ C_{li}^{n+1} & \text{pour } C_{li}^{n+1} > C_l(T_{i+1}^{n+1}) \end{cases}$$

UDS 1 : Calcul de la nouvelle fraction liquide, fonction des grandeurs précédemment calculées :

$$f_{li+1}^{n+1} = \frac{C_{mi}^n - I_i^{n+1}}{C_{li+1}^n} = \frac{(f_{li}^{n+1} \cdot C_{li}^n + I_i^{n+1}) - I_i^{n+1}}{C_{li+1}^n} = \frac{f_{li}^{n+1} \cdot C_{li}^n}{C_{li+1}^n}$$

UDS 2 : Calcul de la variation du terme de refusion  $I$  en tenant compte de la courbe de microségrégation de la cellule concernée (cf. paragraphe B.1.3). On obtient ainsi :  $dI_{i+1}^{n+1}$  ;

UDS 3 : Calcul de la nouvelle valeur de  $I$  :

$$I_{i+1}^{n+1} = I^n + dI_{i+1}^{n+1}$$

UDS 4 : Equation de conservation du soluté. On fait transporter et diffuser la concentration liquide (déjà ajustée lors du calcul de la fonction scalaire  $n^\circ \theta$ ). On obtient une nouvelle valeur pour la concentration liquide :  $C_{l_{i+1}}^{n+1}$  ;

Au sortir de cette boucle d'itération, on vérifie si les valeurs de  $p_{i+1}^{n+1}$ ,  $u_{i+1}^{n+1}$ ,  $w_{i+1}^{n+1}$ ,  $T_{i+1}^{n+1}$ ,  $f_{l_{i+1}}^{n+1}$ ,  $C_{l_{i+1}}^{n+1}$ ,  $I_{i+1}^{n+1}$  sont convergées. Si oui, on passe au pas de temps suivant donc à l'étape 1. Si non, on continue la boucle d'itération en revenant à l'étape 3.

## B.3 : Quels paramètres fluctuants dans ce modèle ?

### B.3.1 : La perméabilité, les choix possibles.

L'écoulement du fluide dépend fortement de la perméabilité choisie pour le traitement de la zone pâteuse. Ainsi deux types de formulation sont ici envisagés : une formulation anisotrope et discontinue ainsi qu'une formulation isotrope et continue.

#### B.3.1.a : Expression anisotrope de la perméabilité.

Pour le premier cas, les lois de perméabilité sont celles proposées par Felicelli et al. [26]. La perméabilité est anisotrope afin de pouvoir prendre en compte la direction de solidification et la nature colonnaire de la zone pâteuse.  $K_x$  représente la perméabilité relative à l'écoulement perpendiculaire aux dendrites et  $K_z$  celle relative à l'écoulement parallèle aux dendrites. On a ainsi :

$$K_x = 7,08 \cdot 10^{-16} d_l^{2,08} f_l^{3,32} \quad \text{pour } 0,19 \leq f_l \leq 0,66 \quad (\text{B.30})$$

selon Poirier [72], où  $K_x$  s'exprime en  $m^2$  et  $d_l$  en  $\mu m$  (ici,  $300 \mu m$  pour l'espacement des bras primaires de dendrites, selon Sarazin et al. [83]).

$$K_x = d_i^2 \cdot 10^{-2} \left\{ -5,955449 + 5,652925 \left( \frac{f_i}{1-f_i} \right)^{\frac{1}{4}} \right\} \quad \text{pour } f_i > 0,66 \quad (\text{B.31})$$

selon Sangani et al. [82].

De même pour  $K_z$  :

$$K_z = 3,75 \cdot 10^{-4} f_i^2 d_i^2 \quad \text{pour } 0,17 \leq f_i \leq 0,61 \quad (\text{B.32})$$

avec  $d_i$  en  $m$ , selon Drummond et al. [20].

$$K_z = d_i^2 \cdot 0,07425 \left\{ \text{Log}(1-f_i)^{-1} - 1,487 + 2(1-f_i) - \frac{(1-f_i)^2}{2} \right\} \quad \text{pour } f_i > 0,61 \quad (\text{B.33})$$

selon Ganesan [40].

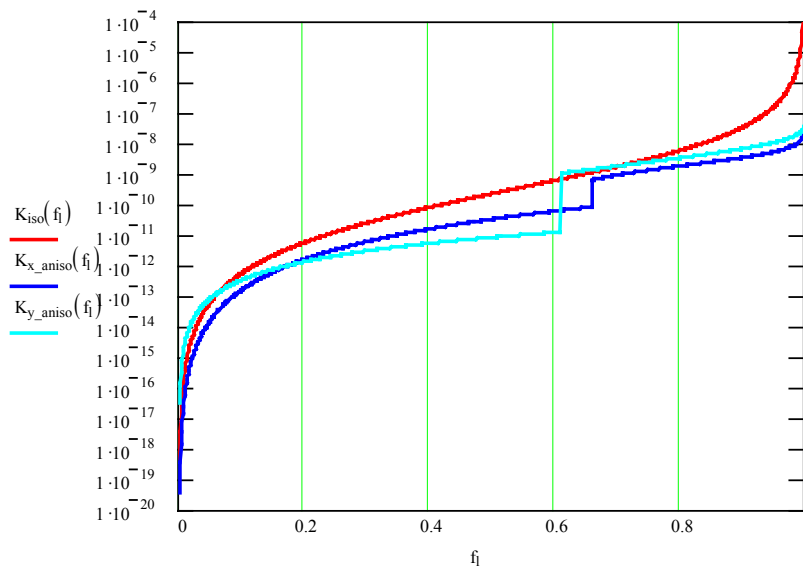


Figure B-5 : Logarithme des composantes de la perméabilité.

### B.3.1.b : Expression isotrope de la perméabilité. Ecriture de Carman-Kozeny.

Dans le deuxième cas (cas de Carman-Kozeny, Sheidegger [84]), la perméabilité est exprimée de manière continue et isotrope. On a alors :



$$K = \frac{d_l^2 f_l^3}{\pi^2 K_c t^2 (1 - f_l)^2} \quad (\text{B.34})$$

où  $d_l$  est la distance interdendritique.

$$K = \frac{9e^{-8} \cdot f_l^3}{197,39 \cdot (1 - f_l)^2} \text{ avec } d_l = 300 \mu\text{m}, K_c = 5, t = 2. \quad (\text{B.35})$$

Dans les calculs à venir, l'expression continue et isotrope a été préférentiellement choisie en prenant comme référence la perméabilité suivant les bras primaires des dendrites, c'est à dire en considérant une distance interdendritique de trois cents micromètres dans les expressions. Un calcul avec l'expression discontinue et anisotrope a toutefois été mené afin de mettre en exergue les différences de résultats dues au traitement de la perméabilité en zone pâteuse. Ce travail a déjà été mené de nombreuses fois, il nous permet toutefois de vérifier la bonne convergence de nos calcul malgré les discontinuités de valeurs sur la perméabilité.

### B.3.2 : Expression des forces électromagnétiques. Conséquences.

Les forces électromagnétiques modifient l'écoulement dans le bain liquide. Ces mouvements liquides ont une forte influence sur les macroségrégations.

L'expression de cette force résultant de l'interaction entre la densité de courant  $\vec{J}$  et le champ magnétique  $\vec{B}$  est la suivante (cf. Moreau [66]) :

$$\vec{F}_m = \vec{J} \times \vec{B} \quad (\text{B.36})$$

On remarquera dans l'équation B.5 (par exemple) de conservation de quantité de mouvement que cette force magnétique est pondérée par la fraction liquide pour constituer un terme source magnétique dans l'équation. La pondération de l'expression par la fraction liquide permet de conserver la même écriture pour l'ensemble du domaine (solide, zone pâteuse et liquide). En tenant compte de la loi d'Ampère :

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \cdot \vec{J} \quad (\text{B.37})$$

où  $\mu_0$  représente la perméabilité magnétique du milieu, on obtient l'expression de la force électromagnétique :

$$\vec{F}_m = \frac{I}{\mu_0} \vec{B} \times (\vec{\nabla} \times \vec{B}) \quad (\text{B.38})$$

*B.3.2.a : Les différentes configurations pour le brassage électromagnétique.*

Pour exprimer analytiquement cette force, il est nécessaire de tenir compte de la géométrie du lingot et de la configuration électromagnétique choisie. La configuration la plus « basique » correspond à l'application d'un champ magnétique glissant alternatif dont le déplacement est parallèle à l'axe vertical. Le cas le plus simple est celui d'un seul écoulement dû à l'application du champ sur le côté gauche (par exemple) du creuset. Le champ magnétique a l'expression suivante :

$$\vec{B}(x, z, t) = B_x \vec{i} + B_z \vec{k} \quad (\text{B.39})$$

avec par exemple la composante  $B_z$  :  $B_z = B_0 e^{-r_r x} \cos(\omega t - k_m z - r_i x)$  (B.40)

avec  $k_m = \frac{\pi}{\lambda_m}$ .  $\lambda_m$  est le pas polaire, (B.41)

$$r_r = \text{Re} \left\{ \left( i \mu_0 \sigma \omega + k^2 \right)^2 \right\} \cong \frac{I}{\delta}, \quad (\text{B.42})$$

$$r_i = \text{Im} \left\{ \left( i \mu_0 \sigma \omega + k^2 \right)^2 \right\}. \quad (\text{B.43})$$

et  $\delta$  est l'épaisseur de peau électromagnétique,  $\omega$  la pulsation du champ magnétique,  $\sigma$  la conductivité électrique.

Le champ magnétique crée une force électromagnétique qui a une composante verticale non nulle et dirigée vers le haut. En utilisant les équations de Maxwell, il est possible de trouver une expression analytique pour la force de Lorentz moyenne. En négligeant les effets d'extrémités, on obtient la force (cf. figure B-6). Pour des facilités de compréhension, la pondération par la fraction liquide est incorporée à l'écriture de la force électromagnétique dans les paragraphes suivants. Le terme source de l'équation de conservation de la quantité de mouvement correspond donc aux écritures que l'on trouvera dans les paragraphes suivants.

$$F_{mz}(x) = f_l F_0 e^{-\frac{2 \cdot \pi}{\delta} x} \quad \text{avec} \quad F_0 = \frac{\sigma \omega}{2 k_m} B_0^2. \quad (\text{B.44})$$

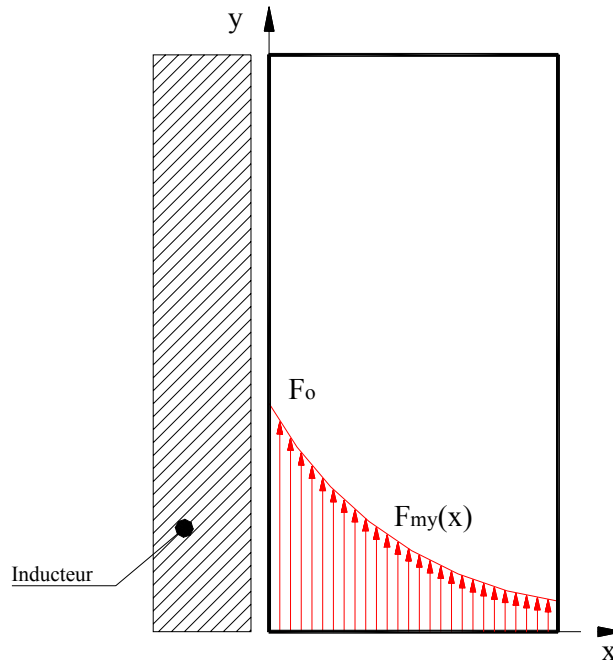


Figure B-6 : La force de Laplace-Lorentz

Cette force crée un écoulement en zone liquide qui se présente sous la forme d'un vortex simple, tournant dans le sens horaire.

Si l'on considère maintenant un deuxième inducteur sur la paroi opposée, et en utilisant le principe de superposition sur les effets des deux champs magnétiques, la force magnétique résultante a l'expression approchée suivante (cf. figure B-7) :

$$F_{my}(x) = F_{my}(x) + F_{my}(\Delta - x) \quad (\text{B.45})$$

où  $\Delta$  est la largeur du creuset.

Pour les calculs numériques menés, les paramètres  $\omega$  et  $\lambda_m / 2$  ont été ajustés pour obtenir une épaisseur de peau égale à  $\Delta$ . Qui plus est, l'amplitude choisie est  $F_0 = 1000 \text{ N.m}^{-3}$  de telle façon que la force électromagnétique soit comparable à la force d'Archimède, conformément aux travaux de Medina [61], [64]. Cette valeur est suffisamment faible pour que le régime d'écoulement engendré reste laminaire (conformément aux hypothèses préalablement posées). Dans la zone pâteuse, cette force agit aussi bien sur le liquide que le solide. Or les équations de conservation de quantité de mouvement sont obtenues après moyennage sur la phase liquide uniquement. La pondération par la fraction liquide de la force électromagnétique permet de le prendre en compte.

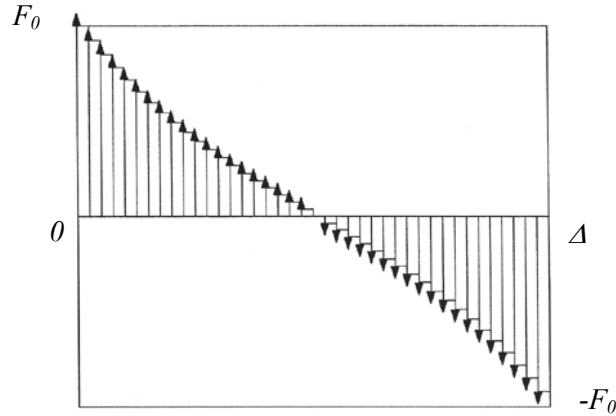


Figure B-7 : Force de Laplace-Lorentz pour une configuration à deux inducteurs.

Une telle expression analytique de la force magnétique conduit, dans la zone liquide, à un écoulement structuré en double vortex verticaux. En jouant sur l'orientation des forces, il est possible de modifier le sens des écoulements. Dans le modèle bidimensionnel considéré, nous nous limiterons aux trois configurations suivantes, avec leurs forces de Lorentz associées (cf. figures B-8 et B-9) :

Convection forcée à double vortex, ascendant au milieu :

$$F_{dv1}(x) = f_l F_0 \left[ e^{-\frac{2x}{\delta}} + e^{-\frac{2(\Delta-x)}{\delta}} \right] \quad (\text{B.46})$$

Convection forcée à double vortex, ascendant sur les côtés :

$$F_{dv2}(x) = -f_l F_0 \left[ e^{-\frac{2x}{\delta}} + e^{-\frac{2(\Delta-x)}{\delta}} \right] = -F_{dv1}(x) \quad (\text{B.47})$$

Convection forcée à simple vortex (sens horaire) :

$$F_{sv}(x) = f_l F_0 e^{-\frac{2x}{\delta}} \quad (\text{B.48})$$

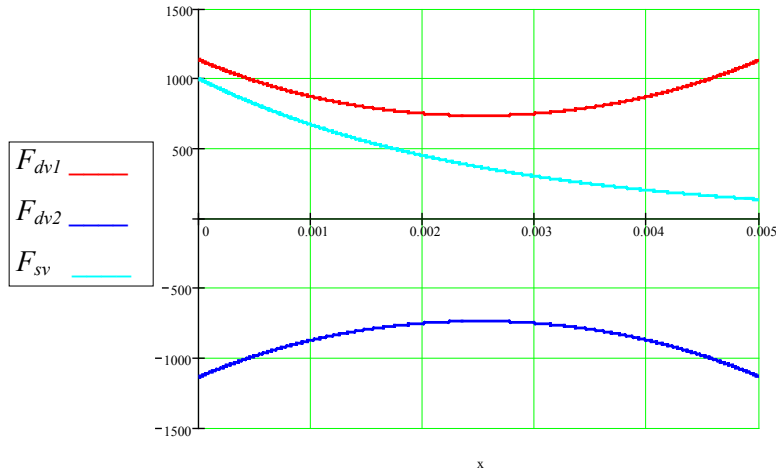


Figure B-8 : Les trois configurations de forces électromagnétiques.

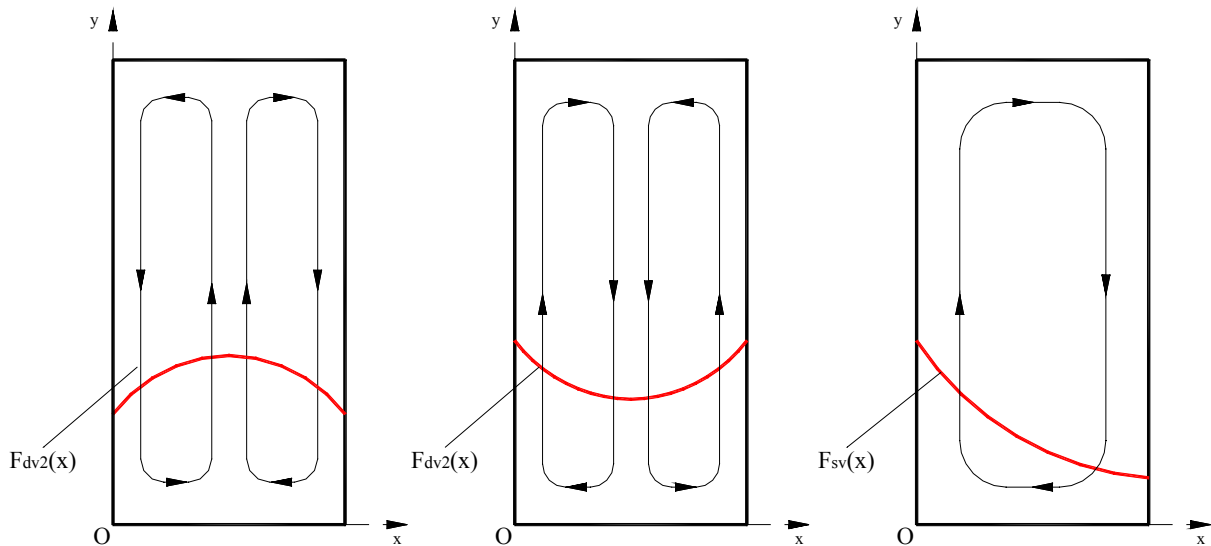


Figure B-9 : De gauche à droite : Ecoulement à double vortex, ascendant au milieu ; Ecoulement à double vortex, ascendant sur les côtés ; Ecoulement à simple vortex (sens horaire).

B.3.2.b : La prise en compte de l'effet Joule est-elle pertinente ?

Chaque inducteur crée un dégagement de chaleur dû à l'effet Joule sur notre échantillon. Si l'on se place dans un cas bidimensionnel à simple inducteur, l'expression analytique de la force de Lorentz correspondante est alors :

$$F_y = f_l F_0 e^{\frac{2x}{\delta}}, \text{ où } \delta = 0,005 \text{ m}, F_0 = 1000 \text{ N.m}^{-3}. \quad (\text{B.49})$$

L'expression de l'équation de conservation de l'énergie devient :

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p u \frac{\partial T}{\partial x} + \rho C_p w \frac{\partial T}{\partial z} = \rho C_p k \Delta T - \rho L \frac{\partial f_l}{\partial t} + P_J, \text{ en } W.m^{-3}. \quad (B.50)$$

Le champ glissant appliqué est de la forme (idéale)  $\mathbf{B} = (B_x, 0, B_z)$  avec en  $x = 0$  :

$$B_x = B_0 e^{i(\omega t - \lambda z)} \text{ où } B_0 \text{ est réel.} \quad (B.51)$$

La densité de courant s'écrit alors  $j = -i\omega\sigma A = -\omega\sigma \frac{B_0}{\lambda} e^{-\lambda x + i(\omega t - \lambda z)}$ . On a ainsi une densité de puissance joule  $P_J$  qui peut s'écrire sous la forme :

$$P_J = \frac{|j|^2}{\sigma} = \sigma \left( \frac{\omega B_0}{\lambda} \right)^2 e^{-2\alpha x} \text{ en } W.m^{-3}. \quad (B.52)$$

$$\text{Si l'on paramètre en } F_0 : B_0^2 = \frac{2\lambda}{\sigma\omega} F_0, \text{ d'où } P_J = \frac{2\omega}{\lambda} F_0 e^{-2\alpha x}. \quad (B.53)$$

#### Ordre de Grandeur. Application Numérique :

Si l'on prend  $f = 400 \text{ Hz}$  et  $\lambda = 200 \text{ m}^{-1}$ , qui sont les valeurs retenues pour le four spatial étudié dans le cadre du projet MICAST, on a un pas polaire  $l_p = \pi/\lambda = 1,57.10^{-2} \text{ m}$  (un peu faible en pratique). Alors, pour  $F_0 = 10^3 \text{ N.m}^{-3}$ ,  $\delta = 1/\alpha = \text{épaisseur de peau} = 5.10^{-3} \text{ m}$ , on a :

$$P_J = 25,13 F_0 e^{-2x/\delta} = 25130 e^{-2x/\delta} \text{ soit } P_{J_{max}} = 25130 \text{ W.m}^{-3}.$$

Un champ double créerait ainsi deux densités de chaleur correspondant aux forces magnétiques respectives. Par exemple, dans le cas de deux inducteurs de part et d'autre du creuset et générant une circulation en double vortex ascendant au milieu, on aurait :

$$P_{J_{divl}}(x) = 25,13 F_0 \left[ e^{-\frac{2x}{\delta}} + e^{-\frac{2(A-x)}{\delta}} \right] \quad (B.54)$$

Cette puissance doit être comparée au dégagement de chaleur latente. Elle reste apparemment plus faible et négligeable à condition que le temps de solidification ne devienne pas trop long (estimation du terme  $\partial f_l / \partial t$ ). Une étude numérique réalisée dans la partie C de cet exposé permettra de vérifier l'absence ou non d'influence de cet effet Joule.

## B.4 : Nombres adimensionnels pertinents pour nos problèmes.

Les nombres sans dimensions pertinents en rapport avec notre modèle sont détaillés dans ce paragraphe. Seules leurs expressions et leurs significations physiques seront présentées ici. Au fur et à mesure de la présentation des différents cas étudiés par la suite, les grandeurs caractéristiques seront précisées (échelle de longueur...), leurs valeurs calculées et commentées.

$$\text{Nombre de Prandtl : } Pr = \frac{\nu}{\alpha} \quad (\text{B.55})$$

où  $\nu$  est la viscosité cinématique dans le liquide,  $\alpha$  la diffusivité thermique. Le nombre de Prandtl quantifie le rapport entre effets de diffusion visqueuse et effets de diffusion thermique. Les métaux liquides sont à faibles nombres de Prandtl, c'est à dire que la diffusion thermique y est prépondérante par rapport à la diffusion de quantité de mouvement par viscosité.

$$\text{Nombre de Reynolds : } Re = \frac{u_c L_c}{\nu} \quad (\text{B.56})$$

où  $L_c$  est une longueur caractéristique de référence (une des dimensions du domaine par exemple), de même que  $u_c$  est une vitesse caractéristique (vitesse dans le bain liquide par exemple). La valeur de ce nombre permet de déterminer la nature laminaire ou turbulente de l'écoulement.

$$\text{Nombre de Peclet : } Pe = \frac{u_c L_c}{\alpha} \quad (\text{B.57})$$

Le nombre de Peclet compare les propriétés advectives et diffusives d'un écoulement. Si  $Pe \ll 2$ , l'écoulement est dominé par la diffusion. Si  $Pe \gg 2$ , alors l'écoulement est dominé par l'advection.

$$\text{Nombre de Schmidt : } Sc = \frac{\nu}{D} \quad (\text{B.58})$$

où  $D$  est la diffusivité chimique de soluté dans le liquide. Ce nombre peut être interprété comme le rapport entre diffusion visqueuse dans l'écoulement et diffusion chimique.

$$\text{Nombre de Lewis : } Le = \frac{Sc}{Pr} = \frac{\alpha}{D} \quad (\text{B.59})$$

Le nombre de Lewis peut être interprété comme le rapport entre échange de soluté par diffusion thermique et échange de soluté par diffusion chimique.

Les nombres de Rayleigh qui suivent (thermique et solutal) sont exprimés en fonction de variations de la masse volumique en lieu et place de variations de température ou de concentration. Partant de l'approximation de Boussinesq sur la masse volumique, on peut écrire :

$$\Delta\rho = \rho_0(\beta_T\Delta T + \beta_C\Delta C) = \rho_0\beta_T\Delta T(1 + N) \quad (\text{B.60})$$

où  $\Delta T$  et  $\Delta C$  sont les variations de température et de concentration sur l'échelle de longueur considérée.  $\beta_T$  est le coefficient d'expansion thermique,  $\beta_C$  le coefficient d'expansion solutale.  $N$  est le nombre de flottaison. Une analyse plus poussée des grandeurs utilisées (différence de température, nombre de flottaison) sera réalisée dans le paragraphe C.1.2.a dans le cadre du cas numérique de référence.

$$\text{Nombre de Rayleigh thermique : } Ra_T = \frac{g\Delta\rho L_c^3}{\rho_0\nu\alpha} \quad (\text{B.61})$$

Il permet de savoir si la convection d'origine thermique s'établit ou non. Le paramètre critique est la différence de température (ou le gradient de température) observé.  $L \sim H$  (hauteur du domaine) dans le cas présent.

$$\text{Nombre de Rayleigh solutal : } Ra_S = \frac{g\Delta\rho L_c^3}{\rho_0\nu D} \quad (\text{B.62})$$

Ce nombre est analogue au nombre de Rayleigh thermique mais il concerne la convection d'origine solutale et le paramètre critique est la différence de concentration.

$$\text{Nombre de Grashof solutal : } Gr_S = \frac{Ra_S}{Sc} \quad (\text{B.63})$$

Ce nombre de Grashof permet de quantifier l'importance de la convection d'origine solutale.

$$\text{Paramètre d'interaction électromagnétique 1 : } M_1 = \frac{F_0}{\rho_0 g \beta_T \Delta T} \quad (\text{B.64})$$



où  $F_0$  est l'amplitude de la force de Laplace-Lorentz,  $\Delta T$  une différence de température. Le nombre sans dimension  $M_1$  quantifie le rapport entre les forces magnétiques de Laplace-Lorentz et les forces d'Archimède d'origine thermique ( $F_{archT} = \rho_0 g \beta_T \Delta T$ ).

$$\text{Paramètre d'interaction électromagnétique 2 : } M_2 = \frac{F_0}{\rho_0 g \beta_S \Delta C} \quad (\text{B.65})$$

Le nombre sans dimension  $M_2$  quantifie le rapport entre les forces magnétiques de Laplace-Lorentz et les forces d'Archimède d'origine solutale.

Ces deux nombres peuvent être regroupés en un seul paramètre d'interaction électromagnétique  $M$  qui quantifie le rapport entre les forces magnétiques de Laplace-Lorentz et les forces d'Archimède, quelles que soient leurs origines.

$$M = \frac{F_0}{g \Delta \rho} \quad (\text{B.66})$$

Les deux nombres adimensionnels qui suivent (paramètre d'interaction électromagnétique n°3 et nombre de Rayleigh pâteux) sont donnés à titre purement indicatif. En effet, certaines des grandeurs entrant en jeu dans leurs définitions sont difficilement évaluables ou quantifiables. C'est le cas essentiellement pour la perméabilité moyenne qui peut présenter une importante variation dans la zone pâteuse.

$$\text{Paramètre d'interaction électromagnétique 3 : } M_3 = \frac{F_0}{\rho_0 \nu_0 \frac{U_{mp}}{K_m}} \quad (\text{B.67})$$

où  $U_{mp}$  et  $K_m$  sont respectivement la vitesse moyenne et la perméabilité moyenne dans la zone pâteuse. Ce nombre sans dimension est le rapport entre l'intensité de la force de Laplace-Lorentz et la force de Darcy. Il permet de mesurer l'importance des forces électromagnétiques dans la zone pâteuse.

$$\text{Nombre de Rayleigh pâteux : } R_{aP} = \frac{\rho_0 \beta_S g \Delta C K_m}{\mu V} \quad (\text{B.68})$$

Ce nombre permet d'avoir une idée de l'importance de la convection solutale dans la zone pâteuse considérée dans son ensemble.

## B.5 : Le modèle en trois dimensions : quelles modifications ?

### B.5.1 : Les nouvelles équations.

Le traitement axisymétrique d'un barreau cylindrique peut sembler douteux au regard de la nature géométrique et de la disposition plus ou moins aléatoire des canaux ségrégués qui apparaissent lors de la solidification. Partant de ce constat, le passage en trois dimensions est indispensable. Il consiste simplement à passer d'un système  $(x, z)$  à un système  $(x, y, z)$  de coordonnées. Les équations ne sont que très peu modifiées lors du passage en trois dimensions.

La gravité reste orientée suivant l'axe  $z$  dans les équations qui suivent.

Equation de conservation de la masse :

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (\text{B.69})$$

Equations de conservation de la quantité de mouvement :

$$\rho_0 \frac{\partial u}{\partial t} + \rho_0 \frac{u}{f_l} \frac{\partial u}{\partial x} + \rho_0 \frac{v}{f_l} \frac{\partial u}{\partial y} + \rho_0 \frac{w}{f_l} \frac{\partial u}{\partial z} = -f_l \frac{\partial p}{\partial x} + \rho_0 \nu_0 \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) - \rho_0 \frac{\nu_0 f_l}{K_x} u + f_l F_{mx} \quad (\text{B.70})$$

$$\rho_0 \frac{\partial v}{\partial t} + \rho_0 \frac{u}{f_l} \frac{\partial v}{\partial x} + \rho_0 \frac{v}{f_l} \frac{\partial v}{\partial y} + \rho_0 \frac{w}{f_l} \frac{\partial v}{\partial z} = -f_l \frac{\partial p}{\partial y} + \rho_0 \nu_0 \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) - \rho_0 \frac{\nu_0 f_l}{K_y} v + f_l F_{my} \quad (\text{B.71})$$

$$\rho_0 \frac{\partial w}{\partial t} + \rho_0 \frac{u}{f_l} \frac{\partial w}{\partial x} + \rho_0 \frac{v}{f_l} \frac{\partial w}{\partial y} + \rho_0 \frac{w}{f_l} \frac{\partial w}{\partial z} = -f_l \frac{\partial p}{\partial z} + \rho_0 \nu_0 \left( \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) - \rho_0 \frac{\nu_0 f_l}{K_z} w - f_l \rho g + f_l F_{mz} \quad (\text{B.72})$$

Equation de conservation de l'énergie :

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} + w \frac{\partial T}{\partial z} = \alpha \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) - \frac{L}{C_p} \frac{\partial f_l}{\partial t} \quad (\text{B.73})$$

Equation de conservation du soluté :

$$\frac{\partial C_m}{\partial t} + u \frac{\partial C_l}{\partial x} + v \frac{\partial C_l}{\partial y} + w \frac{\partial C_l}{\partial z} = D \left( \frac{\partial}{\partial x} \left( f_l \frac{\partial C_l}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( f_l \frac{\partial C_l}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( f_l \frac{\partial C_l}{\partial z} \right) \right) \quad (\text{B.74})$$

Au niveau de l'implantation dans le logiciel, les seules modifications à apporter sont celles concernant les équations de conservation de quantité de mouvement. Toutefois, ce sont les mêmes que celles déjà réalisées dans le cas bidimensionnel, à quelques termes sources près. Les équations auxiliaires (concentration moyenne, fraction liquide, diagramme de phases...) restent les mêmes. La perméabilité dans les termes de Darcy a désormais trois composantes dans le repère principal du tenseur de perméabilité. Dans les calculs menés, la formulation continue et isotrope sera choisie.

### B.5.2 : Expression analytique des forces électromagnétiques correspondantes.

Dans les quelques cas tridimensionnels étudiés, nous nous limiterons à une configuration en barreau cylindrique en convection naturelle ou avec un champ magnétique rotatif.

L'aspect tridimensionnel d'une telle configuration (cf. figure B-10) est conforté par le brassage rotatif lui-même qui est nécessairement associé à des re-circulations méridiennes et à des pompes d'Eckman aux extrémités du barreau : il faut tenir compte des trois composantes du champ de vitesse.

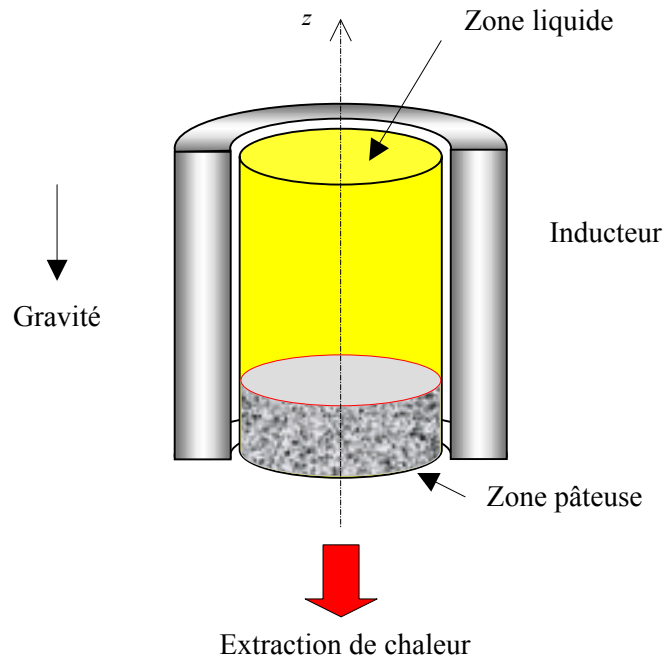


Figure B-10 : Configuration de solidification tridimensionnelle.

Les expressions analytiques pour les forces électromagnétiques dans un tel cas sont en général complexes. Une importante première simplification est de considérer l'inducteur comme infiniment long dans la direction axiale. Dans le barreau cylindrique métallique, la composante motrice de la force de Lorentz est azimutale. Son expression peut être approchée par :

$$F_{\theta}(r) = F_0 \frac{r}{R} \quad (\text{B.75})$$

où  $R$  est le rayon du barreau cylindrique et  $\theta$  l'angle azimutal dans un système de coordonnées cylindriques. En projetant cette expression sur les axes  $x$  et  $y$  de notre repère, on obtient deux termes sources magnétiques, un pour chaque équation de conservation de quantité de mouvement concernée. Dans le cas d'un inducteur infiniment long, la composante radiale de la force est compensée par le gradient de pression. Au contraire, dans le cas d'un inducteur de longueur finie, la composante radiale possède une dépendance en  $z$  et peut générer des re-circulations méridiennes qui se superposent à la rotation. Ceci dit, on peut affirmer que dans le premier cas, les re-circulations méridiennes sont minimisées et que l'écoulement rotatif est dominant. Nous nous limiterons à ce cas et à ces approximations.

## **B.6 : Conclusion partielle.**

Ce chapitre a permis de présenter les équations de base du modèle de solidification qui sera employé par la suite. Ces équations ont été réécrites afin de les adapter à la structure propre du logiciel de résolution utilisé (FLUENT 6), tant pour les configurations bidimensionnelles que tridimensionnelles. Cette réécriture et cette programmation ont nécessité un long et méticuleux travail jusqu'à obtenir un algorithme stable et des résultats physiques cohérents. Les différents nombres adimensionnels utiles à la description et l'analyse des cas traités ont été explicités ici, tant dans leurs définitions mathématiques que dans leurs significations physiques. L'ensemble des paramètres concernant les différentes études que nous souhaitons mener ont été définis : brassage électromagnétique dans différentes configurations 2D, pertinence de la prise en compte de l'effet Joule créé par les inducteurs, brassage rotatif dans un barreau cylindrique... Certains paramètres ont d'ailleurs été choisis arbitrairement. La pertinence de certains choix pourrait effectivement se poser. Toutefois, l'étude de ces paramètres n'entre pas dans le cadre de ce travail. Il est important de remarquer qu'en l'état actuel du code, les problèmes liés à la température et à la concentration eutectique ne sont pas pris en compte et ne sont pas implantés. Cela nous empêche de réaliser des solidifications complètes.

Les résultats numériques découlant de ce modèle et de ces approximations feront l'objet du chapitre suivant.



## Partie C

# De la validation partielle du modèle à son exploitation : résultats numériques

Les études numériques ici présentées se déroulent en trois phases. Une première, sur un cas type bidimensionnel prédéfini, sert de validation partielle à l'implantation du modèle FHP dans FLUENT. Cette première phase ne concerne que la convection naturelle. Elle permet également de s'interroger sur la sensibilité des résultats à différents paramètres : ordre du schéma de calcul, taille de maillage, perméabilité... Cette validation partielle se fait par comparaison avec des ordres de grandeur théoriques ainsi que par confrontation avec certains résultats d'autres codes numériques. La deuxième phase, quant à elle, consiste à étudier l'influence de la convection forcée sur la solidification. Différentes configurations de brassage seront mises en avant afin de corréliser forme de l'écoulement et position des ségrégations. La troisième phase, pour finir, est une étude tridimensionnelle sur un barreau cylindrique, tant en convection naturelle qu'en convection forcée avec un brassage rotatif. Cette étude a été réalisée dans le cadre du projet européen MICAST. Elle permet de comparer entre eux les divers modes de convection forcée.

L'ensemble des simulations de ce chapitre est réalisé sur un alliage *PbSn 10 %* en masse (cf. annexe A pour les données thermophysiques).

## C.1 : Validation à partir d'un cas 2D.

### C.1.1 : Description du cas type.

La configuration du cas type correspond aux différents choix effectués dans des études numériques précédentes (cf. Medina [61], [62], [63] et [64]), ceci afin d'avoir une base de comparaison autre que la cohérence physique des résultats obtenus. Le cas type est décrit dans les paragraphes suivants :

#### C.1.1.a : Géométrie du cas type.

Le domaine se présente sous la forme d'un lingot rectangulaire de largeur *5 mm* et de hauteur *10 mm*.

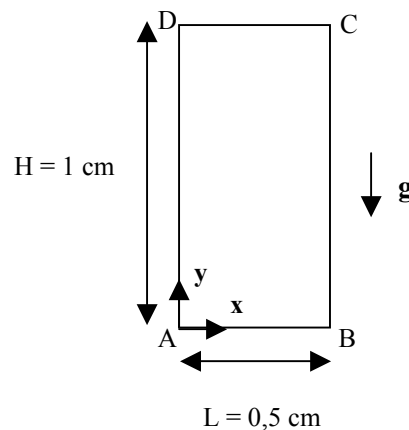


Figure C-1 : Géométrie du cas type.

C.1.1.b : Conditions initiales (cf. figure C-2).

On fixera, invariablement, les conditions initiales suivantes à l'alliage métallique contenu dans le domaine décrit précédemment :

Température initiale : La répartition de température initiale suit une loi linéaire fonction de la hauteur.

$$T(x, z) = T_0 + GTU.z = T_L(C_0) + GTU.z \quad (C.1)$$

$T_0$  est une température de référence que l'on prendra égale à la température de liquidus de l'alliage à la composition  $C_0$  considérée (i.e.  $T_L(C_0)$ ).

Composition initiale : On applique initialement une composition fixée à  $C_0$  additionnée d'une légère perturbation inhomogène. Cette répartition de composition, de par l'approximation de Boussinesq sur la densité dans le terme de pesanteur, permet à la convection naturelle de s'initier même lorsque la répartition de température est stabilisante (cas de Pb-Sn 10 % pds dans la configuration envisagée).

$$C(x, z) = C_0 \pm 0.0005C_0 \quad (C.2)$$

D'autres auteurs font le choix d'une composition homogène et d'une gravité inclinée d'un léger angle  $\alpha$  par rapport à la verticale, et ceci pour les mêmes raisons que celles citées précédemment.

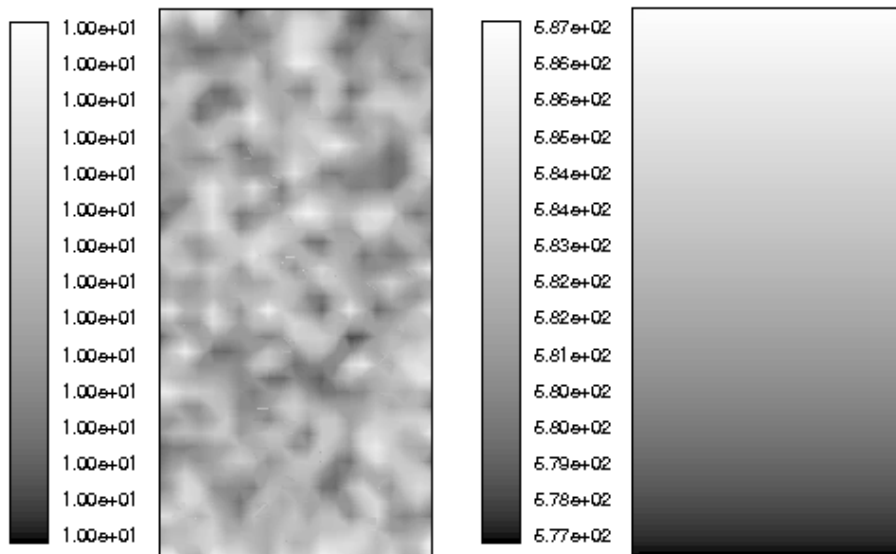


Figure C-2 : Alliage Pb-Sn 10 % en masse. Cartes de concentration nominale et température.

$$GTU = 1000 \text{ Km}^{-1}. \text{TBOT} = 577,4 \text{ K}. C_0 = 10 \%$$



Vitesses initiales : Les vitesses (composantes  $u$  et  $w$ ) sont nulles sur l'ensemble du domaine.  $u = w = 0$  (liquide au repos).

Fraction liquide initiale : La température initiale minimum du domaine étant la température de fusion, la fraction liquide est initialement fixée à 1.

Remarques : Les différentes études menées montrent que, même si elle est à l'origine des mouvements convectifs de liquide (convection solutale), la répartition aléatoire initiale de soluté n'influe pas sur les résultats obtenus pour les études bidimensionnelles.

*C.1.1.c : Conditions aux limites (cf. figure C-3).*

(i) Les vitesses sont nulles sur les parois :

$$(u)_{AB} = (u)_{BC} = (u)_{CD} = (u)_{DA} = 0 \quad (C.3)$$

$$(w)_{AB} = (w)_{BC} = (w)_{CD} = (w)_{DA} = 0 \quad (C.4)$$

(i) Les parois verticales sont adiabatiques :

$$\left(\frac{\partial T}{\partial n}\right)_{BC} = \left(\frac{\partial T}{\partial n}\right)_{DA} = 0 \quad (C.5)$$

(ii) Sur la paroi inférieure, on applique un refroidissement lent ( $V_r = 1K$  par minute) qui prend la forme suivante :

$$T(t) = T_L(C_0) - V_r \frac{t}{60} \quad \text{où } T \text{ est la température en Kelvin et } t \text{ le temps en secondes.} \quad (C.6)$$

Remarque : Un refroidissement lent, parce qu'il permet à la convection naturelle de pleinement jouer sur la zone pâteuse et l'écoulement, favorise l'apparition de canaux ségrévés, objets de nos études.

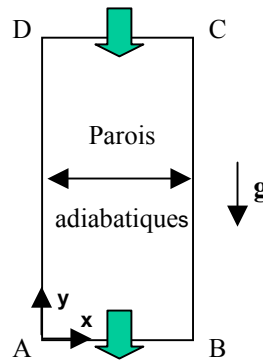
(iii) Sur la paroi supérieure, on applique un gradient entrant de température de  $1000K.m^{-1}$  :

$$\left(\frac{\partial T}{\partial n}\right)_{CD} = 1000 \text{ K.m}^{-1}, \text{ ce qui correspond à un flux entrant } \dot{Q}_{entrant} = 1000 \cdot \lambda Wm^{-2}. \quad (C.7)$$

(iv) Pas de transfert de soluté au niveau des parois :

$$\left(\frac{\partial C}{\partial n}\right)_{AB} = \left(\frac{\partial C}{\partial n}\right)_{BC} = \left(\frac{\partial C}{\partial n}\right)_{CD} = \left(\frac{\partial C}{\partial n}\right)_{DA} = 0 \quad (\text{C.8})$$

Gradient entrant de température



Température imposée décroissante

Figure C-3 : Conditions aux limites.

Remarque : Il est possible, à partir d'un tel refroidissement, d'estimer l'ordre de grandeur de la durée de solidification de notre domaine. En effet, pour l'alliage choisi et en considérant des conditions réversibles, la solidification débute lorsque la température devient égale à la température de liquidus (i.e. 576.74 K) avec une concentration solide initiale de  $k.C_0 = 3.10 \%$  pour s'achever lorsque la température devient égale à la température de solidus de l'alliage (i.e. 525 K) avec une concentration de 32.26 % pour le liquide final. Toutefois, de par les ségrégations, certaines zones du domaine ne verront leur solidification achevée que lorsque la température deviendra égale à la température eutectique (i.e. 456 K). Ainsi, il est possible de considérer la solidification achevée lorsque la paroi supérieure de notre domaine atteint une température égale ou inférieure à la température eutectique. Le temps total de solidification serait alors approximativement de 130 minutes maximum. Toutefois, l'équation gérant la solidification des zones eutectiques n'ayant pas été implanté dans le logiciel de résolution, on se contentera essentiellement de résultats à 20 minutes de solidification afin d'établir les comparaisons nécessaires à la validation du module d'équations traitées.

### C.1.2 : Nombres adimensionnels appliqués au cas type.

D'après les définitions présentées dans la partie B de cet exposé, les nombres adimensionnels pertinents pour le cas type sont les suivants :

Nombre de Prandtl	$Pr = 0,015$
Nombre de Lewis	$Le = 5667$
Nombre de Schmidt	$Sc = 82$

L'échange diffusif de chaleur est bien supérieur à l'échange convectif. Il en résulte que les isothermes doivent rester linéaires au fur et à mesure de la solidification. La diffusion thermique est beaucoup plus grande que la diffusion chimique. Le phénomène de refusion est alors l'unique moyen de respecter l'équilibre thermodynamique correspondant à la température locale dans les canaux ségrégués enrichis en soluté.

Physiquement, on a deux échelles de longueur à prendre en considération. La première correspond typiquement à la hauteur du domaine que l'on pourrait qualifier de macro-échelle. La seconde correspond à une adaptation locale des nombres sans dimension à la zone pâteuse où l'échelle de longueur à prendre en considération peut être par exemple l'espacement interdendritique.

Remarque : Le système étudié est thermiquement stable mais solutalement déstabilisant au regard de la distribution de soluté dans la zone pâteuse. Dans ce cas de référence, le liquide est simplement soumis aux effets gravitaires qui agissent sur les différences de densité. Suivant Prescott et Incropera [75], nous pouvons définir une différence de densité caractéristique  $\Delta\rho$  comme fonction des variations  $\Delta T$  de température et des variations  $\Delta C$  de concentration solutale. Ces variations de concentration (en zone pâteuse) sont directement reliées au gradient de température appliqué au domaine. Or le profil de température est quasiment linéaire à cause de la prédominance de la diffusion thermique. Ainsi, on peut simplement estimer les différences de température par :

$$\Delta T = G.L \quad (C.9)$$

où  $L$  est une échelle de longueur caractéristique, la dimension de la zone liquide ou encore celle de la zone pâteuse.  $G$  est le gradient appliqué aux extrémités du domaine.

Dans l'analyse présentée, il n'y a pas forcément de zone totalement solide, même dans la partie la plus basse du creuset. Nous considérerons alors un instant où la zone pâteuse occupe la moitié du domaine. Ainsi nous pouvons utiliser la même échelle de longueur tant pour la zone pâteuse que pour la zone liquide. La variation de température correspondante est alors de  $5\text{ K}$ . Les variations de concentration sont directement reliées à ces variations de température de par le diagramme de phases.

$$\Delta C = \frac{\Delta T}{m} = 2,15\% \quad \text{en zone pâteuse.} \quad (C.10)$$

où  $m$  est la pente du liquidus. Les variations de composition sont transportées par l'écoulement du fluide, tant dans la zone liquide que pâteuse. Une estimation des variations de densité peut alors être écrite comme suit :

$$\Delta\rho = \rho_0\beta_T\Delta T\left(1 + \frac{\beta_c\Delta C}{\beta_T\Delta T}\right) = \rho_0\beta_T\Delta T(I + N) \quad (C.11)$$

où  $N$  est le nombre de flottaison défini par :

$$N = \frac{\beta_c\Delta C}{\beta_T\Delta T} = \left(\frac{\beta_c}{m\beta_T}\right)_{\text{Zone pâteuse}} = 18,5 \text{ au regard des grandeurs données en Annexe A.}$$

Une telle valeur indique que les variations de composition solutale sont principalement responsables des variations de densité. La convection d'origine solutale est donc bien prédominante. Ces estimations sont valables essentiellement dans la zone pâteuse. De plus, nous avons, compte tenu des données numériques pour un alliage Plomb-Etain :

$$\frac{\Delta\rho}{\rho_0} = 0,0118 \quad (C.12)$$

Cette valeur nous permet de calculer les différents nombres de Rayleigh et le nombre de Grashof solutal.

Nombre de Rayleigh thermique	$Ra_T = 3446$
Nombre de Rayleigh solutal	$Ra_S = 1,95.10^7$
Nombre de Grashof solutal	$Gr_S = 237805$

La convection d'origine solutale est prédominante sur la convection d'origine thermique. La valeur du nombre de Grashof, quant à elle, traduit le fait que le régime de convection dans la zone liquide est laminaire. Cette conclusion est conforme aux travaux expérimentaux d'Hellawell [53].

Si l'on considère comme échelle de référence l'espace interdendritique (i.e.  $300 \mu m$ ), les nombres de Rayleigh et le nombre de Grashof sont modifiés. En effet, la différence de température caractéristique et la différence de composition caractéristique deviennent :

$$\Delta T = G.d_l = 3.10^{-3} K \quad (C.13)$$

$$\Delta C = \frac{\Delta T}{m} = 1,3.10^{-3} \% \quad (\text{C.14})$$

Soit une variation relative de densité de :  $\frac{\Delta \rho}{\rho_0} = 7,02.10^{-6}$  conformément à l'expression analytique (C.11). Les nombres de Rayleigh prennent alors pour valeurs :

Nombre de Rayleigh thermique :  $R_{aT} = 4,43.10^{-4}$  (convection thermique).

Nombre de Rayleigh solutal :  $R_{aS} = 2,51$  (dans la zone pâteuse).

Ainsi, il apparaît que la convection solutale reste importante comparée à la convection d'origine thermique dans les éventuelles poches liquides qui pourraient se trouver dans la zone pâteuse. Le rapport entre nombre de Rayleigh solutal et nombre de Rayleigh thermique s'établit à 5668.

Toutefois, si l'on voulait avoir une idée de l'importance de la convection solutale dans la zone pâteuse (pris dans son ensemble), il nous faudrait considérer le nombre de Rayleigh  $R_{aP}$  défini par Worster [93] (avec toutes les difficultés qu'implique la définition de certains des paramètres entrant en jeu dans l'expression analytique du nombre de Rayleigh pâteux). Soit, à titre indicatif :

$$R_{aP} = \frac{\rho_0 \beta_S g \Delta C K_m}{\mu V} \quad (\text{C.15})$$

où  $K_m$  désigne la perméabilité moyenne (dépendant donc de la fraction liquide),  $\mu$  la viscosité dynamique et  $V$  la vitesse de solidification. Ici, pour une fraction liquide de 0,4 par exemple, le nombre de Rayleigh pâteux a pour ordre de grandeur :

$$R_{aP} = 3,6 \text{ avec } V = 10^{-2} \text{ mm.s}^{-1} \text{ et } K_m = 8.10^{-11} \text{ m}^2. \quad (\text{C.16})$$

Pour Worster, les instabilités se produisent lorsque  $R_{aP} \geq 10$ . Or ce cas de figure se présente lorsque la fraction liquide devient supérieure à 0,5. Lorsque cela est le cas, l'écoulement dans la zone pâteuse est dû à la convection solutale. Dans le cas contraire, l'écoulement dans la zone pâteuse est dû soit au brassage électromagnétique dans la zone liquide (s'il est présent), soit au drainage engendré par les canaux qui fixe l'écoulement en zone liquide.

### C.1.3 : Les résultats en convection naturelle.

#### C.1.3.a : Les résultats de référence.

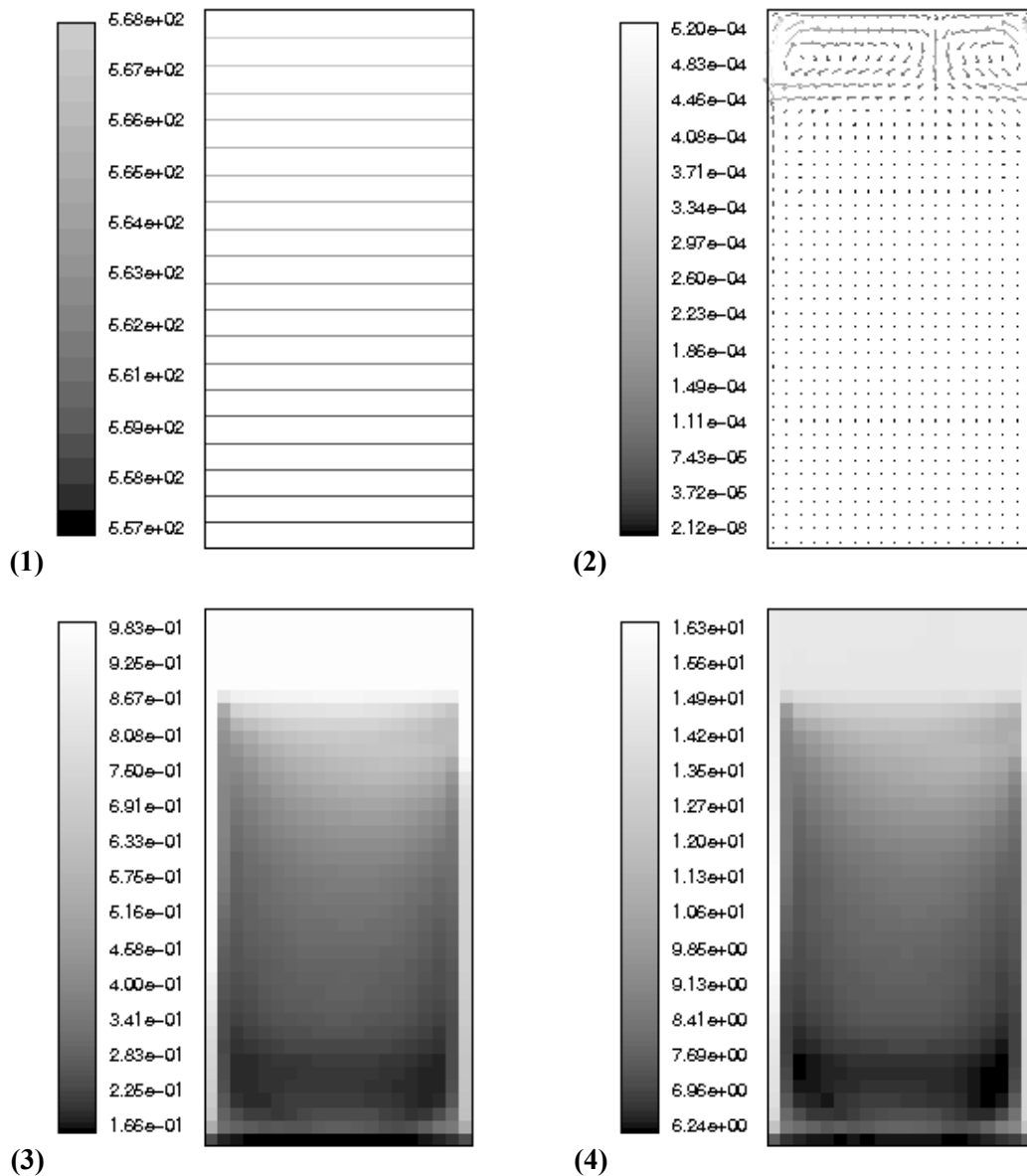
Le premier cas présenté, et qui servira de point de comparaison pour les résultats ultérieurs, correspond à un cas de convection naturelle avec une perméabilité isotrope et continue. La convection solutale est initialement déclenchée par la répartition aléatoire de soluté. La convection thermique est absente de par la stratification thermique stabilisante rencontrée.

<i>Désignation :</i>	<i>PbSn Convection Naturelle.</i>
<i>Maillage :</i>	<i>20 x 40.</i>
<i>Pas de temps :</i>	<i>0,03 seconde.</i>
<i>Schéma temporel :</i>	<i>1<sup>er</sup> ordre.</i>
<i>Correction de pression</i>	<i>PRESTO.</i>
<i>Couplage Pression-Vitesse :</i>	<i>SIMPLE C.</i>
<i>Schémas spatiaux :</i>	<i>2<sup>ème</sup> ordre décentré amont.</i>
<i>Durée de simulation :</i>	<i>20 minutes.</i>
<i>Perméabilité :</i>	<i>Isotrope continue.</i>
<i>Conditions particulières :</i>	<i>Non.</i>

Les résultats qui vont suivre correspondent à un maillage  $20 \times 40$  (*largeur x hauteur*) ainsi qu'à un schéma numérique volumes finis décentré amont du deuxième ordre pour les équations de conservation de la quantité de mouvement, de conservation de l'énergie et de conservation du soluté. Les équations auxiliaires sont résolues par un schéma du premier ordre.

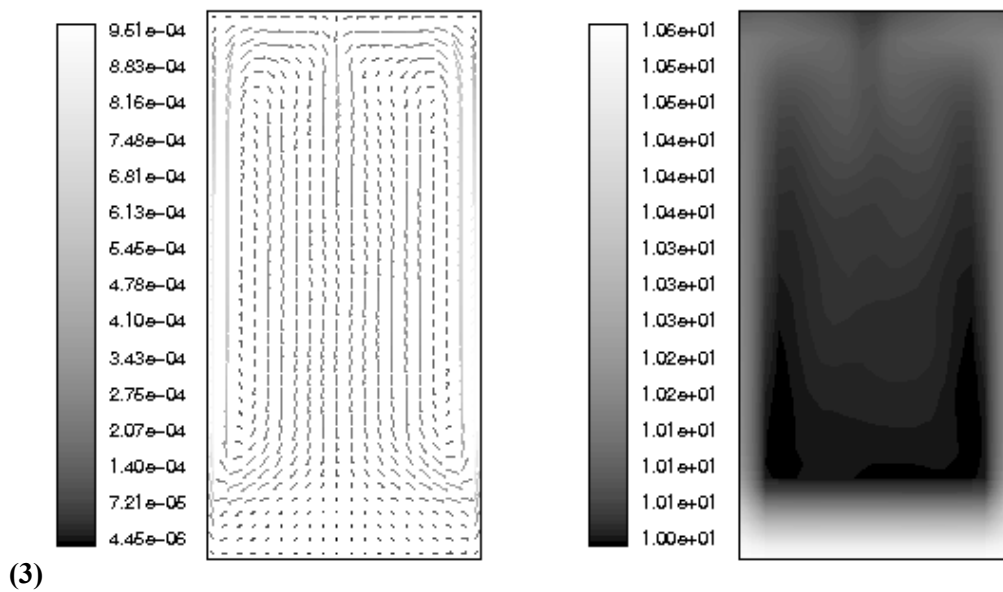
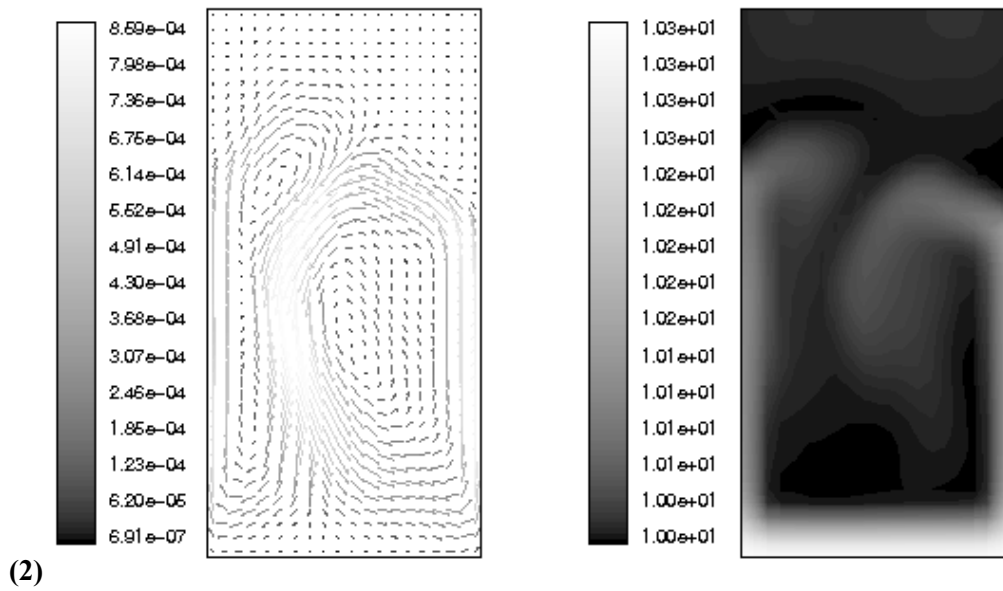
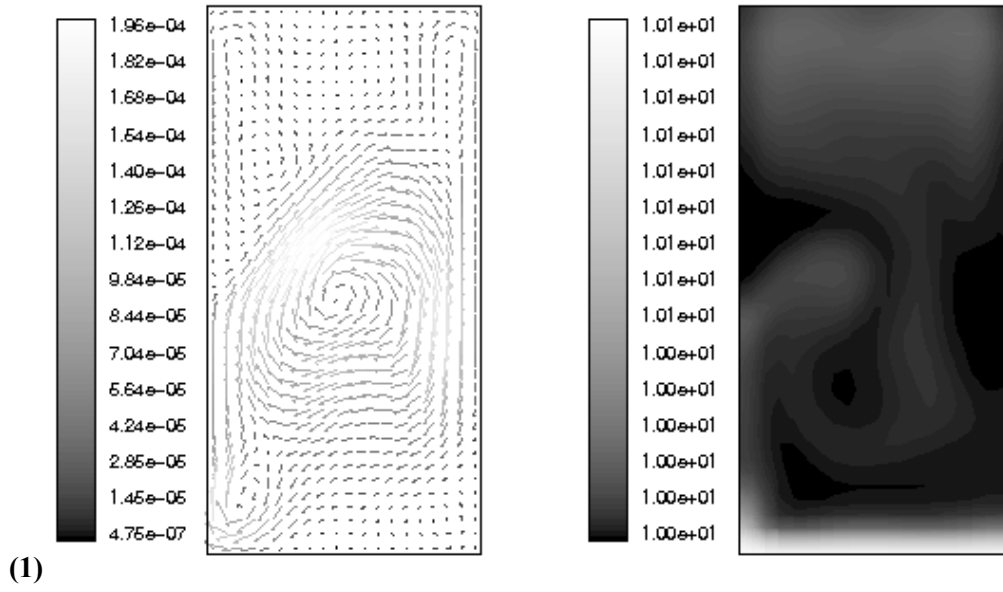
Dans tous les cas qui seront présentés, la correction de pression est assurée par un schéma de type PRESTO et le couplage pression-vitesse par un algorithme de calcul SIMPLE C. Le schéma temporel sera toujours du premier ordre. Un tableau récapitulatif des conditions de calcul sera présenté pour chaque cas.

Durant les premières secondes de solidification, le front progresse de manière plane. La convection s'amorce de par la répartition aléatoire initiale de soluté. Celle-ci s'amplifie au fur et à mesure à partir du rejet de soluté dans la zone pâteuse. Le soluté étant plus léger, il est soumis à des mouvements ascendants qui déstabilisent le front de solidification entre autre par le phénomène de refusion précédemment décrit. Les mouvements convectifs deviennent de plus en plus intenses de par l'enrichissement en soluté du liquide et de par l'augmentation des gradients de concentration dus à l'apparition de ségrégations.



**Figure C-4:** A  $t = 1200$  s, (1) Carte de température [ $T_{min} = 557,4$  K ;  $T_{max} = 567,8$  K] ;  
 (2) Champ de vitesses [ $V_{max} = 0,53$  mm.s<sup>-1</sup>] ;  
 (3) Carte de fraction liquide [ $f_{l\ min} = 0,17$  ;  $f_{l\ max} = 1$ ] ;  
 (4) Carte de concentration moyenne [ $C_{m\ min} = 6,24$  % ;  $C_{m\ max} = 16,55$  %].

Les panaches de soluté prennent de plus en plus d'importance, accentuant les ségrégations et favorisant le développement d'éventuelles poches liquides dans la zone pâteuse. La vitesse maximale atteinte en zone liquide au cours d'un calcul est d'environ 2 mm.s<sup>-1</sup>. Cela nous donne un nombre de Reynolds maximum de l'ordre de 80. L'écoulement reste donc dans un régime laminaire. Après vingt minutes de refroidissement, les résultats sont montrés figure C-4. On peut aisément y vérifier que, conformément à l'analyse adimensionnelle, les isothermes sont pratiquement des droites progressant du bas vers le haut. Ce résultat est cohérent avec la faible valeur du nombre de Prandtl.





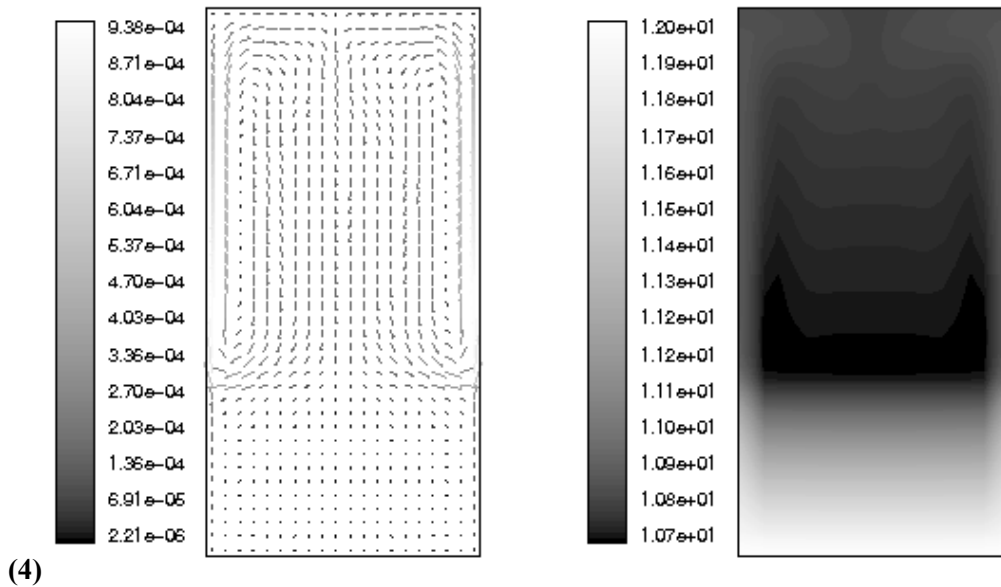


Figure C-5 : Evolution du champ de vitesse et du champ de concentration liquide au cours du temps.

- (1)  $t = 30 \text{ s}$ , [ $V_{max} = 0,200 \text{ mm.s}^{-1}$ ], [ $C_{l \min} = 10 \%$ ;  $C_{l \max} = 10,14 \%$ ];  
 (2)  $t = 60 \text{ s}$ , [ $V_{max} = 0,876 \text{ mm.s}^{-1}$ ], [ $C_{l \min} = 10,01 \%$ ;  $C_{l \max} = 10,35 \%$ ];  
 (3)  $t = 90 \text{ s}$ , [ $V_{max} = 0,970 \text{ mm.s}^{-1}$ ], [ $C_{l \min} = 10,03 \%$ ;  $C_{l \max} = 10,57 \%$ ];  
 (4)  $t = 300 \text{ s}$ , [ $V_{max} = 0,957 \text{ mm.s}^{-1}$ ], [ $C_{l \min} = 10,66 \%$ ;  $C_{l \max} = 12,07 \%$ ].

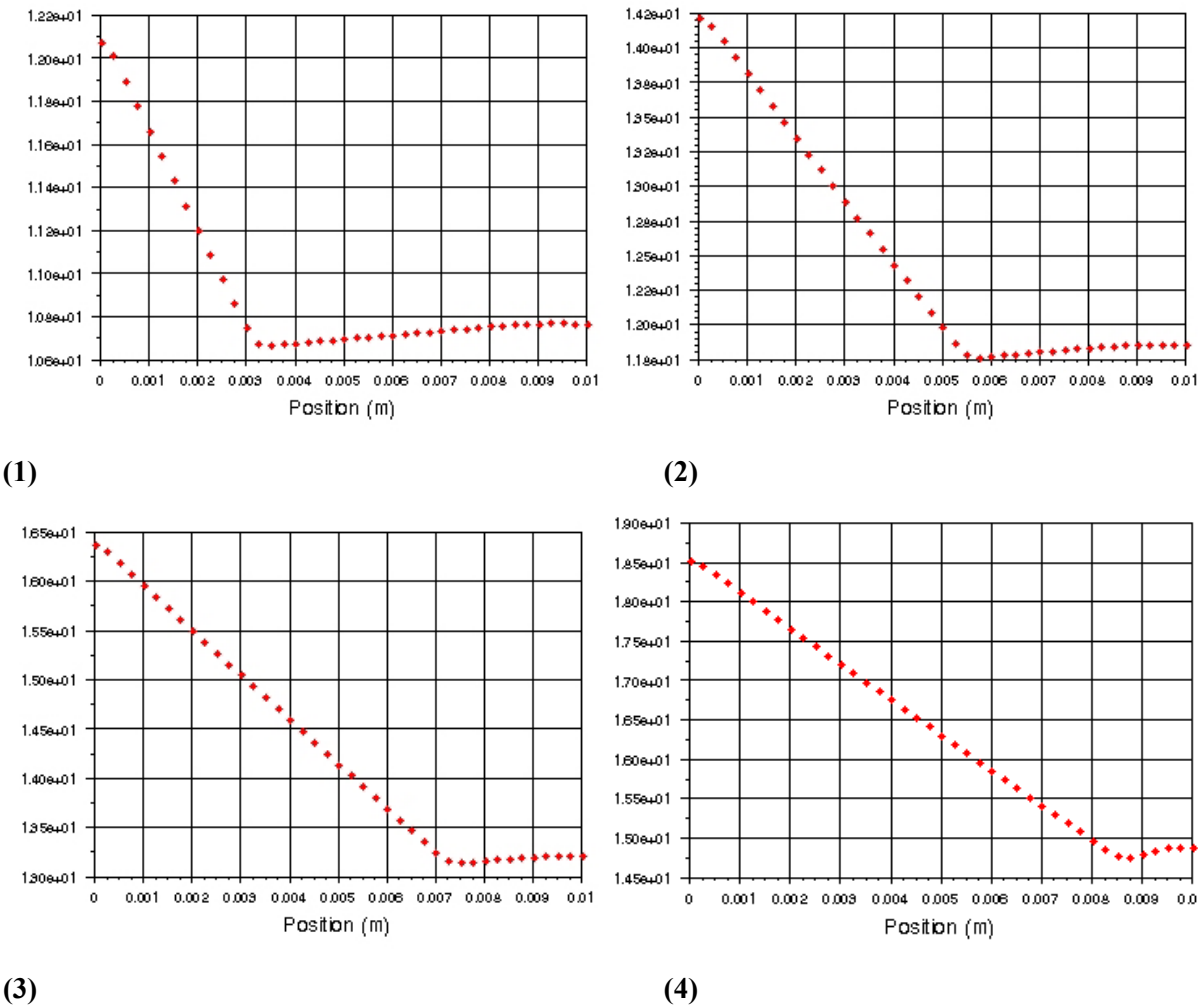
On distingue également une prédominance de canaux le long des parois verticales. Ce genre de situation a été observé expérimentalement dans des alliages de nickel par Dabo [18] et Giamei [44]. Cette accumulation de soluté s'explique de par la limitation voire l'absence de transport latéral à proximité des parois. Ces zones à plus forte concentration en soluté sont tout aussi visibles sur les cartes de fraction liquide, l'enrichissement créant des zones à température de fusion plus basse (cf. diagramme de phases) et donc à fraction liquide plus élevée voire égale à 1. L'évacuation de soluté vers le bain liquide (le soluté est plus léger) est rendue plus difficile et ne peut se faire que de manière verticale. La formation de canaux latéraux peut toutefois être évitée si l'on considère de grandes vitesses de solidification : l'accumulation de liquide enrichi n'a alors plus le temps de s'établir d'après Felicelli [26]. On assiste au fur et à mesure de la formation des canaux latéraux, à l'apparition de deux courants ascendants, eux-mêmes le long des parois. Ces deux courants entraînent le liquide libre sous la forme de deux vortex. L'écoulement dans le bain liquide est ainsi dicté par les canaux ségrégués (cf. figure C-5). Le module maximum de vitesse se trouve au sortir des canaux. On distingue aisément les panaches (ou plumes) de soluté dus au rejet de soluté et aux courants ascendants des canaux ségrégués latéraux.

A terme, la partie supérieure aura une concentration supérieure à la concentration initiale, la partie inférieure une concentration inférieure (hors mésoségrégations). C'est la macroségrégation dite « normale », familière aux fondeurs. Après vingt minutes de simulation, la concentration moyenne

dans le bain liquide s'établit à environ 15 % pour une concentration nominale de départ de 10 %. La concentration moyenne minimale, quant à elle, est de 6,24 %.

Même si le champ de vitesse est quasi-stationnaire durant la plus grande partie du processus de solidification, des fluctuations à petite échelle peuvent apparaître sous la forme de petits vortex éphémères (essentiellement dans les premières minutes) ou de prédominance temporaire de l'écoulement d'un canal ségrégé sur l'autre (essentiellement lorsque le domaine est au trois quart pâteux). Cf. figure C-5.

Si l'on trace des profils verticaux de concentration liquide, il est aisé de repérer la position du macrofront qui correspond à une forte rupture de pente entre la zone pâteuse, où la concentration liquide est liée à la température, et la zone liquide, où celle-ci se confond avec la concentration moyenne.



**Figure C-6 :** Profils verticaux de concentration liquide au cours de la solidification.  
 (1)  $t = 5$  mn, (2)  $t = 10$  mn, (3)  $t = 15$  mn, (4)  $t = 20$  mn.

Ces profils permettent également de mettre en avant l'enrichissement en soluté du liquide libre (cf. figure C-6).

Si l'on trace la position du front de solidification, celle-ci suit une loi en  $t^{1/2}$  sauf pour les premières couches, et que les fondeurs nomment « règle de Chvorinov » (cf. figure C-7). Ceci est lié au régime thermique fortement diffusif.

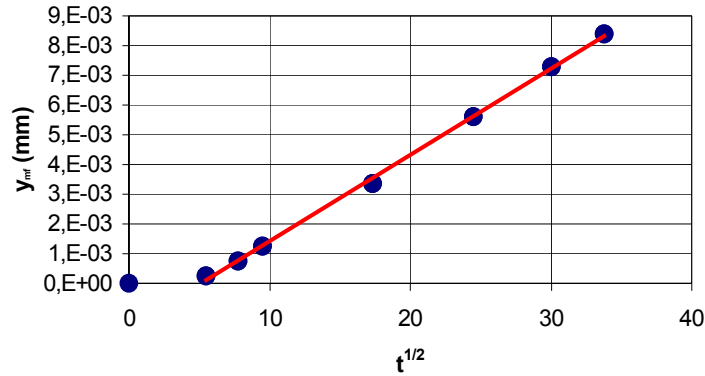


Figure C-7 : Position du macrofront (en millimètres) en fonction de la racine du temps.

En ce qui concerne la température, en plus d'avoir des isothermes horizontales, elle reste presque linéaire le long de la verticale tout au long de la solidification (cf. figure C-8-gauche). Ceci est dû à la prépondérance de la diffusion thermique sur la convection ainsi qu'à un faible rejet de chaleur latente (la vitesse de solidification est relativement lente). En réalité, le profil vertical de température connaît une légère incurvation qui est visible lorsque l'on représente le gradient vertical de température en fonction de la hauteur (cf. figure C-8-droite). Pour rappel, le gradient initial était de  $1000 K.m^{-1}$ .

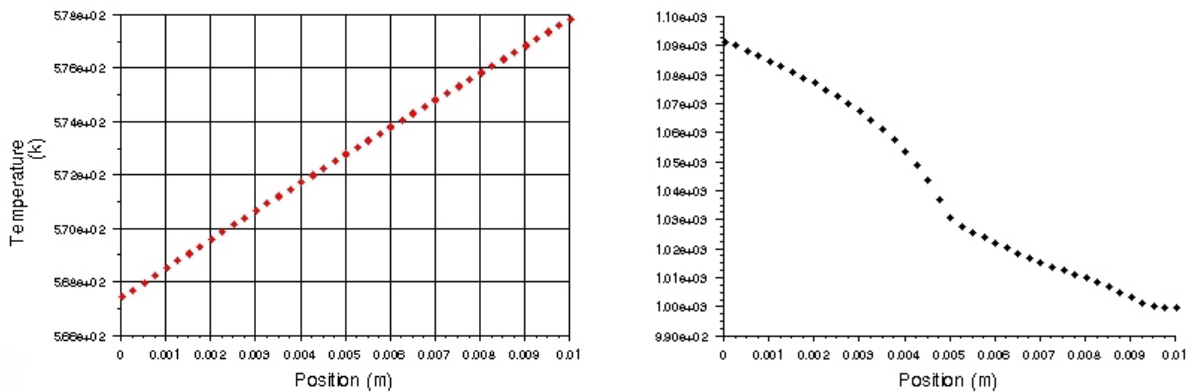


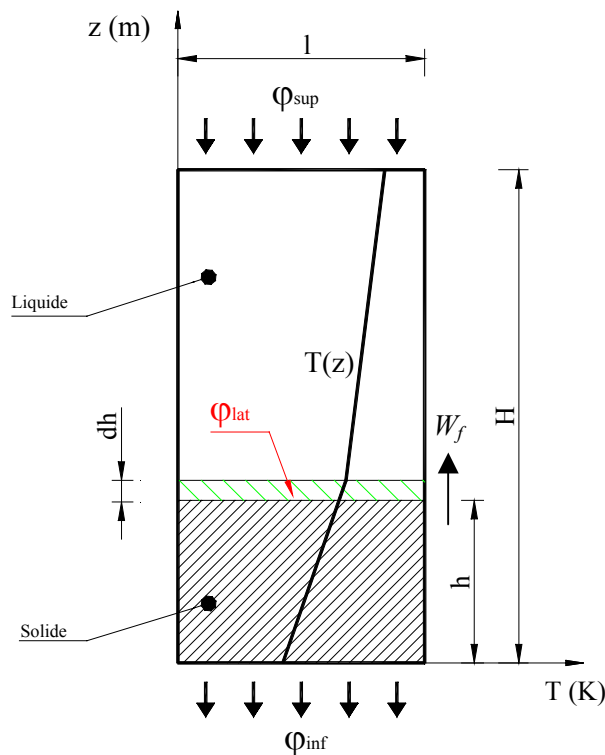
Figure C-8 : (Gauche) Profil vertical de température ;  
(Droite) Gradient vertical de température en fonction de la hauteur (de  $1090 K.m^{-1}$  à  $1000 K.m^{-1}$ ).

On observe ainsi une augmentation du gradient par rapport à sa valeur initiale vers la partie basse du lingot (qui s'explique par la présence de la paroi froide), un saut de gradient vers le milieu du lingot qui correspond au passage du macrofront, zone où le rejet de chaleur latente se fait sentir.

Considérations sur les densités de flux de chaleur en jeu : Au niveau de la paroi inférieure, la densité de flux extrait s'établit à une valeur de  $26690 \text{ W.m}^{-2}$  de manière quasi-constante tout au long du calcul. La densité de flux supérieur est, quant à elle imposée à  $24650 \text{ W.m}^{-2}$ . La différence s'établit à environ  $2000 \text{ W.m}^{-2}$  et est due au rejet de chaleur latente. On peut théoriquement estimer les différents flux dans un cas simple afin de vérifier la cohérence des résultats numériques obtenus. Si l'on se place au niveau du domaine, le nombre de Peclet correspondant est :

$$Pe_h = \frac{u_l \cdot H}{\alpha} = 0,59, \text{ avec une vitesse caractéristique de } 1 \text{ mm.s}^{-1}. \quad (\text{C.17})$$

Nous avons confirmation que le régime thermique est diffusif. Nous nous placerons donc dans le cas d'une solidification front plan, pour un corps pur et en régime purement diffusif.



**Figure C-9 :** Avancement d'un front de solidification plan pour un corps pur, dans un régime purement diffusif.

Le front se déplace avec une vitesse  $W_f$  (cf. figure C-9). En se plaçant dans un régime purement diffusif et stationnaire, nous pouvons écrire la conservation des densités de flux de chaleur à

l'interface liquide-solide. L'hypothèse du régime stationnaire n'est pas très loin de la réalité car la décroissance de la température imposée sur la frontière basse du lingot est très lente. Le régime thermique étant presque établi, nous avons :

$$\varphi_{inf} = \varphi_{sup} + \varphi_{lat} \quad (C.18)$$

où  $\varphi_{sup}$  est la densité de flux de chaleur par diffusion qui entre par la partie supérieure du lingot et qui reste constante jusqu'à la rencontre de l'interface solide-liquide.  $\varphi_{lat}$  est la densité de flux de chaleur dégagée par la solidification, densité de flux essentiellement localisée au niveau de la frontière solide-liquide.  $\varphi_{sup}$  est la densité de flux extraite par la paroi inférieure. En explicitant la densité  $\varphi_{sup}$ , nous avons :

$$\varphi_{inf} = \lambda \left( \frac{\partial T}{\partial z} \right)_{sup} + \varphi_{lat} \text{ où } \left( \frac{\partial T}{\partial z} \right)_{sup} = 1000 \text{ K.m}^{-1} \text{ (conditions aux limites).} \quad (C.19)$$

Quant à la densité de flux dégagée par le rejet de chaleur latente, on a :  $\varphi_{lat} = \left( \rho_0 L \frac{df_l}{dt} \right) H \quad (C.20)$

Si l'on se réfère à la figure C-9, la variation temporelle de fraction liquide peut s'exprimer de la manière suivante ( $S$  section horizontale du lingot) :

$$\frac{df_l}{dt} = \frac{dh.S}{H.S} = \frac{dh}{H} \text{ ce qui entraîne } \varphi_{lat} = \left( \rho_0 L \frac{dh}{dt} \frac{1}{H} \right) H = \rho_0 L W_f = 3333 \text{ W.m}^{-2} \quad (C.21)$$

en considérant les données numériques de l'alliage Plomb-Etain (cf. Annexe A) et une vitesse moyenne de solidification de  $5 \text{ mm}$  pour  $10 \text{ mn}$ . Les densités de flux estimées sont alors :

$$\varphi_{sup} = 24650 \text{ W.m}^{-2} ; \varphi_{lat} = 3333 \text{ W.m}^{-2} ; \varphi_{inf} = 27983 \text{ W.m}^{-2} \quad (C.22)$$

Ces densités de flux sont tout à fait dans les mêmes ordres de grandeur que les densités obtenues par simulation numérique. Les densités modélisées sont légèrement plus faibles. Toutefois notre estimation ne tient pas compte de l'existence de la zone pâteuse. De même, nous avons négligé l'advection de chaleur par le mouvement du fluide : celui-ci est ascendant et transporte de la chaleur vers le haut du lingot. Une très infime partie de la chaleur latente dégagée n'est pas extraite et réchauffe légèrement le haut du lingot (d'où la très légère inflexion des profils verticaux de température).

Considérations sur l'advection et la diffusion de soluté en zone pâteuse : A partir de l'équation de conservation de soluté, il est possible d'écrire dans la zone pâteuse :

$$\frac{\Delta C_m}{\Delta t} + U_p \cdot \frac{\Delta C_l}{H_{zp}} \approx D \cdot f_l \cdot \frac{\Delta C_l}{H_{zp}^2} \quad (C.23)$$

$\uparrow$                        $\uparrow$   
*Advection*              *Diffusion*

où  $U_p$  est la vitesse caractéristique du liquide interdendritique et  $H_{zp}$  la dimension caractéristique de la zone pâteuse (5 mm par exemple pour une estimation à 10 mn de solidification). Faisons le rapport de l'advection et de la diffusion de soluté afin d'estimer l'importance des différents phénomènes de transport :

$$\frac{\text{Advection soluté}}{\text{Diffusion soluté}} = \frac{U_p H_{zp}}{f_l D} = Pe_{chimique} \quad (C.24)$$

Avant de calculer ce nombre adimensionnel, il est nécessaire d'estimer la vitesse caractéristique du liquide dans la zone pâteuse. Parce que les forces inertielles sont très faibles par rapport aux forces d'Archimède et de Darcy, l'équation de conservation de quantité de mouvement peut s'écrire de manière approchée par un équilibre entre ces deux forces :

$$\Delta \rho g_i f_l \cong \mu \frac{f_l}{K_i} u_i \quad (C.25)$$

ainsi

$$U_p \approx \frac{\Delta \rho g K}{\nu \rho} = (-\beta_T \Delta T - \beta_C \Delta C) \frac{g K}{\nu} = \left[ -1 + \left( -\frac{\beta_C \Delta C}{\beta_T \Delta T} \right) \right] \frac{\beta_T \Delta T g K}{\nu} = \left[ -1 - \frac{\beta_C}{m \beta_T} \right] \frac{\beta_T \Delta T g K}{\nu} \quad (C.26)$$

Pour une différence de température :  $\Delta T = \left( \frac{\partial T}{\partial z} \right) H_{zp} = 5K$ , il est possible d'estimer la vitesse caractéristique du liquide dans la zone pâteuse. Le tableau suivant en donne les valeurs pour trois fractions liquides différentes ainsi que les nombres de Peclet chimique associés.

$f_l$	0,4	0,5	0,6	0,7
$K (m^2)$	$8,1 \cdot 10^{-11}$	$2,28 \cdot 10^{-10}$	$6,15 \cdot 10^{-10}$	$1,74 \cdot 10^{-9}$
$U_p (m.s^{-1})$	$3,72 \cdot 10^{-5}$	$9,45 \cdot 10^{-5}$	$2,55 \cdot 10^{-4}$	$7,21 \cdot 10^{-4}$
$Pe_{chimique}$	155	315	708	1717

Ces estimations des vitesses sont du même ordre de grandeur que les résultats numériques obtenus. L'advection de soluté dans la zone pâteuse est beaucoup plus importante que la diffusion. Toutefois, il n'est pas possible de négliger la diffusion de soluté (surtout lorsque la fraction liquide diminue) car celle-ci peut être localement très forte (par exemple dans les canaux où les gradients de concentration sont élevés). Cela ne fait que confirmer la forte interaction entre écoulement dans la zone pâteuse et formation des mésoségrégations.

*C.1.3.b : Analyse de l'évolution des grandeurs.*

FLUENT nous permet de définir des points afin d'étudier l'évolution de certaines grandeurs par rapport au temps. Nous nous intéresserons à des mesures de vitesse, de fraction liquide, de température et de concentration moyenne en certains points du domaine. Ces points sont présentés dans le tableau C-10 et notés sur la figure associée (cf. figure C-11).

Point	Abscisses	Ordonnées	Remarques
P1	2,5 mm	1 mm	Sur l'axe de symétrie vertical.
P2	2,5 mm	3,33 mm	Sur l'axe de symétrie vertical.
P3	0,5 mm	1 mm	Près de la paroi gauche.
P4	0,5 mm	3,33 mm	Près de la paroi gauche.

Figure C- 10 : Tableau récapitulatif des coordonnées des points.

L'évolution de la vitesse est relevée pour chacun des points. Pour le point P1, les évolutions de température, concentration moyenne et fraction liquide seront relevées en sus.

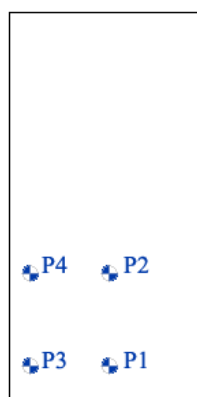


Figure C-11 : Emplacement des points de mesure par rapport à l'ensemble du domaine.

Les graphes de température en fonction du temps permettent de montrer que la température décroît bien de manière linéaire pour l'ensemble des points du domaine (cf. pour exemple la figure C-13-(1)). Les graphes de fraction liquide et de concentration moyenne traduisent bien l'évolution générale du domaine durant les vingt premières minutes de solidification. La relation entre fraction liquide et concentration moyenne est flagrante, les changements d'inflexion, ruptures de pentes ou accidents se situant aux mêmes temps. En revanche, pour les différentes mesures de vitesse, des fluctuations sont constatées tant que le point mesuré se trouve dans le liquide et disparaissent lorsque celui-ci se retrouve en zone pâteuse. Ces fluctuations nous donnent accès à des fréquences caractéristiques récapitulées dans le tableau suivant (figure C-12).

Point	Fréquence caractéristique des oscillations
P1	$\sim 0,08 \text{ Hz}$
P2	$\sim 0,1 \text{ Hz}$
P3	$\sim 0,13 \text{ Hz}$
P4	$\sim 0,05 \text{ Hz}$

Figure C-12 : Récapitulatif des fréquences caractéristiques d'oscillations de vitesse.

Il est possible de relier ces fréquences caractéristiques avec la valeur de la fréquence des ondes de gravité. En effet, les effets thermiques sur l'écoulement dans la zone liquide sont ici stabilisants. Lorsque la stratification thermique est stable, il peut apparaître des ondes de gravité dont la fréquence caractéristique est calculée par la fréquence de Brunt-Väisälä (cf. Craik [17]).

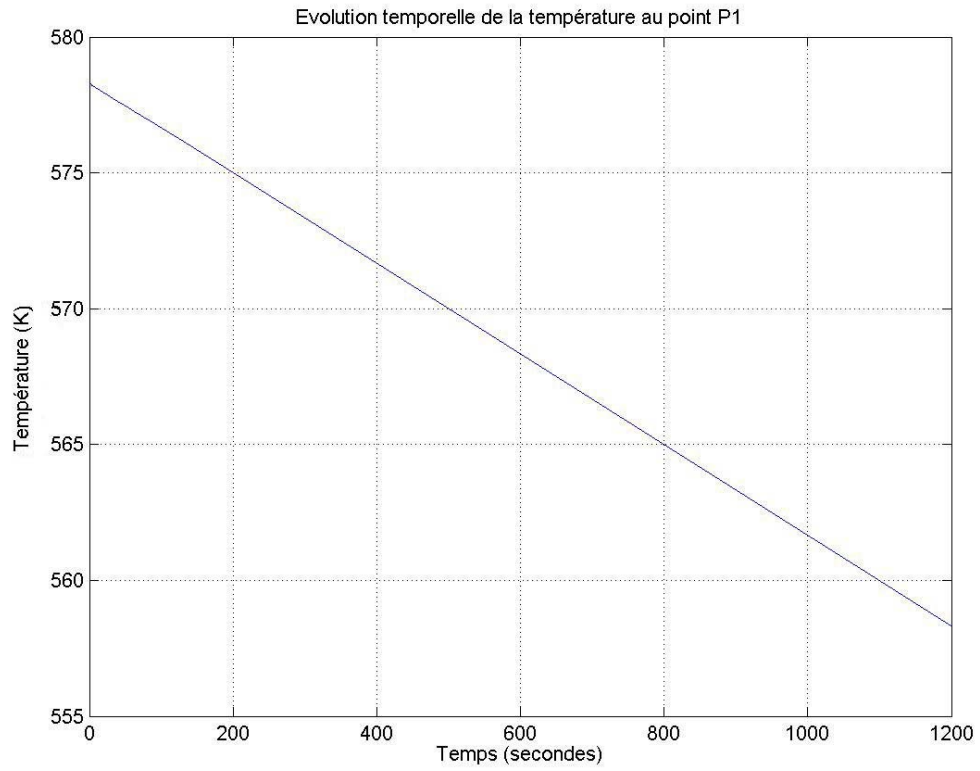
$$f_{BV} = \frac{1}{2\pi} \left( g \frac{d\rho}{dz} \frac{1}{\rho} \right)^{1/2} \quad (\text{C.27})$$

où  $\left( \frac{d\rho}{dz} \right)$  est calculée uniquement à partir de la stratification thermique seule :

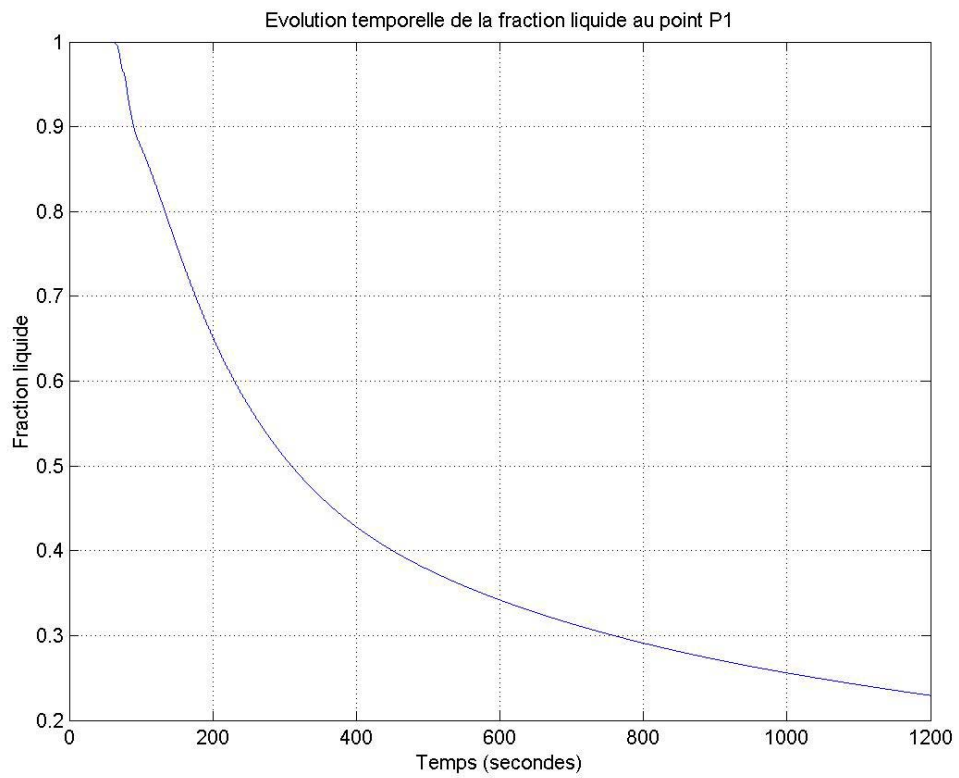
$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \beta_T G_0 H, \text{ où } G_0 \text{ est le gradient thermique considéré, } H \text{ la hauteur du domaine.}$$

Rapportée à notre configuration, cette fréquence caractéristique s'établit à  $0,15 \text{ Hz}$ . L'ordre de grandeur reste assez similaire aux valeurs des simulations compte tenu du fait que la convection solutale perturbe la stratification thermique.

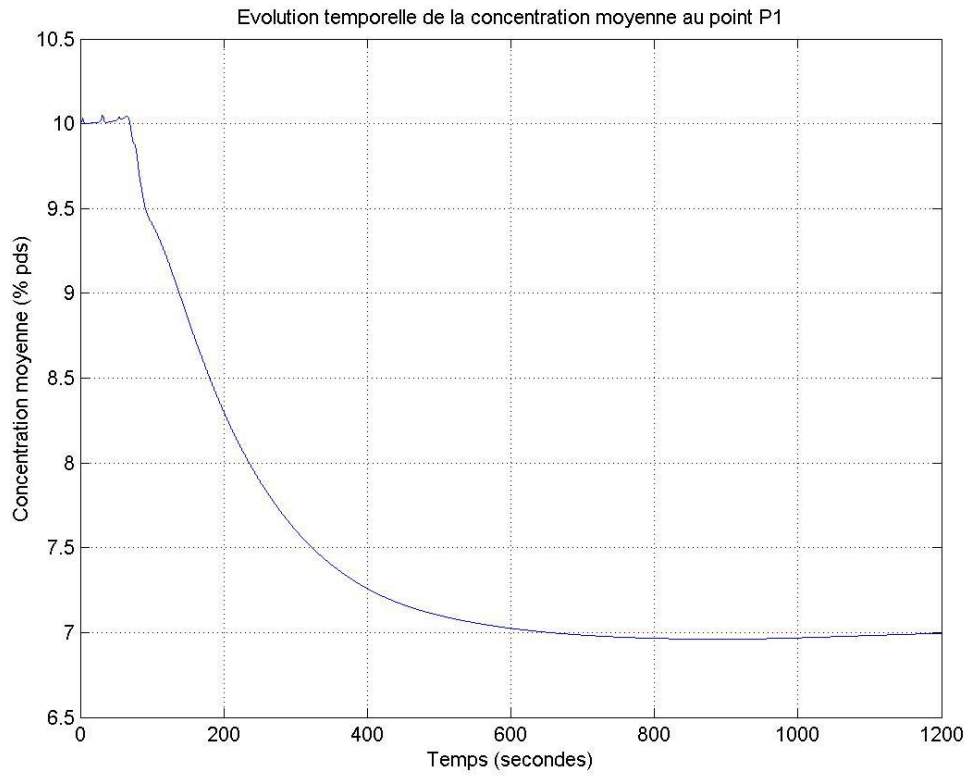




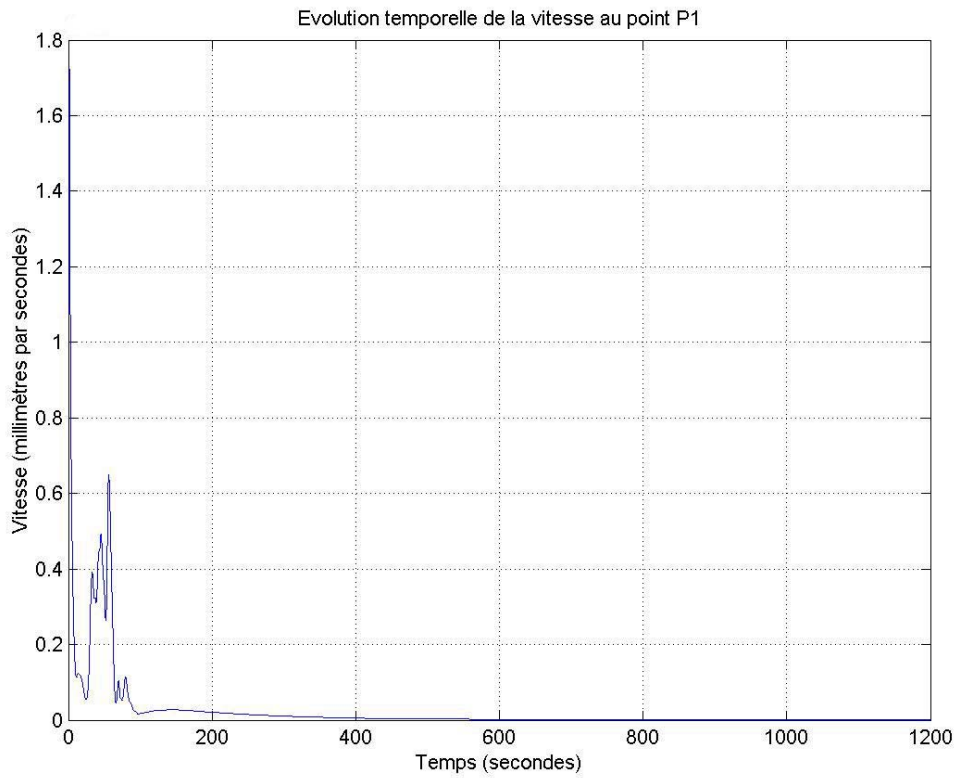
(1)



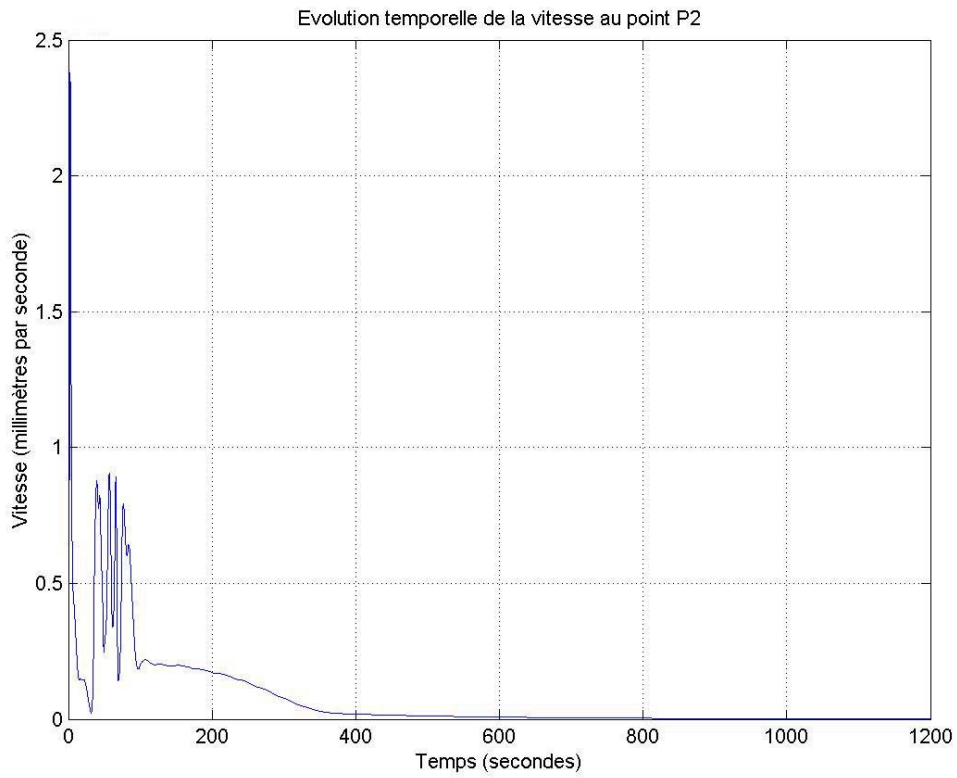
(2)



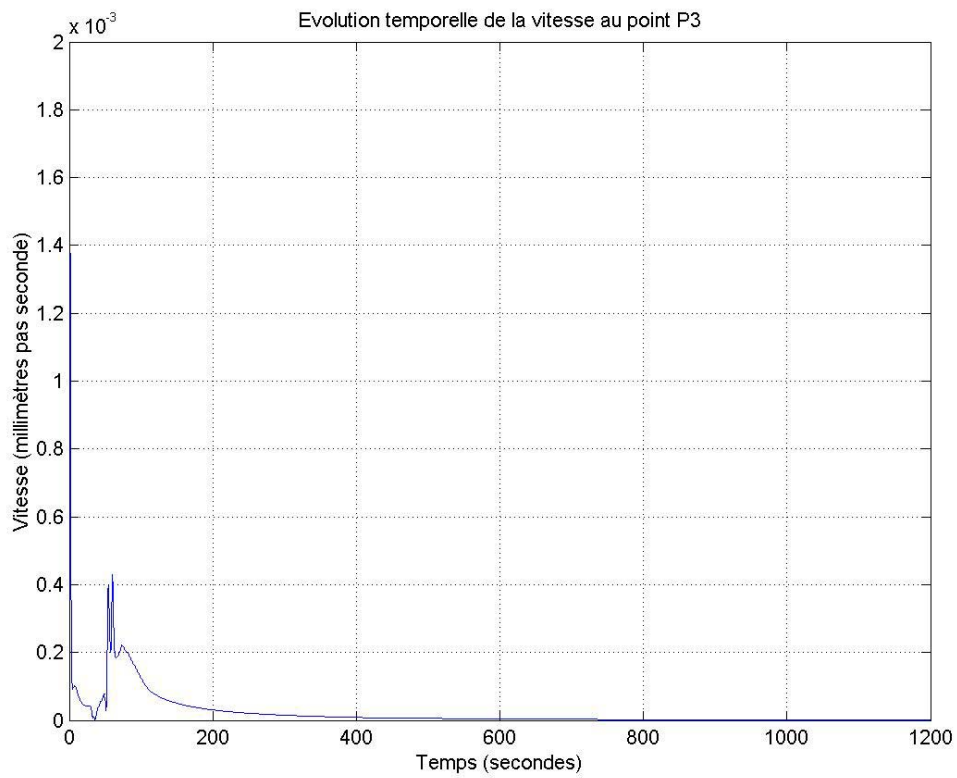
(3)



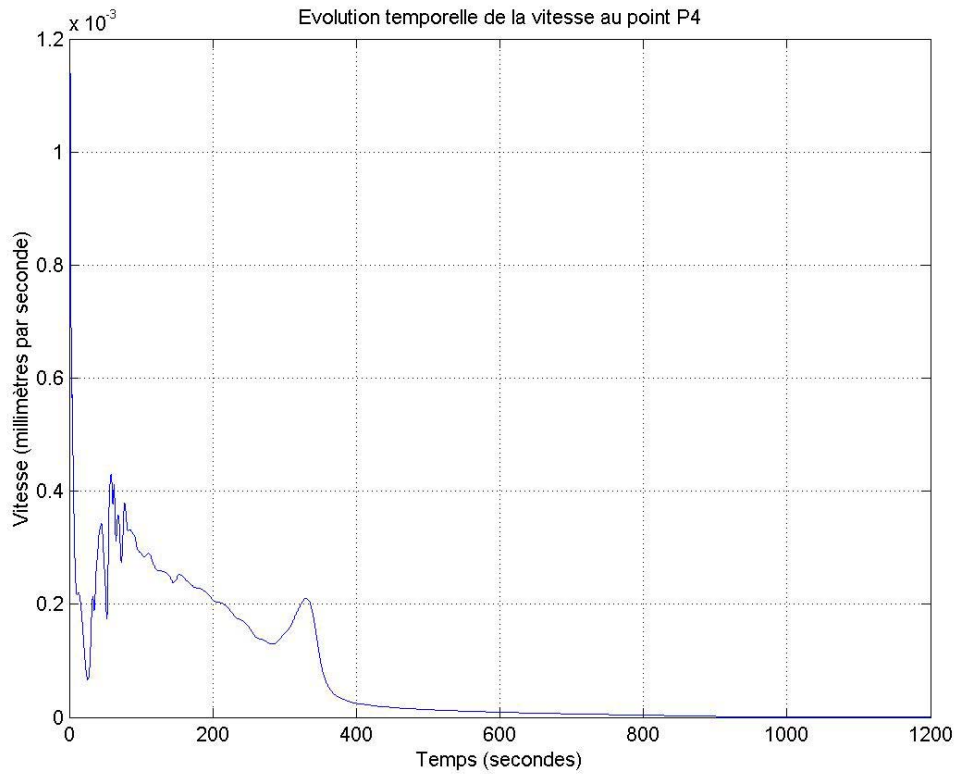
(4)



(5)



(6)

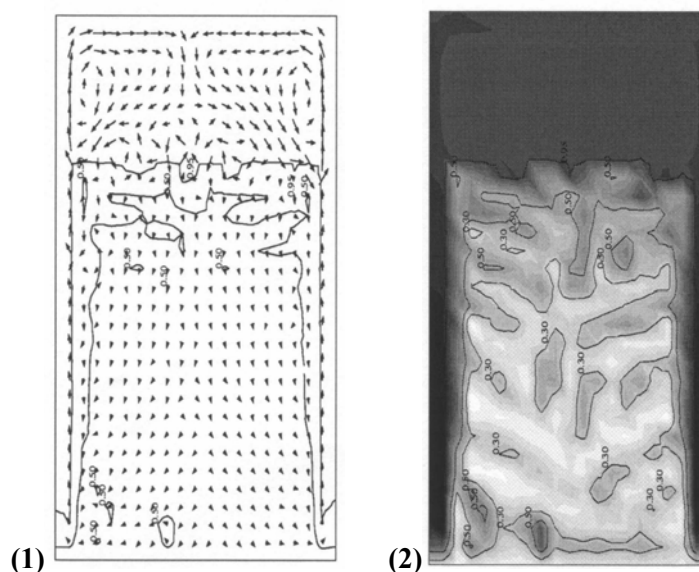


(7)

Figure C-13 : Evolutions temporelles de différentes grandeurs en différents points.

- (1) Température au point P1 durant vingt minutes.
- (2) Fraction liquide au point P1 durant vingt minutes.
- (3) Concentration moyenne au point P1 durant vingt minutes.
- (4) Vitesse au point P1 durant vingt minutes.
- (5) Vitesse au point P2 durant vingt minutes.
- (6) Vitesse au point P3 durant vingt minutes.
- (7) Vitesse au point P4 durant vingt minutes.

C.1.3.c : Comparaison du cas type avec les résultats d'autres codes de calcul.



**Figure C-14:** Résultats du code Felicelli. Maillage  $20 \times 30$ , pas de temps de  $30 \text{ ms}$ .  
(1) Carte des vitesses à  $t = 15 \text{ mn}$ .  $V_{max} = 0,9 \text{ mm.s}^{-1}$  ;  
(2) Carte de concentration moyenne et iso-courbes de fraction liquide.  $C_{m \text{ min}} = 4,29 \%$  (blanc)  
et  $C_{m \text{ max}} = 16 \%$  (noir).

Sur la figure C-14 sont récapitulés certains des résultats du code Felicelli pour des conditions initiales et aux limites identiques au cas type FLUENT ainsi que des paramètres de calcul proches (même pas de temps mais maillage  $20 \times 40$ ). Pour ces raisons, cette comparaison est donnée à titre plus ou moins qualitatif afin de discerner une tendance générale. Le pas de temps de calcul est également le même. Les isothermes (qui ne sont pas ici représentées) sont des droites avec les deux logiciels. On peut également observer dans les résultats du code Felicelli la prédominance latérale des canaux qui fixent l'écoulement en zone liquide sous forme de deux vortex d'expulsion du soluté. Le champ de vitesse ainsi créé a un module maximal de vitesse de  $0,9 \text{ mm.s}^{-1}$  pour Medina / Felicelli, lorsque  $t = 15 \text{ mn}$  de simulation, pour  $0,7 \text{ mm.s}^{-1}$  dans le cas FLUENT. Les écarts de concentration moyenne quant à eux s'établissent de  $4,29 \%$  à  $16 \%$  contre  $6,3 \%$  à  $14,3 \%$  pour FLUENT. Ces différences peuvent trouver leurs origines dans une perméabilité quelque peu différente (d'où un aspect du mush différent) et un calcul explicite de la concentration moyenne dans le code Felicelli. La position du macrofront, quant à elle, est similaire dans les deux cas de calcul ( $7 \text{ mm}$  environ).

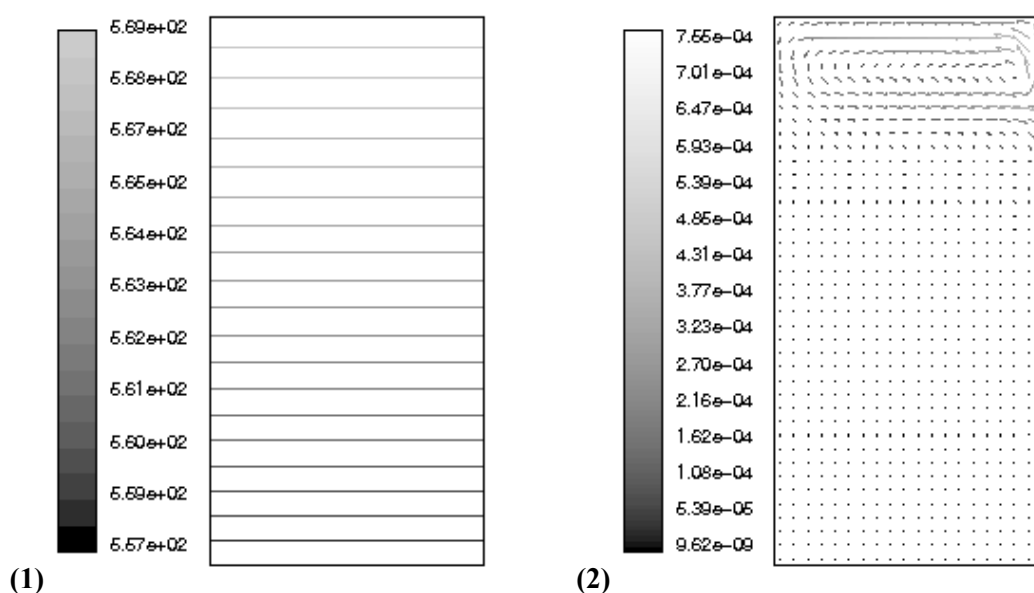
Cette comparaison sommaire permet de mettre en avant une certaine similarité des résultats obtenus avec les deux codes, à défaut de confirmer la validité absolue des résultats.

C.1.3.d : Quelle influence pour l'ordre du schéma de calcul ?

Désignation :	PbSn 1 <sup>er</sup> ordre.
Maillage :	20 x 40.
Pas de temps :	0,03 seconde.
Schéma temporel :	1 <sup>er</sup> ordre.
Correction de pression	PRESTO.
Couplage Pression-Vitesse :	SIMPLE C.
Schémas spatiaux :	1 <sup>er</sup> ordre décentré amont.
Durée de simulation :	20 minutes.
Perméabilité :	Isotrope continue.
Conditions particulières :	Non.

Les résultats précédents ont été obtenus à partir d'un schéma numérique second ordre décentré amont. Le logiciel de calcul nous permet d'opter entre un premier ordre ou un deuxième ordre pour ce schéma numérique. Il est alors légitime d'étudier l'influence du schéma sur les résultats. Le code SOLID étant un code volumes finis du premier ordre, cela nous permet-

-tra alors d'établir des comparaisons avec SOLID sans se demander si les différences de résultats sont dues à l'ordre du schéma de calcul. Les résultats sont présentés figure C-15. Là encore, les isothermes sont des droites horizontales. Les écarts de concentration moyenne sont similaires : de 6,24 % à 16,55 % avec le schéma numérique second ordre pour 6,57 % à 16,94 % avec le premier ordre. Il en va de même avec la fraction liquide minimale (0,17 contre 0,2 ici) ainsi qu'avec la vitesse maximale (530  $\mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$  pour 770  $\mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$  ici). La seule différence majeure consiste en la présence non plus de deux mais d'un seul canal ségrégé (présent sur le côté droit). On retrouve à partir de ce canal un courant ascendant qui fixe l'écoulement en zone liquide. La position du macrofront, quant à elle, se situe à la même hauteur que précédemment.



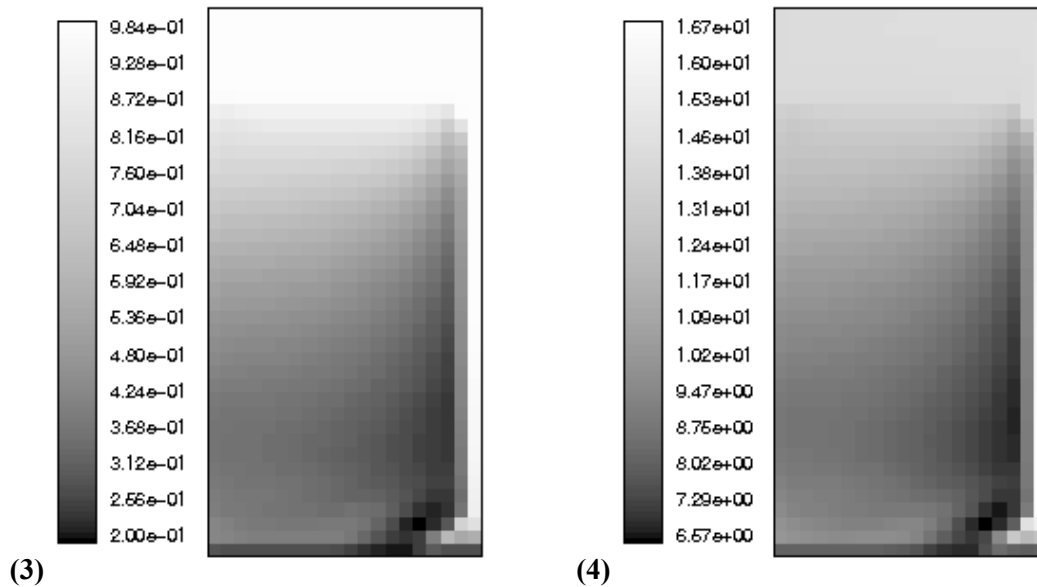


Figure C-15 : A  $t = 1200$  s, (1) Carte de température [ $T_{min} = 557,66$  K ;  $T_{max} = 568,7$  K] ;  
 (2) Champ de vitesses [ $V_{max} = 0,77$  mm.s<sup>-1</sup>] ;  
 (3) Carte de fraction liquide [ $f_{l\ min} = 0,2$  ;  $f_{l\ max} = 1$ ] ;  
 (4) Carte de concentration moyenne [ $C_{m\ min} = 6,57$  % ;  $C_{m\ max} = 16,94$  %].

Comparaisons avec les simulations réalisées sur le logiciel SOLID (cf. Medina [61]) :

Au niveau de la figure C-16 sont présentés les résultats de simulations menées sur le logiciel SOLID au bout de 15 minutes. Dans ce cas, la condition initiale de composition très légèrement inhomogène est remplacée par une légère perturbation de l'angle de gravité (0,01 degré) et la perméabilité est anisotrope.

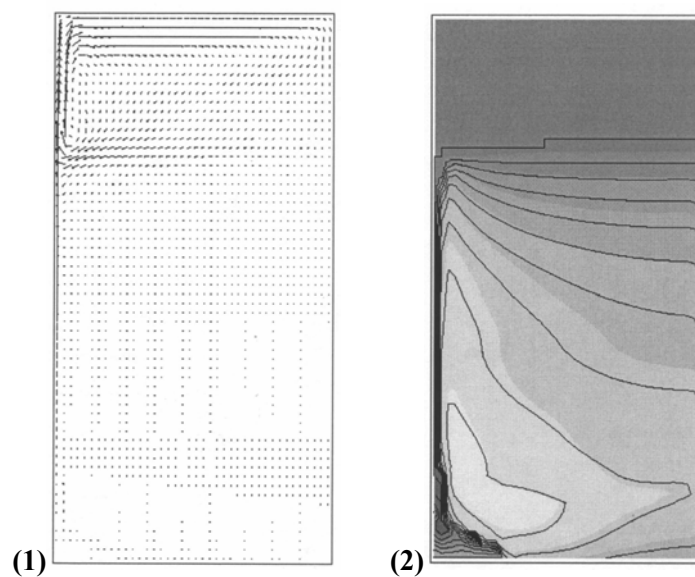


Figure C-16 : Résultats du Code SOLID au bout de 15 minutes de solidification.

Les différentes cartes montrent le développement d'un vortex près de la paroi gauche qui entraîne une circulation dans le sens horaire sur l'ensemble du domaine. Un canal, élargi à sa base, apparaît contre cette paroi gauche. Après quinze minutes de solidification, le front a avancé, le canal s'est allongé. Il n'y a aucune zone à fraction liquide nulle (à vingt minutes non plus) comme c'est le cas dans nos différentes simulations. Après vingt minutes, 90 % du domaine est pâteux et les vitesses sont faibles. La fin de la solidification se produit au bout de 125 minutes conformément à l'estimation faite au paragraphe C.1.1.c. La seule véritable différence consiste en la position du canal : droite pour FLUENT, gauche pour SOLID. Toutefois il est à noter que la modification de l'angle de la gravité induit que les mouvements ascendants de soluté ont lieu légèrement vers la gauche. Une telle caractéristique pourrait expliquer la présence à gauche du canal. En effet, la carte de concentration est fortement influencée par les instabilités de mouvements de fluides pendant les premières minutes. Une étude rapide montre qu'une légère inclinaison dans nos simulations en lieu et place de la perturbation initiale de concentration suffit à modifier la position du canal dans FLUENT.

Nous pouvons tirer les conclusions suivantes de la comparaison des résultats :

- Les isothermes sont quasiment des droites horizontales tant dans notre simulation que dans SOLID.
- L'avancée du macrofront est similaire.
- Les concentrations moyennes à quinze minutes sont peu différentes : 5,3 % à 16 % avec SOLID pour 6,53 % à 15,7 % pour FLUENT. Il est à noter que les différences ne sont pas trop importantes et peuvent être imputables à l'interpolation des cartes.
- Hormis la position du canal, les allures des champs de vitesse sont similaires.
- Les vitesses maximales sont quelque peu différentes :  $760 \mu\text{m.s}^{-1}$  avec SOLID et  $1251 \mu\text{m.s}^{-1}$  avec FLUENT en « sortie » de canal. Cela peut s'expliquer de par le phénomène de refusion (pris en charge dans les deux logiciels mais certainement accentué dans FLUENT par notre méthode de stockage et de traitement) qui est très présent au niveau des canaux et qui crée des gradients de concentration plus élevés à ces endroits. Ces gradients plus élevés entraînent une accélération du rejet de soluté dans le liquide en sortie de canal.

On peut raisonnablement affirmer que les résultats apportés par FLUENT sont, dans la limite des cas comparés et des approximations faites, proches de ceux apportés par SOLID.

Toutefois, la présence d'un seul canal étant probablement due à la moins bonne précision du schéma de calcul et à la plus grande diffusion numérique, l'ensemble des résultats suivants concernera des schémas d'ordre deux.



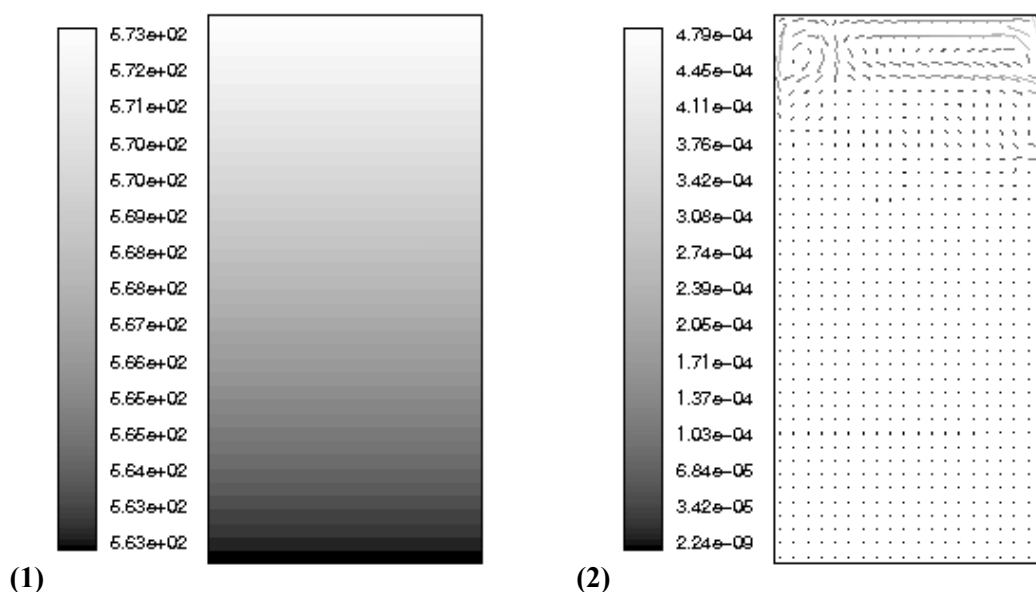
C.1.3.e : *Quelle est l'influence de la perméabilité sur la zone pâteuse ?*

Désignation :	PbSn Nat - Perméabilité 2.
Maillage :	20 x 40.
Pas de temps :	0,03 seconde.
Schéma temporel :	1 <sup>er</sup> ordre.
Correction de pression	PRESTO.
Couplage Pression-Vitesse :	SIMPLE C.
Schémas spatiaux :	2 <sup>nd</sup> ordre décentré amont.
Durée de simulation :	15 minutes.
Perméabilité :	Anisotrope discontinue.
Conditions particulières :	Non.

Les expressions isotropes continues de Carman-Kozeny et Sheidegger pour la perméabilité sont ici remplacées par les expressions anisotropes et discontinues présentées dans le paragraphe B.3.1.a. Les résultats sont présentés figure C-17. On peut d'ores et déjà remarquer que les isothermes restent des lignes horizontales.

Les canaux restent présents à proximité des parois latérales. Les champs de vitesse restent similaires à ceux obtenus avec une perméabilité isotrope au niveau de l'ordre de grandeur.  $V_{max} \sim 500 \mu m.s^{-1}$ . Les différences majeures se situent au niveau de l'aspect et de la forme de la zone pâteuse.

Il est à noter que le front de solidification progresse plus vite ici que dans le cas d'une perméabilité continue. La position de ce dernier à quinze minutes de calcul correspond à la précédente position à vingt minutes. La règle de Chvorinov concernant l'évolution de la position du front en fonction de la racine du temps se vérifie toujours, seule la pente en est accentuée.



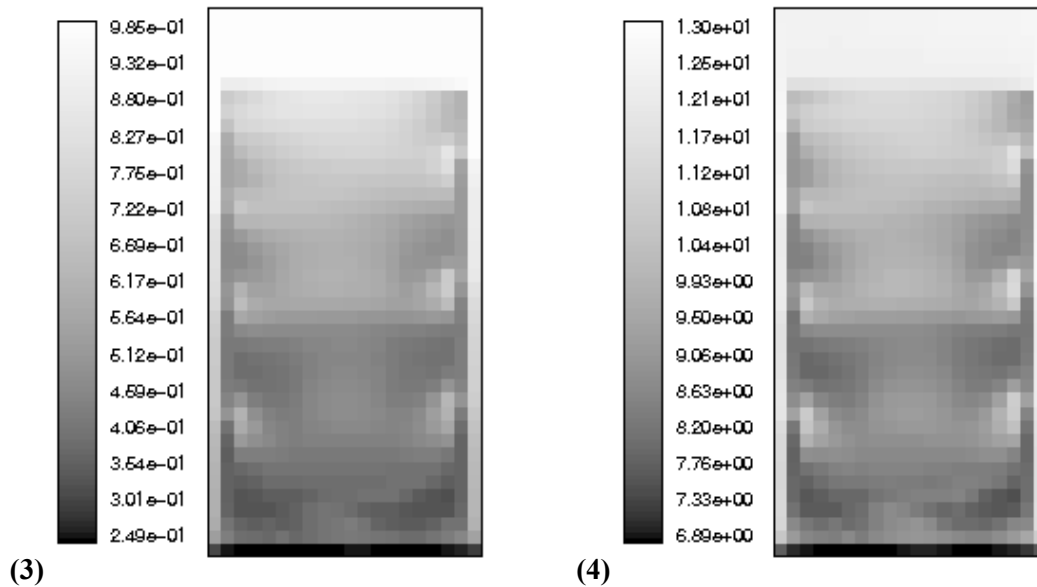


Figure C-17 : A  $t = 900$  s, (1) Carte de température [ $T_{min} = 562,5$  K ;  $T_{max} = 572,7$  K] ;  
 (2) Champ de vitesse [ $V_{max} = 0,489$  mm.s<sup>-1</sup>] ;  
 (3) Carte de fraction liquide [ $f_{l\ min} = 0,25$  ;  $f_{l\ max} = 1$ ] ;  
 (4) Carte de concentration moyenne [ $C_{m\ min} = 6,89$  % ;  $C_{m\ max} = 13,1$  %].

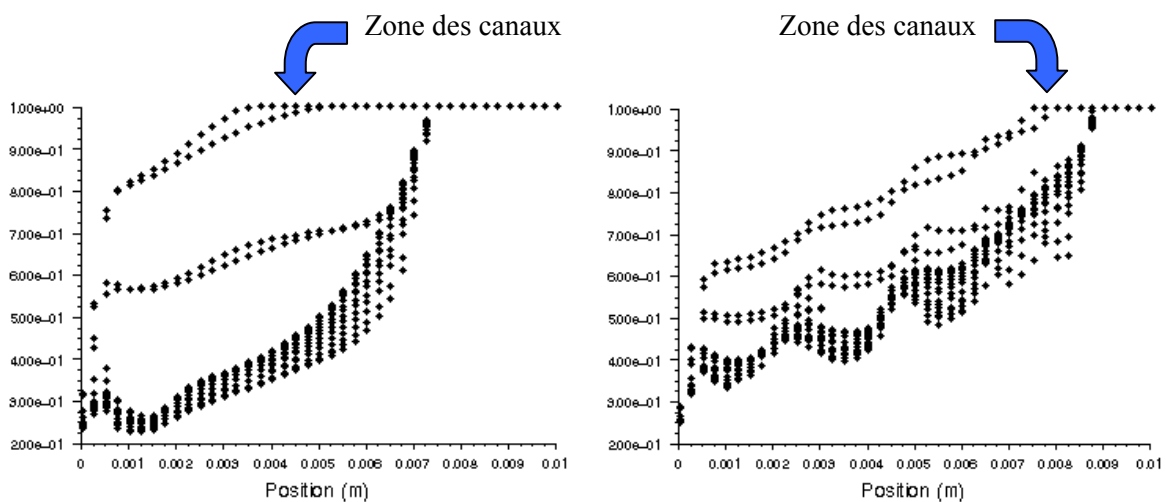


Figure C-18 : Courbes de fraction liquide, fonction de la hauteur du lingot, par lignes verticales.  
 (Gauche) Perméabilité isotrope. (Droite) Perméabilité anisotrope.

Si l'on se réfère à la figure B-5 concernant les lois de perméabilité, on peut remarquer que la perméabilité anisotrope (pour les deux composantes) est moins importante que celle isotrope : le soluté est bien plus freiné en zone pâteuse et enrichit en conséquence bien moins le bain liquide. Ainsi l'écart de concentration moyenne est inférieur : de 6,89 % à 13,1 % dans ce cas pour 6,53 % à 15,93 % dans

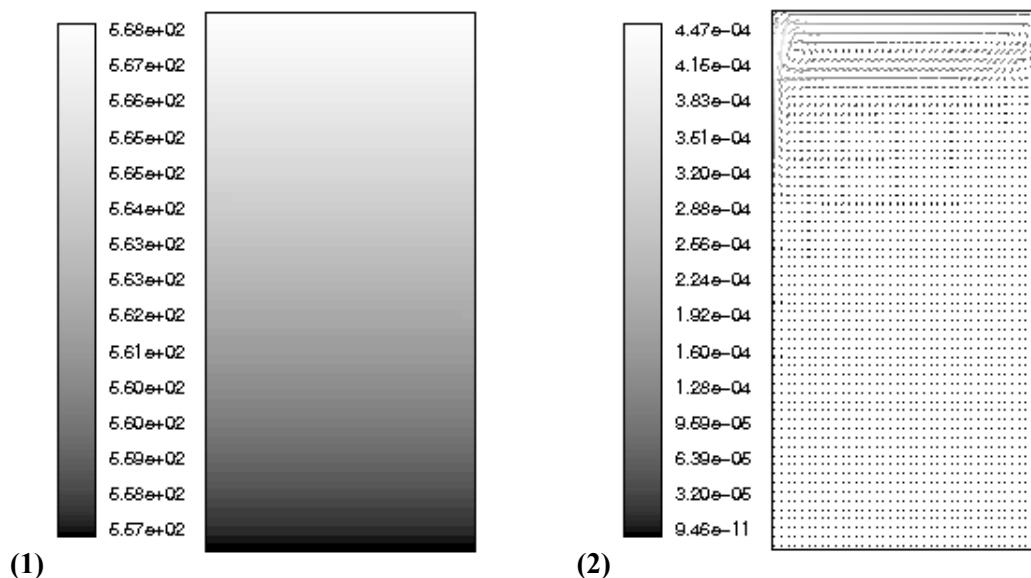
le cas type. La fraction liquide minimale reste similaire : autour de 0,25 (elle correspond à la première rangée formée contre la paroi froide). En revanche, sur l'ensemble du domaine pâteux (c'est à dire sans tenir compte de la zone liquide où la fraction liquide vaut un), la fraction liquide moyenne s'établit à 0,57 contre 0,45 précédemment. Les valeurs sont relativement éloignées et cela se retrouve dans la structure de la zone pâteuse (cf. figure C-17). Les courbes de fraction liquide sont représentées au niveau de la figure C-18. La relation entre la structure de solidification et la fraction liquide est bien visible sur ces figures. On y distingue cette structure par « vagues » consécutives au faible drainage en zone pâteuse, limitant l'évacuation vers le bain liquide du soluté.

La suite des calculs se fera désormais uniquement avec une expression isotrope de la perméabilité.

### C.1.3.f: La taille de maillage modifie-t-elle les résultats ?

Désignation :	PbSn Nat - Maillage 40x60.
Maillage :	40 x 60.
Pas de temps :	0,03 seconde.
Schéma temporel :	1 <sup>er</sup> ordre.
Correction de pression	PRESTO.
Couplage Pression-Vitesse :	SIMPLE C.
Schémas spatiaux :	2 <sup>ème</sup> ordre décentré amont.
Durée de simulation :	20 minutes.
Perméabilité :	Isotrope continue.
Conditions particulières :	Non.

Les résultats qui vont suivre correspondent à un maillage 40 x 60 (largeur x hauteur). C'est la seule modification apportée par rapport au cas de référence (cf. paragraphe C.1.3.d). Les différentes cartes (cf. figure C-19) au bout de vingt minutes de solidification montrent des résultats très similaires à ceux déjà obtenus auparavant. Les isothermes restent horizontales.



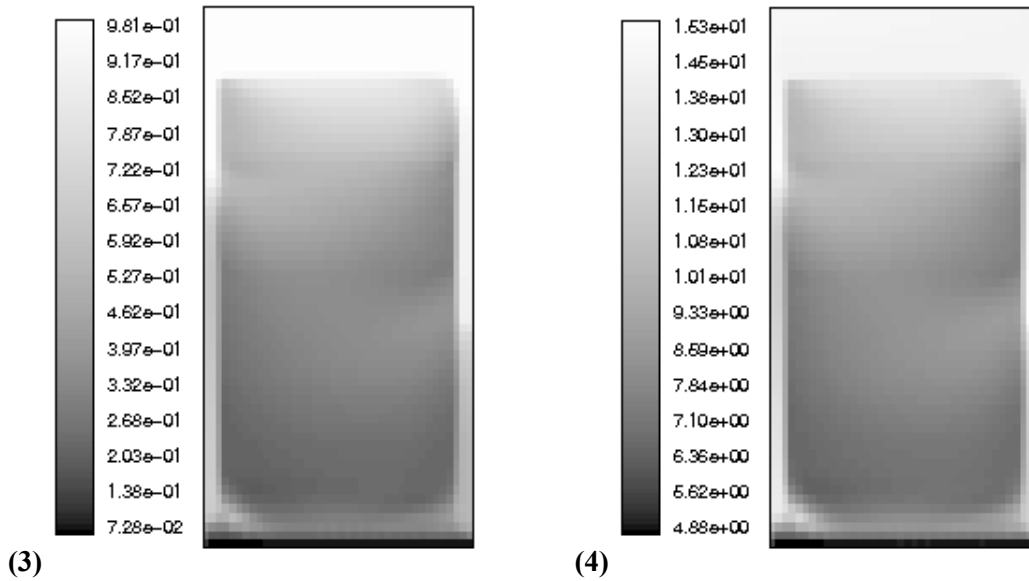


Figure C- 19 : A  $t = 1200 s$ , (1) Carte de température [ $T_{min} = 557,5 K$  ;  $T_{max} = 567,8 K$ ] ;  
 (2) Champ de vitesse [ $V_{max} = 456 \mu m.s^{-1}$ ] ;  
 (3) Carte de fraction liquide [ $f_{l min} = 0,07$  ;  $f_{l max} = 1$ ] ;  
 (4) Carte de concentration moyenne [ $C_{m min} = 4,88 \%$  ;  $C_{m max} = 15,46 \%$ ].

Les différences de concentration moyenne restent assez similaires : de 4,88 % à 15,46 % dans le cas présent pour 6,2 % à 16,5 % dans le cas de référence au bout de 20 minutes. Il en va de même pour l'allure générale du champ de vitesse et la vitesse maximum :  $V_{max} \sim 0,5 mm.s^{-1}$  dans les deux cas. Les canaux latéraux ont la même largeur avec les deux maillages : leur largeur n'est donc pas un effet de maillage.

Une étude a également été réalisée avec ce maillage  $40 \times 60$  et des schémas numériques du premier ordre. Les résultats obtenus restent similaires à ceux obtenus dans le paragraphe d'analyse de l'influence de l'ordre du schéma de calcul (cf. paragraphe C.1.3.d).

Toutefois, le temps de calcul est, avec ce maillage, bien plus long (environ un rapport 3 sur les temps de calcul entre un maillage  $20 \times 40$  et un maillage  $40 \times 60$ ). Notre objectif n'étant pas de réaliser une étude numérique complète mais d'avoir un outil fiable pour simuler nos expériences, nous nous contenterons, dans tous les cas présentant la même géométrie, à un maillage  $20 \times 40$  au temps de calcul avantageux et aux résultats contenant suffisamment d'informations.

## C.2 : Exploitation : analyse de l'influence de la convection forcée.

Dans ce paragraphe, nous présenterons l'influence sur les mésoségrégations de l'application d'un brassage électromagnétique sur le domaine durant la solidification. Différentes configurations ont

été testées afin de mettre en évidence l'aspect « pilote de ségrégations » du brassage. Nous nous limiterons à une intensité de force magnétique de  $1000 N.m^{-3}$ .

### **C.2.1 : Quelles nouvelles valeurs pour les nombres sans dimension ?**

#### **Quelles conséquences ?**

##### *C.2.1.a : En zone liquide.*

Pour analyser la contribution du champ magnétique à notre cas type, il nous faut revenir aux nombres sans dimension  $M_1$  et  $M_2$  définis dans la partie B de l'exposé. On a alors en zone liquide :

$$M_1 = 8,5 \text{ pour un module de force magnétique de } 1000 N.m^{-3} \text{ et } \Delta T = 10 K. \quad (C.28)$$

Pour rappel,  $M_1$  quantifie le rapport des forces de Lorentz sur celles d'Archimède (thermiques). Ainsi, les forces magnétiques sont plus importantes que les forces d'Archimède considérées. Lorsque la zone pâteuse progresse, la zone liquide diminue et le  $\Delta T$  à prendre en compte dans le calcul de  $M_1$  diminue.  $M_1$  augmente en conséquence. Il est difficile, en revanche, d'estimer le nombre  $M_2$  (le rapport des forces de Lorentz sur celles de la convection solutale) : quelle différence de composition prendre en zone liquide ? L'homogénéisation en composition du bain liquide est assez rapide au regard des résultats déjà obtenus. Toutefois, en se référant à la figure C-5, il est possible de considérer un  $\Delta C$  d'environ 0,3 % à titre indicatif.

$$M_2 = 6,6 \text{ pour un module de force magnétique de } 1000 N.m^{-3} \text{ et } \Delta C = 0,3 \%. \quad (C.29)$$

##### *C.2.1.b : En zone pâteuse.*

Les forces magnétiques sont légèrement plus importantes que les forces d'Archimède d'origine solutale. Si l'on essaie de considérer les forces d'Archimède dans leur ensemble, par l'intermédiaire du paramètre d'interaction électromagnétique  $M$  et du terme  $\Delta\rho / \rho_0$ , en zone pâteuse :

$$M = 0,9 \text{ pour } \Delta\rho / \rho_0 = 0,0118 \text{ (domaine à moitié pâteux)}. \quad (C.30)$$

Ce qui montre bien que les forces magnétiques sont, dans leur ensemble, du même ordre que les forces d'Archimède. Ceci est conforme aux hypothèses faites sur l'intensité des forces magnétiques dans le paragraphe B.3.2.a. Si l'on se restreint à la zone pâteuse et aux forces de Darcy, le nombre sans dimension  $M_3$  prend pour valeur :

$f_i$	0,4	0,5	0,6	0,7
$K (m^2)$	$8,1.10^{-11}$	$2,28.10^{-10}$	$6,15.10^{-10}$	$1,74.10^{-9}$
$U_p (m.s^{-1})$	$3,72.10^{-5}$	$9,45.10^{-5}$	$2,55.10^{-4}$	$7,21.10^{-4}$
$M_3$	0,88	0,98	0,98	0,98

$M = 0,98$  pour les fractions liquides considérées (rapport entre les forces de Lorentz et les forces de Darcy). Toutefois, lorsque la fraction liquide augmente ( $> 0,7$ ),  $M_3$  augmente. Les forces électromagnétiques peuvent directement agir sur le liquide si et seulement si la fraction liquide est suffisamment importante. Dans le cas contraire, elles sont neutralisées par les forces de Darcy.

### C.2.2 : Influence du brassage sur les résultats.

Les cas qui seront ici traités montrent l'influence entre l'écoulement du fluide et la solidification. Le brassage électromagnétique sera superposé à la convection naturelle.

#### C.2.2.a : Double vortex ascendant au milieu.

Désignation :	<i>PbSn Convection Forcée I.</i>
Maillage :	<i>20 x 40.</i>
Pas de temps :	<i>0,03 seconde.</i>
Schéma temporel :	<i>1<sup>er</sup> ordre.</i>
Correction de pression	<i>PRESTO.</i>
Couplage Pression-Vitesse :	<i>SIMPLE C.</i>
Schémas spatiaux :	<i>2<sup>ème</sup> ordre décentré amont.</i>
Durée de simulation :	<i>20 minutes.</i>
Perméabilité :	<i>Isotrope continue.</i>
Conditions particulières :	<i>Double vortex ascendant au milieu.</i>

Un brassage créant un écoulement en double vortex, ascendant au milieu, est appliqué au domaine. L'intensité maximale de la force magnétique est  $F_0 = 1000 N.m^{-3}$ . Les résultats au bout de vingt minutes de solidification sont présentés figure C-20. On distingue aisément deux modifications majeures : une déformation des isothermes ainsi que la présence d'un canal central.

La déformation des isothermes correspond à la forme de l'écoulement ainsi qu'à son intensité. En effet, la vitesse maximale est  $V_{max} \sim 6,2 mm.s^{-1}$ , soit près de dix fois supérieure à la vitesse maximale en convection naturelle seule. Malgré cela, l'advection de chaleur reste relativement faible, compte tenu de la forte diffusion thermique. En ce qui concerne l'existence du canal central, sa position correspond aux courants ascendants des deux vortex de l'écoulement. Ces courants ascendants entraînent de manière plus importante que la convection d'origine naturelle le liquide

interdendritique, enrichi en soluté, se trouvant dans la zone pâteuse vers le haut de celle-ci et vers le bain liquide.

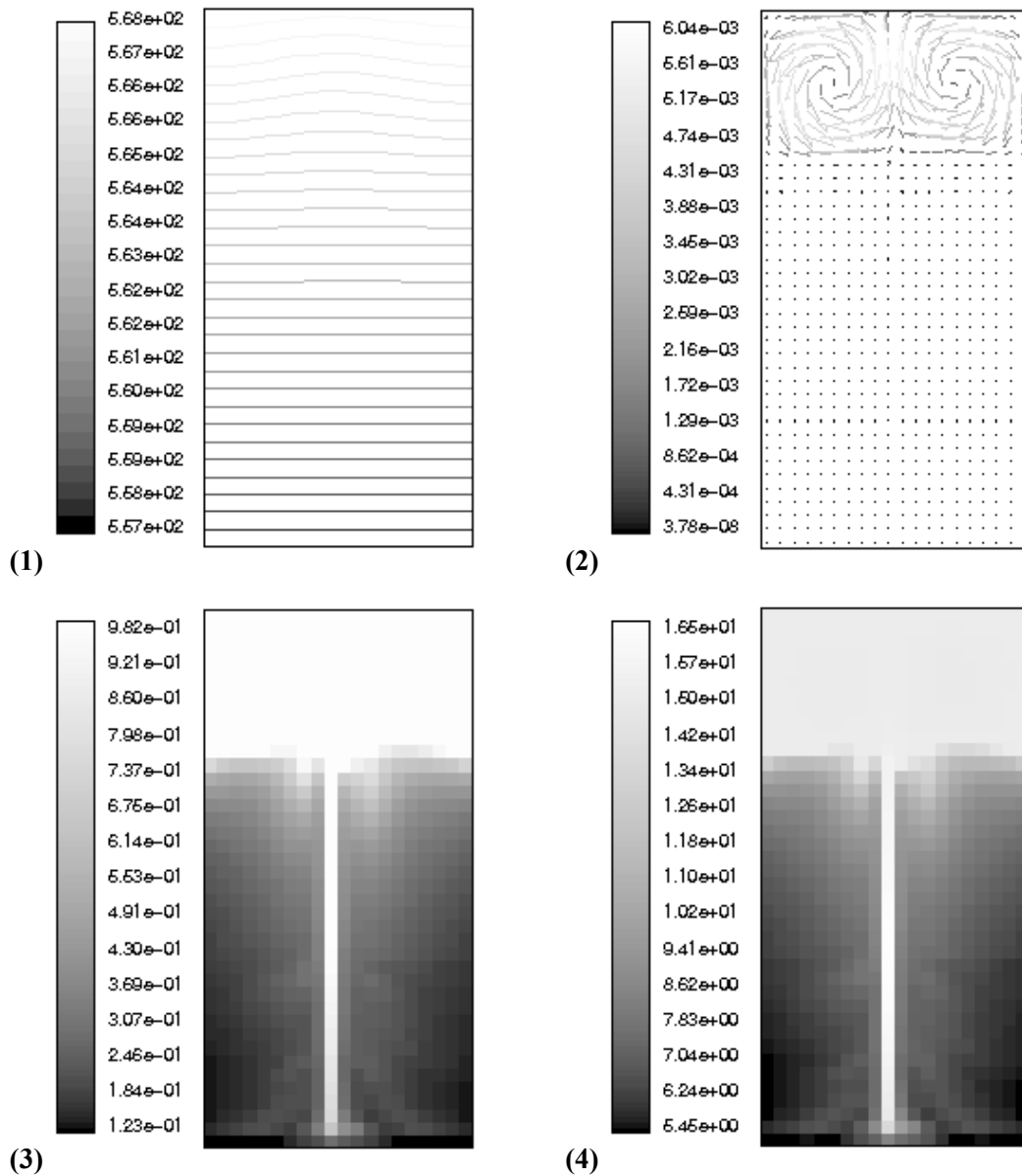


Figure C-20 : A  $t = 1200$  s, (1) Carte de température [ $T_{min} = 557,4$  K ;  $T_{max} = 567,9$  K] ;  
 (2) Champ de vitesse [ $V_{max} = 6,16$  mm.s<sup>-1</sup>] ;  
 (3) Carte de fraction liquide [ $f_{l\ min} = 0,12$  ;  $f_{l\ max} = 1$ ] ;  
 (4) Carte de concentration moyenne [ $C_{m\ min} = 5,45\%$  ;  $C_{m\ max} = 16,76\%$ ].

La partie centrale de la zone pâteuse, de par l'apport latéral de soluté consécutif à la forme de l'écoulement, s'enrichit également de soluté, souffrant alors d'un retard de solidification. Un canal se forme. L'écoulement étant maintenu par le brassage, le canal est entretenu tout au long de la

solidification. On peut remarquer sur les cartes que les écarts de concentration moyenne sont légèrement supérieurs avec le brassage : de 5,45 % à 16,76 % pour 6,24 % à 16,55 % sans brassage. Le brassage draine de manière visible le soluté dans la zone pâteuse vers le liquide. La fraction liquide en est consécutivement plus faible : 0,12 au minimum pour 0,17 précédemment, les flux de chaleur extraits par la partie basse étant sensiblement les mêmes. Cela se traduit également par une plus grande homogénéisation de la concentration dans la partie liquide qu'en convection naturelle seule (les vitesses, bien plus importantes, en sont la cause).

Remarque : Le brassage électromagnétique semble ralentir légèrement la progression du macrofront. En convection naturelle pure, le front de solidification se situe à environ huit millimètres de la base alors qu'avec cette configuration de brassage le front se situe à 7,25 mm de la base. La plus grande homogénéité en soluté du bain liquide ainsi que le plus grand drainage en soluté de la zone pâteuse vers le canal, puis vers le bain liquide, en sont les responsables. En effet ce drainage enrichit le bain liquide qui se retrouve à une concentration plus élevée que précédemment, bain liquide dont la température de solidification en est consécutivement plus basse. Ceci ralentit la solidification.

#### C.2.2.b : Effet Joule : Modification ou non des résultats ?

<i>Désignation :</i>	<i>PbSn Joule.</i>
<i>Maillage :</i>	<i>20 x 40.</i>
<i>Pas de temps :</i>	<i>0,03 seconde.</i>
<i>Schéma temporel :</i>	<i>1<sup>er</sup> ordre.</i>
<i>Correction de pression</i>	<i>PRESTO.</i>
<i>Couplage Pression-Vitesse :</i>	<i>SIMPLE C.</i>
<i>Schémas spatiaux :</i>	<i>2<sup>nd</sup> ordre décentré amont.</i>
<i>Durée de simulation :</i>	<i>20 minutes.</i>
<i>Perméabilité :</i>	<i>Isotrope continue.</i>
<i>Conditions particulières :</i>	<i>Double vortex magnétique, ascendant au milieu et prise en compte de l'effet joules.</i>

Une rapide étude a été menée afin de confirmer la non-prise en compte de l'effet Joule créé par les inducteurs dans l'ensemble des calculs menés. Nous nous plaçons dans une configuration à double vortex ascendant au milieu (cf. paragraphe C.2.2.a) afin que la présence d'éventuels canaux latéraux ou autres modifications puissent totalement être imputées à l'effet Joule des inducteurs.

Les calculs le concernant se situent au paragraphe B.3.3.a. On peut constater que les cartes de concentration moyenne et de fraction liquide sont similaires dans leur aspect général aux calculs sans effet Joule. Au niveau des valeurs extrémales, elles sont de 0,113 pour la fraction liquide contre 0,123 avec brassage seul, différence peu notable et qui peut être due à une légère diffusion numérique. Il en va de même pour les valeurs extrémales de la concentration moyenne : 5,28 % à 16,75 % ici contre 5,45 % à 16,76 % avant.



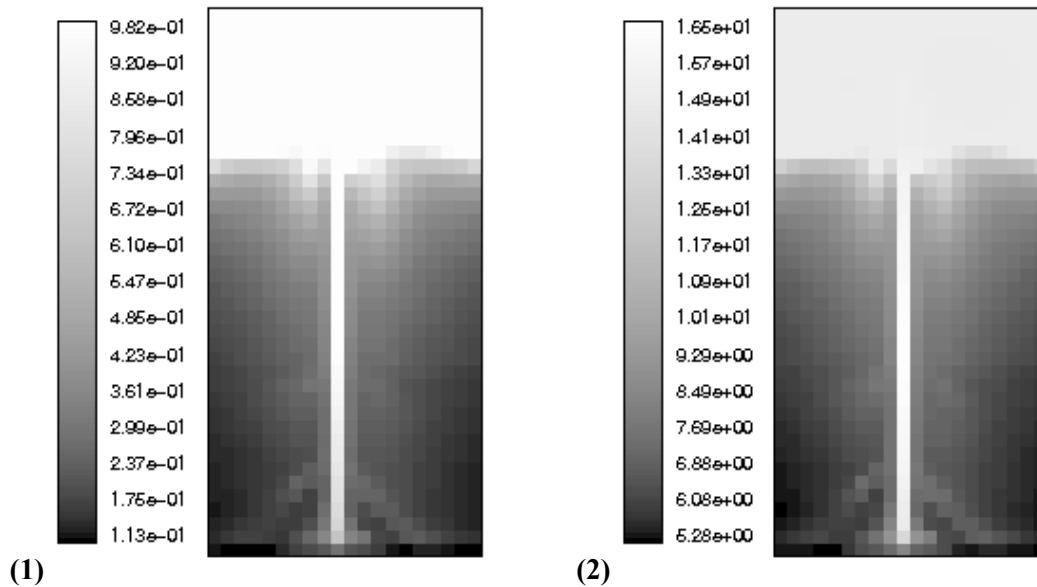


Figure C-21 : A  $t = 1200 s$  .(1) Carte de fraction liquide [ $f_{l\ min} = 0,113$  ;  $f_{l\ max} = 1$ ] ;  
 (2) Carte de concentration moyenne [ $C_{m\ min} = 5,28\ %$  ;  $C_{m\ max} = 16,75\ %$ ].

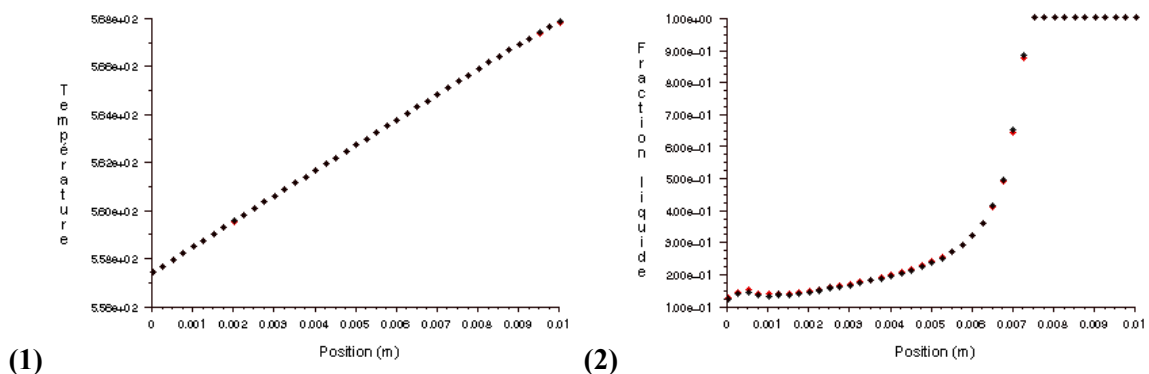


Figure C-22 : (1) Superposition des courbes de température à  $1/10^e\ mm$  de la paroi gauche  
 avec (rouge) et sans (noir) effet Joule.  
 (2) Superposition des courbes de fraction liquide à  $1/10^e\ mm$  de la paroi gauche  
 avec (rouge) et sans (noir) effet Joule.

Si l'on représente sur un même graphe (cf. figure C-22-(1)) les valeurs de la fraction liquide à proximité de la paroi gauche (par exemple), on s'aperçoit que les profils sont similaires et les différences assez peu sensibles. Si l'on procède de même avec la température (cf. figure C-22-(2)), on s'aperçoit que les courbes sont quasiment confondues, l'apport de chaleur par les inducteurs semblant négligeable. Cela confirme l'étude d'ordre de grandeur faite précédemment et la non-prise en compte de l'effet Joule dans tous les calculs à venir.

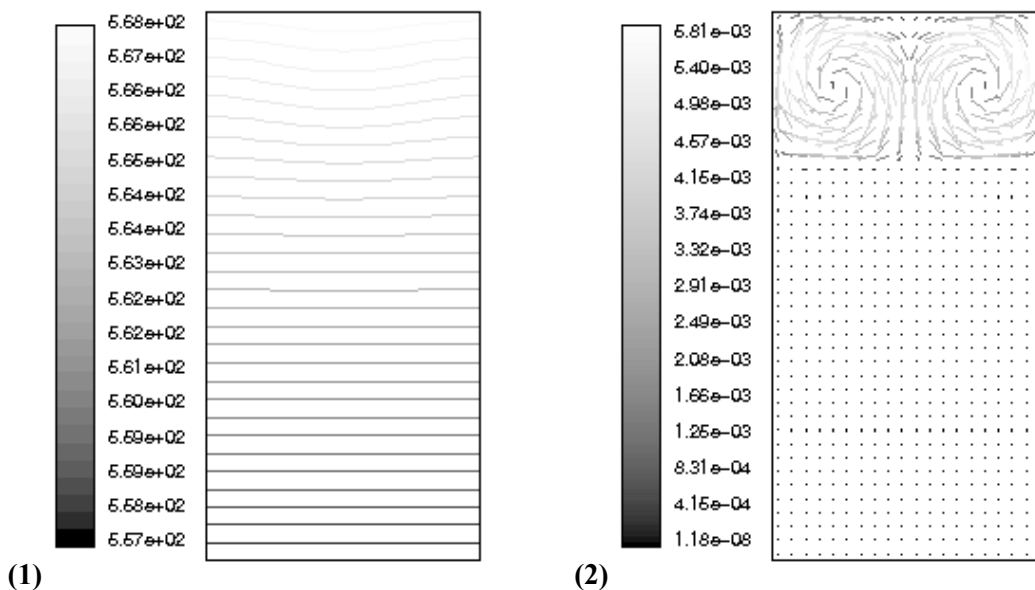
La position du macrofront reste, quant à elle, totalement inchangée.

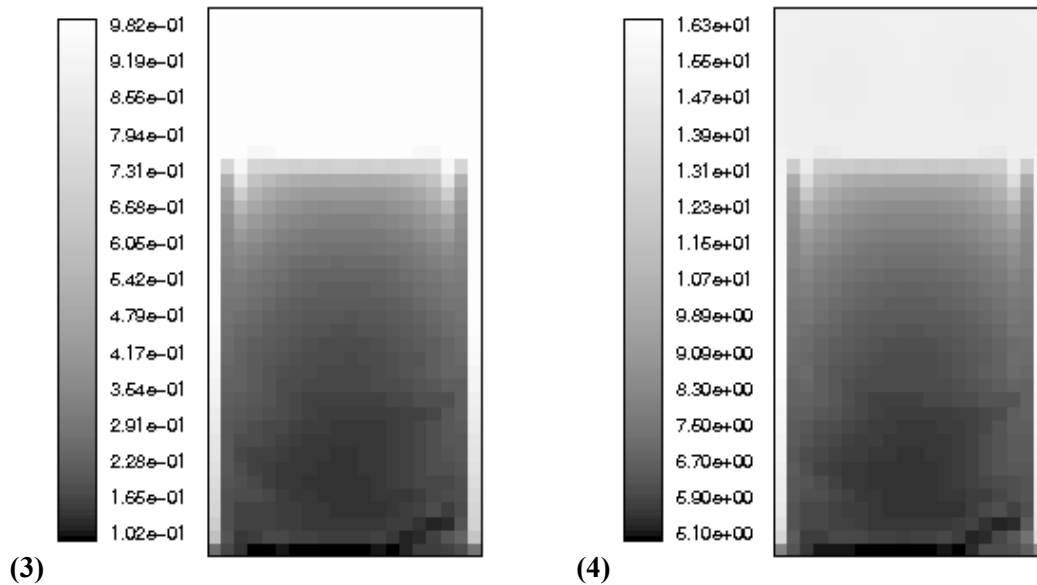
*C.2.2.c : Double vortex ascendant sur les côtés.*

Désignation :	<i>PbSn Convection Forcée 3.</i>
Maillage :	<i>20 x 40.</i>
Pas de temps :	<i>0,03 seconde.</i>
Schéma temporel :	<i>1<sup>er</sup> ordre.</i>
Correction de pression	<i>PRESTO.</i>
Couplage Pression-Vitesse :	<i>SIMPLE C.</i>
Schémas spatiaux :	<i>2<sup>nd</sup> ordre décentré amont.</i>
Durée de simulation :	<i>20 minutes.</i>
Perméabilité :	<i>Isotrope continue.</i>
Conditions particulières :	<i>Double vortex magnétique, ascendant sur les bords..</i>

Un champ de force créant une circulation en double vortex ascendant sur les côtés du domaine est désormais appliqué et superposé à la convection naturelle (cf. paragraphe B.2.2.a). L'intensité maximale de la force magnétique est  $F_0 = 1000 \text{ N.m}^{-3}$ . Les résultats au bout de vingt minutes de solidification sont présentés figure C-23.

Les différents résultats obtenus, compte tenu de la configuration de brassage, sont assez ressemblants à ceux obtenus précédemment. L'écoulement est plus intense avec des vitesses maximales de l'ordre de six millimètres par seconde, déformant alors légèrement les isothermes. La position des canaux ségrévés est conforme à la forme de l'écoulement et ces derniers se situent alors à proximité des deux parois latérales. Là encore les différences de composition sont accentuées et la fraction liquide minimale abaissée par rapport au cas sans brassage. Le bain liquide, quant à lui, est également plus homogène.





**Figure C-23 :** A  $t = 1200$  s, (1) Carte de température [ $T_{min} = 557,4$  K ;  $T_{max} = 567,85$  K] ;  
 (2) Champ de vitesse [ $V_{max} = 5,9$  mm.s<sup>-1</sup>] ;  
 (3) Carte de fraction liquide [ $f_{l\ min} = 0,1$  ;  $f_{l\ max} = 1$ ] ;  
 (4) Carte de concentration moyenne [ $C_{m\ min} = 5,10$  % ;  $C_{m\ max} = 16,5$  %].

*C.2.2.d : Le simple vortex.*

Désignation :	<i>PbSn Simple vortex.</i>
Maillage :	<i>20 x 40.</i>
Pas de temps :	<i>0,03 seconde.</i>
Schéma temporel :	<i>1<sup>er</sup> ordre.</i>
Correction de pression	<i>PRESTO.</i>
Couplage Pression-Vitesse :	<i>SIMPLE C.</i>
Schémas spatiaux :	<i>2<sup>nd</sup> ordre décentré amont.</i>
Durée de simulation :	<i>20 minutes.</i>
Perméabilité :	<i>Isotrope continue.</i>
Conditions particulières :	<i>Vortex magnétique simple, rotation dans le sens horaire.</i>

Un seul inducteur est accolé au domaine à solidifier. Conformément au paragraphe B.2.2.a, il crée un écoulement sous la forme d'un vortex simple tournant dans le sens horaire. L'intensité de la force magnétique est toujours  $F_0 = 1000$  N.m<sup>-3</sup>. Les résultats au bout de vingt minutes de solidification sont présentés figure C-24. On y observe le vortex créé par l'inducteur dans le champ liquide.

La vitesse maximale y est de l'ordre de  $1$  cm.s<sup>-1</sup> ce qui, une fois encore, entraîne une légère déformation des isothermes. Le vortex crée une aspiration de soluté qui développe et entretient un canal le long de la paroi gauche. Ce phénomène d'aspiration se traduit par l'apparition de légères structures inclinées (en bas à gauche du domaine) qui peuvent être assimilées à des « sous-canaux »

ayant alimenté en soluté le canal principal sous l'influence du brassage. On y retrouve, comme pour le canal principal, une concentration moyenne plus élevée et une fraction liquide plus basse.

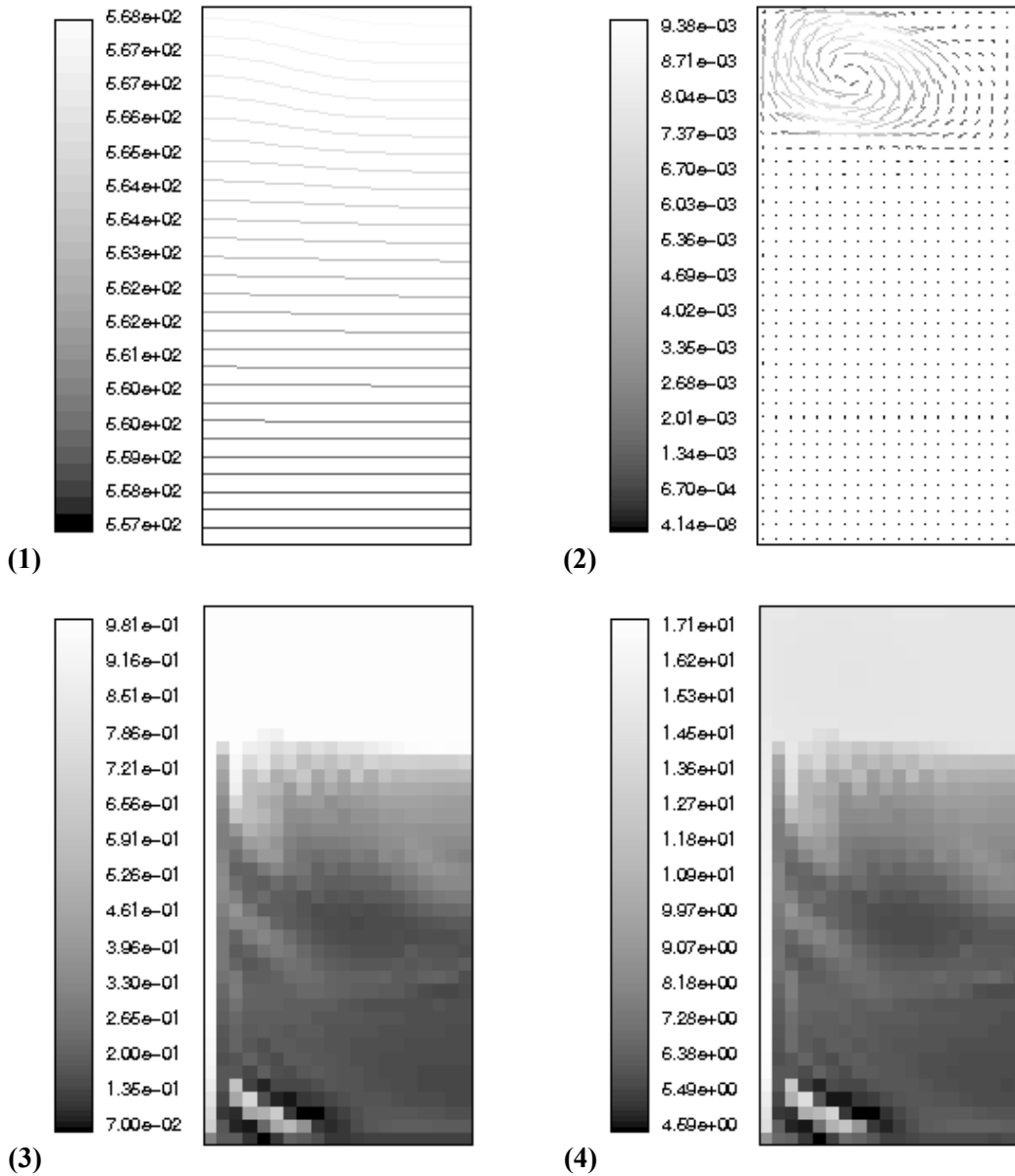


Figure C-24 : A  $t = 1200$  s, (1) Carte de température [ $T_{min} = 557,4$  K ;  $T_{max} = 567,9$  K] ;  
 (2) Champ de vitesse [ $V_{max} = 9,57$  mm.s<sup>-1</sup>] ;  
 (3) Carte de fraction liquide [ $f_{l min} = 0,07$  ;  $f_{l max} = 1$ ] ;  
 (4) Carte de concentration moyenne [ $C_{m min} = 4,6$  % ;  $C_{m max} = 17,4$  %].

De manière générale, la fraction liquide est plus basse que précédemment. Elle est de  $0,07$  ici contre  $0,1$  dans le cas « double vortex ascendant sur les côtés » au bout de vingt minutes. Elle est également inférieure à la valeur minimale du cas « double vortex ascendant au milieu » qui est de  $0,113$  mais au bout de vingt minutes de solidification. Il en va de même pour la concentration

moyenne minimale qui est ici de 4,6 % à comparer à 5,1 % auparavant (double vortex ascendant sur les côtés) et à vingt minutes. La concentration moyenne maximale est, quant à elle plus élevée (17,4 % contre 16,5 %). Ceci est à mettre en relation avec les vitesses qui sont plus élevées et qui accentuent le drainage de soluté de la zone pâteuse vers le canal principal puis du canal principal vers le bain liquide.

### **C.2.3 : Conclusion partielle sur l'influence du brassage sur la solidification.**

Les simulations réalisées avec différentes configurations de brassage tendent toutes à montrer l'importance de l'écoulement liquide et donc du brassage électromagnétique sur la solidification. En effet, celui-ci fixe les cartes de composition et de fraction liquide. Plus encore, il joue un rôle de pilote au niveau du positionnement du ou des canaux ségrévés éventuels. Il permet aussi (à cause des vitesses plus élevées) une homogénéisation du bain liquide plus rapide. Il tend aussi à augmenter le différentiel de concentration entre la valeur la plus basse et la valeur la plus élevée, et donc à réduire la fraction liquide la plus basse. Si cet effet n'est pas très important, il est toutefois notable, et devient plus important lorsque les vitesses de brassage augmentent. En revanche, le brassage ne semble pas accélérer ou retarder de manière notable, à l'échelle du domaine, la solidification ou la progression du macrofront.

A noter que si l'effet Joule créé par les inducteurs est ici négligeable, cela peut ne pas être le cas si l'intensité des forces magnétiques appliquées devient supérieure. L'intensité de l'effet Joule est en effet directement liée à l'intensité de la force de Laplace-Lorentz. Ce point est à ne pas ignorer lors de l'utilisation de brassages plus conséquents.

## **C.3 : De la bidimensionnalité à la tridimensionnalité.**

### **C.3.1 : Géométrie, conditions aux limites et conditions initiales.**

#### *C.3.1.a : Quelle géométrie ?*

Le domaine se présente désormais sous la forme d'un barreau cylindrique de diamètre dix millimètres et de hauteur vingt millimètres. Une telle configuration a été choisie afin d'avoir une géométrie proche de celle étudiée dans le projet MICAST (cf. note introductive de ce chapitre). La gravité est orientée suivant l'axe vertical. Le système de coordonnées est un système cartésien  $(x, y, z)$ . Le maillage qui sera utilisé comportera 10.000 cellules, disposées régulièrement sur la face latérale. Cf. figure C-25.

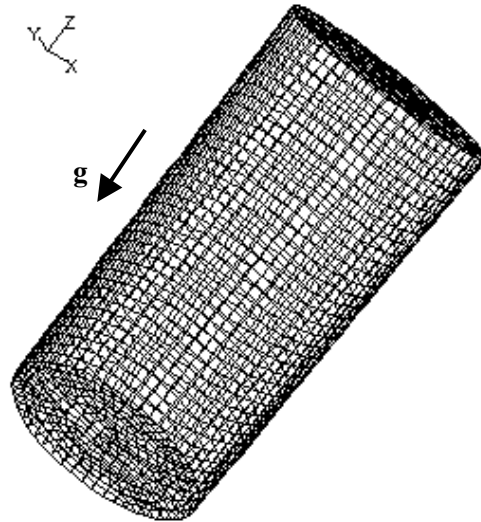


Figure C-25 : Maillage, géométrie du barreau et orientation de la gravité.

*C.3.1.b : Conditions initiales.*

On fixera, invariablement, les conditions initiales suivantes à l'alliage métallique contenu dans le domaine cylindrique décrit précédemment (cf. figures C-26 et C-27) :

Vitesses initiales : Les vitesses (composantes  $u$ ,  $v$  et  $w$ ) sont nulles sur l'ensemble du domaine.  $u = v = w = 0$  (liquide au repos).

Fraction liquide initiale : La température initiale minimale du domaine étant la température de fusion de l'alliage considéré, la fraction liquide est initialement fixée à 1.

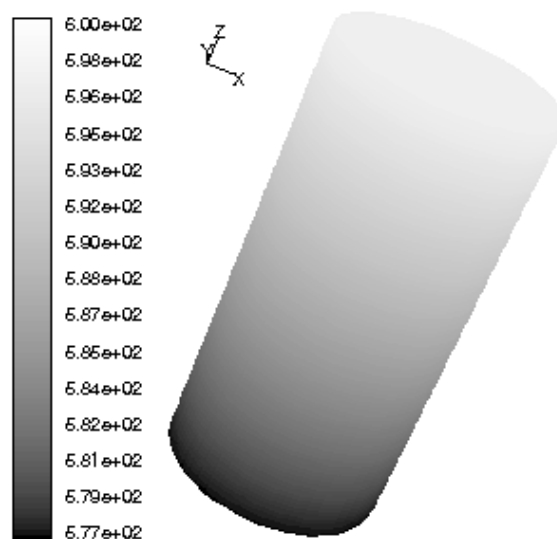


Figure C-26 : Carte de température initiale. [ $T_{min} = 577,4 K$  ;  $T_{max} = 597,4 K$ ].

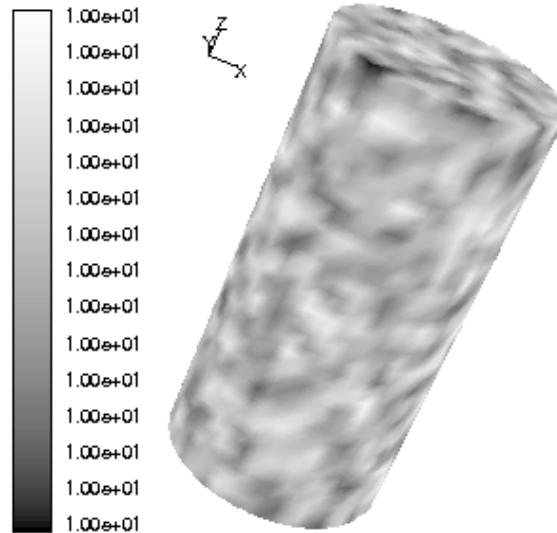


Figure C-27 : Carte de concentration initiale.  $C(x, y, z) = C_0 \pm 0.0005C_0$  avec  $C_0 = 10 \%$ .

Température initiale : La répartition de température initiale suit une loi linéaire fonction de la hauteur.

$$T(x, y, z) = T_0 + GTU.z = T_L(C_0) + GTU.z \quad (C.31)$$

$T_0$  est une température de référence que l'on prendra égale à la température de liquidus de l'alliage à la composition  $C_0$  considérée (i.e.  $T_L(C_0)$ ),  $GTU$  un gradient de température de  $1000 \text{ K.m}^{-1}$ .

Composition initiale : De même que dans les cas à deux dimensions, une composition inhomogène est initialement appliquée afin d'initier des mouvements de convection naturelle, par effet solutal, la configuration thermique étant stabilisante.

$$C(x, y, z) = C_0 \pm 0.0005C_0 \quad (C.32)$$

### C.3.1.c : Conditions aux limites.

- (i) Les vitesses sont nulles sur les parois.
- (ii) Les parois verticales sont adiabatiques.
- (iii) Sur la paroi inférieure, on applique un refroidissement lent ( $V_r = 1 \text{ K.mn}^{-1}$ ) qui prend la forme suivante :

$$T(t) = T_L(C_0) - V_r \frac{t}{60} \quad \text{où } T \text{ est la température en Kelvin et } t \text{ le temps en secondes.} \quad (\text{C.33})$$

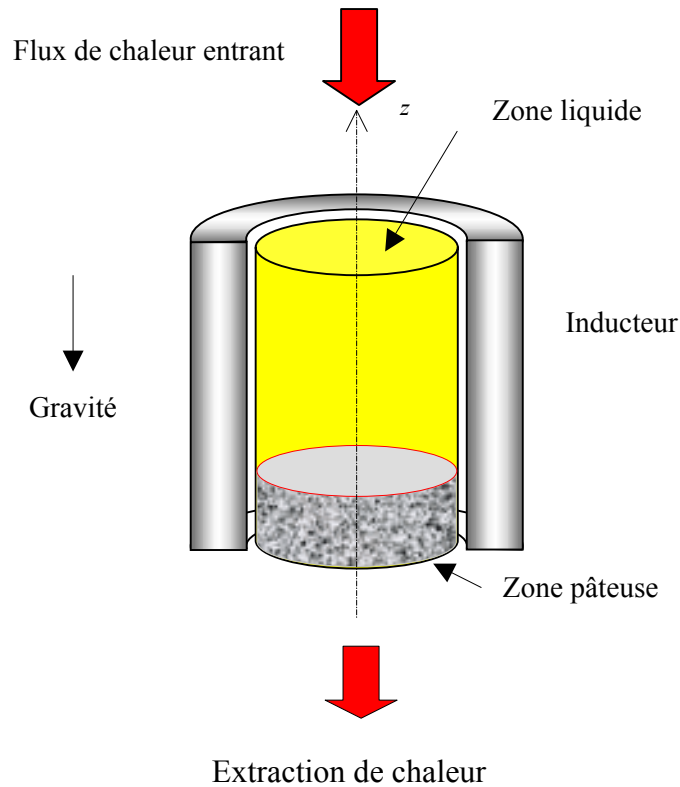


Figure C-28 : Configuration géométrique (avec un inducteur).

- (v) Sur la paroi supérieure, on applique un gradient entrant de température de  $1000K/m$  :
- (vi) Pas de transfert de soluté au niveau des parois.

### C.3.2 : Des cheminées en convection naturelle...

Désignation :	<i>PbSn Conv. Nat. 3D.</i>
Maillage :	<i>10.000 cellules..</i>
Pas de temps :	<i>0,03 seconde.</i>
Schéma temporel :	<i>1<sup>er</sup> ordre.</i>
Correction de pression	<i>PRESTO.</i>
Couplage Pression-Vitesse :	<i>SIMPLE C.</i>
Schémas spatiaux :	<i>2<sup>nd</sup> ordre décentré amont.</i>
Durée de simulation :	<i>1410 secondes.</i>
Perméabilité :	<i>Isotrope continue.</i>

Les résultats qui vont suivre correspondent à un cas de solidification en convection naturelle. Ce cas est le pendant du cas présenté dans le paragraphe C.1.3, tridimensionnalité mise à part. Les isothermes restent des plans horizontaux. Les résultats sont présentés figures C-29 à C-33.



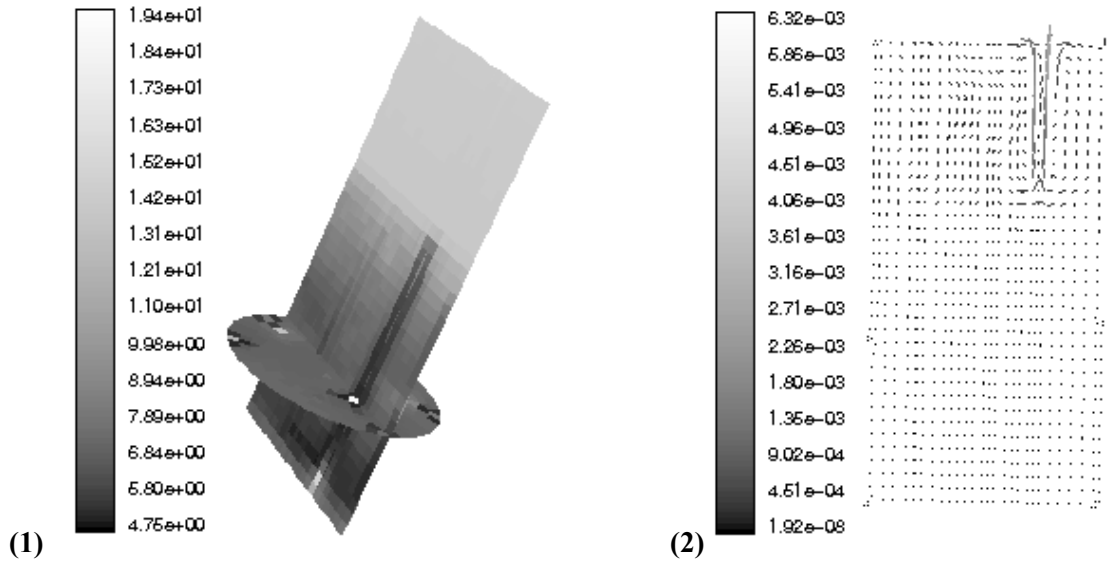


Figure C-29 : (1) Carte de concentration moyenne sur une coupe verticale diamétrale et une tranche.  
(2) Champ de vitesse sur une coupe verticale diamétrale.

Durée de simulation : 1410 secondes.

Les ségrégations y sont visibles sous la forme de canaux isolés dits « cheminées ». Un tel nom est à relier aux panaches de soluté en sortie de canaux dans le bain liquide. De tels résultats sont conformes aux résultats numériques obtenus par Felicelli [24] et aux résultats expérimentaux obtenus par Giamei et al. [44] ou Hellawell et al. [53]. Ces canaux ségrégés sont visibles sur la métallographie figure C-32, métallographie réalisée sur un alliage Plomb-Etain dans une géométrie relativement similaire.

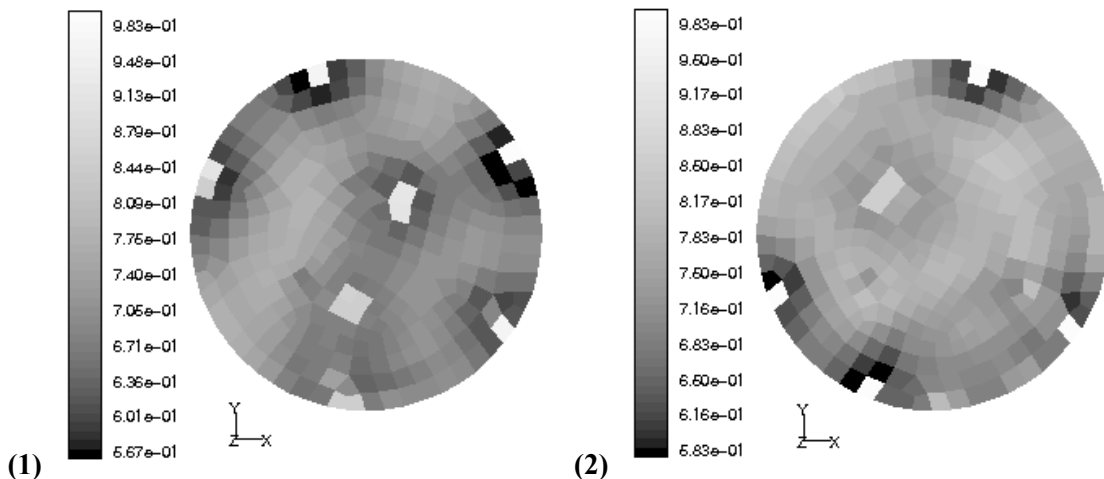


Figure C-30 : Tranches effectuées en zone pâteuse à  $t = 150 \text{ s}$  et  $h = 1 \text{ mm}$ . Cartes de fraction liquide.

- (1) Tranche correspondant au calcul présenté (PbSn Conv. Nat. 3D) [ $f_{l \min} = 0,58$  ;  $f_{l \max} = 1$ ] ;  
(2) Tranche correspondant à une concentration initiale différente [ $f_{l \min} = 0,57$  ;  $f_{l \max} = 1$ ].

On distingue aisément sur la figure C-29 que le rejet de soluté par les canaux fixent, comme dans l'ensemble des cas bidimensionnels précédents, l'écoulement dans la zone liquide. De par le drainage de soluté qui s'opère en zone pâteuse et vers les canaux (perméabilité plus élevée), la concentration moyenne est plus faible dans les zones périphériques aux canaux. Consécutivement, la fraction liquide est plus faible dans ces mêmes zones. Sur les tranches présentées figure C-30, les mêmes phénomènes sont observables. La première tranche (figure C-30-(1)) correspond au calcul présenté figure C-29. Elle est effectuée à  $t = 150$  s de simulation et à une hauteur de un millimètre depuis la base. La seconde tranche présentée (figure C-30-(2)) correspond à la même tranche mais effectuée sur un calcul différent : la composition initiale aléatoire (cf. paragraphe C.3.1.b) n'est pas la même. La répartition et le nombre de canaux en sont modifiés. Les mêmes calculs menés avec un pas de temps de  $0,05$  s au lieu de  $0,03$  s conduisent à des conclusions identiques et aux mêmes résultats. Contrairement aux cas bidimensionnels, il semblerait que l'initialisation en composition ait une influence sur le nombre et la répartition des canaux. L'espace minimal entre canaux semble quant à lui inchangé dans les différents calculs.

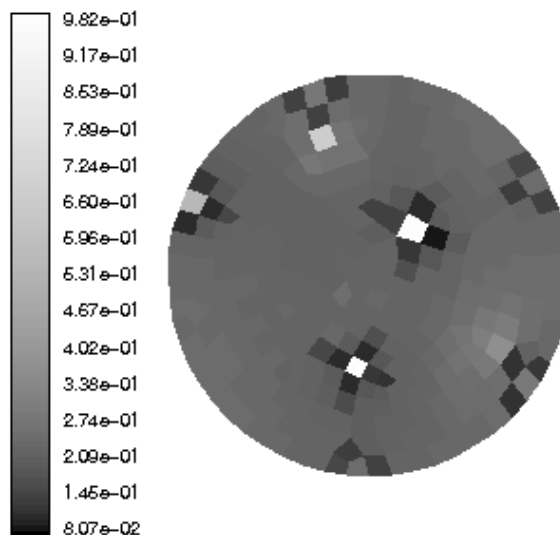


Figure C-31 : Carte de fraction liquide sur une tranche effectuée dans la zone pâteuse.

Durée de simulation : *1410 secondes.*

Il est intéressant d'estimer un espacement moyen minimal entre canaux entre d'une part la simulation numérique, d'autre part la métallographie figure C-32. Toutefois, sur la métallographie, il est difficile de discerner les canaux latéraux de par les effets d'ombre, ce qui tend à fausser les estimations. Si l'on se limite au plus proche voisin, nous avons un espacement moyen minimal de  $3,2$  mm pour la simulation contre  $6,5$  mm pour la métallographie, soit environ un rapport deux. Il est difficile d'en tirer une conclusion, mais on note cependant que les espacements sont du même ordre de grandeur. Il serait intéressant, dans le cadre de la poursuite de ce travail, d'effectuer différentes

simulations à diamètre variable et à maillage plus fin. En effet, certains canaux de diamètres plus petits sont peut être « gommés » par ce dernier.

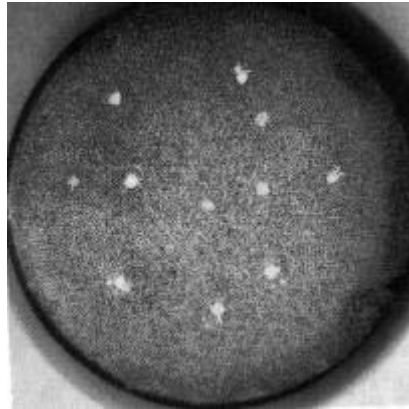
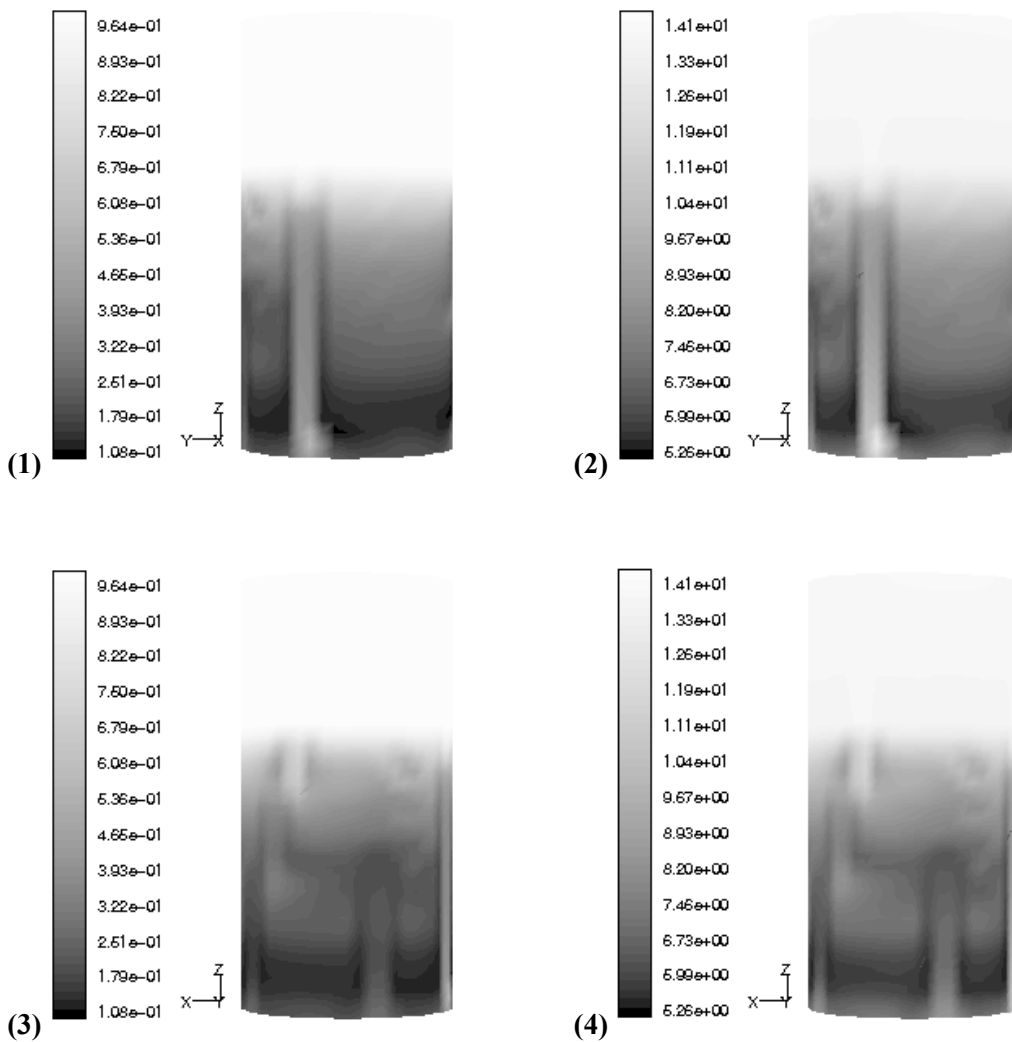


Figure C-32 : Canaux ségrévés dans un alliage Plomb-Etain. Diamètre 38 millimètres.  
J.R. Sarazin et A. Hellawell [83].



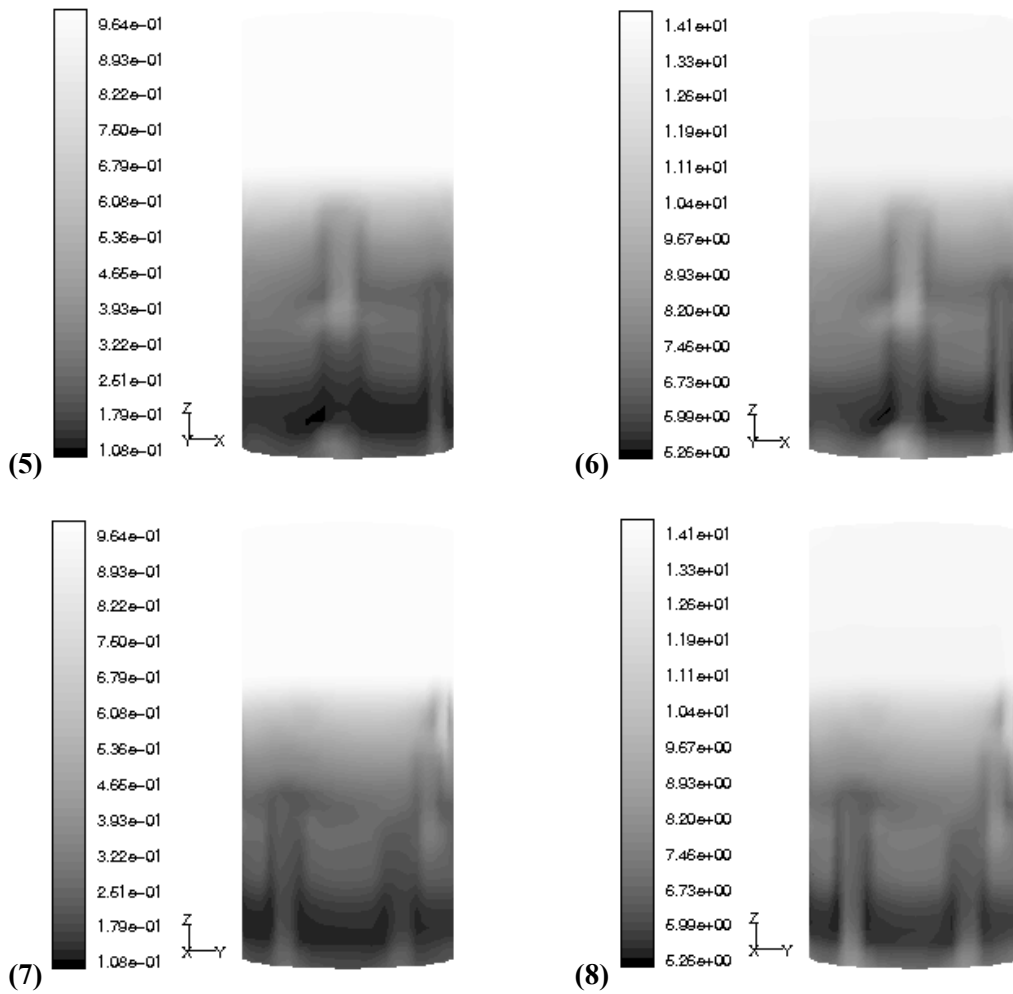


Figure C-33 : Vues extérieures du cylindre. Cartes de fraction liquide et de concentration moyenne.  
Temps de simulation  $t = 1350$  secondes.

$$[f_{l \min} = 0,1 ; f_{l \max} = 1] ; [C_{m \min} = 5,2 \% ; C_{m \max} = 14,1 \%].$$

Dans nos simulations, nous avons une prédominance de canaux latéraux, comme observable sur les figures C-30 et C-31. On peut également observer, au cours de différentes simulations, que certains canaux tendent à disparaître. Par exemple, lorsque deux canaux sont trop proches, l'un disparaît au profit de l'autre. Ceci conforte l'idée d'espacement minimal entre canaux. Celui-ci doit certainement correspondre à un espace de drainage dans la zone pâteuse nécessaire à l'alimentation en soluté. S'il est question de drainage, il est question de perméabilité. La perméabilité employée a-t-elle un rôle direct sur l'espacement (et donc le nombre de canaux) ? Là encore, dans les perspectives de travail, il serait intéressant de mener une telle étude.

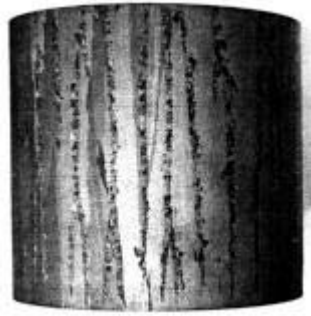


Figure C- 34 : Canaux ségrégués dans un alliage à base Nickel.  $\varnothing = 100 \text{ mm}$ .

A.F. Giamei et B.H. Kear [44].

### C.3.3 : ... au canal central en convection forcée.

Désignation :	<i>PbSn Rotatif 3D.</i>
Maillage :	<i>10.000 cellules..</i>
Pas de temps :	<i>0,03 seconde.</i>
Schéma temporel :	<i>1<sup>er</sup> ordre.</i>
Correction de pression	<i>PRESTO.</i>
Couplage Pression-Vitesse :	<i>SIMPLE C.</i>
Schémas spatiaux :	<i>2<sup>nd</sup> ordre décentré amont.</i>
Durée de simulation :	<i>2100 secondes.</i>
Perméabilité :	<i>Isotrope continue.</i>
Conditions particulières :	<i>Brassage rotatif. <math>F_0 = 50 \text{ N.m}^{-3}</math>.</i>

Un brassage rotatif est désormais superposé à la convection naturelle du cas précédent. L'intensité de la force magnétique correspondante est de  $50 \text{ N.m}^{-3}$ , c'est à dire bien inférieure à celle des champs glissants imposés précédemment dans les cas bidimensionnels. Pour rappel, la force de Lorentz appliquée est considérée constante le long de l'axe  $z$ .

Elle n'engendre pas directement de re-circulations méridiennes. Les résultats sont montrés figures C-35, C-36, C-38 et C-39. Comme attendu, l'écoulement en zone liquide est essentiellement rotatif (cf. figure C-35). Les vitesses ont une valeur typique de  $8 \text{ mm.s}^{-1}$ . Quoiqu'il en soit, des re-circulations (méridiennes) peuvent tout de même être observées dans la zone liquide (cf. figure C-36). Celles-ci sont imputables au pompage d'Eckman, au voisinage du front de solidification. L'amplitude de l'écoulement est quant à elle dans le même ordre de grandeur que dans les cas à champ magnétique glissant, alors que l'amplitude de la force magnétique appliquée est vingt fois inférieure. Pour une amplitude donnée, la force électromagnétique est plus efficace pour engendrer une re-circulation.

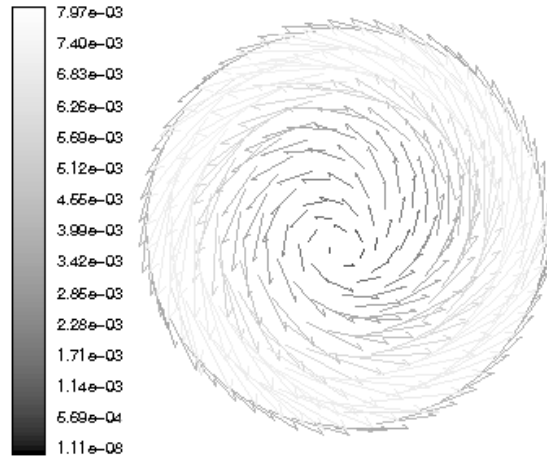


Figure C- 35 : Champ de vitesse dans le bain liquide.

Durée de simulation : 2100 secondes.  $V_{max} \sim 8 \text{ mm.s}^{-1}$ .

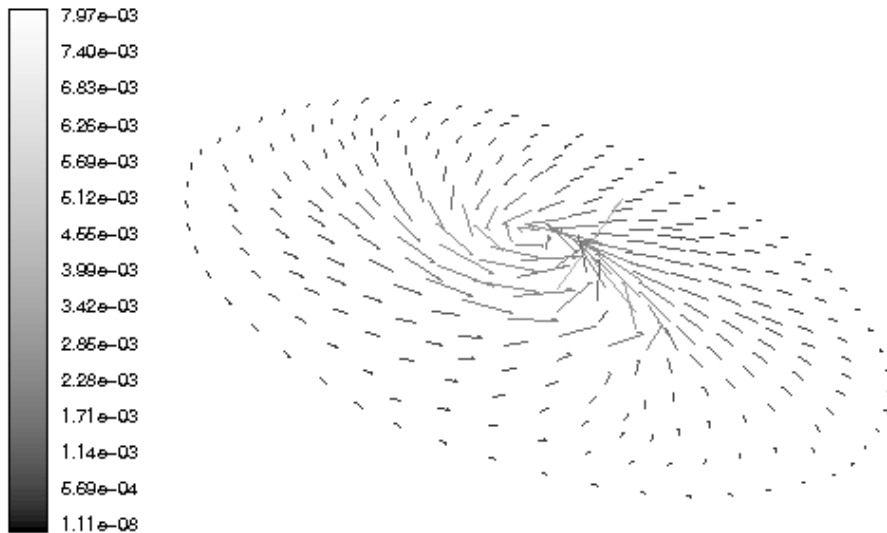


Figure C-36 : Champ de vitesse à proximité du front de solidification.

Durée de simulation : 2100 secondes.  $V_{max} \sim 8 \text{ mm.s}^{-1}$ .

En zone pâteuse, on peut observer que l'écoulement est principalement radial, de la paroi latérale vers le centre du lingot. Ceci découle du couplage avec la pression entre la zone liquide et la zone pâteuse. En effet, consécutivement à la centrifugation, il existe des zones de hautes pressions dans le liquide à proximité du front de solidification et de la paroi latérale. Ces fortes pressions « poussent » le liquide à travers la zone pâteuse vers les zones de plus basses pressions, c'est à dire le centre du lingot (cf. figure C-37). La composante azimutale de la vitesse ne devient significative que dans le canal ségrégué où la perméabilité devient, elle, non négligeable. L'écoulement ne présente toutefois pas une symétrie centrale parfaite. Un léger décalage est visible qui rejaillit sur les cartes de concentration. Cela peut être dû à la « grossièreté » du maillage dans les tranches horizontales.

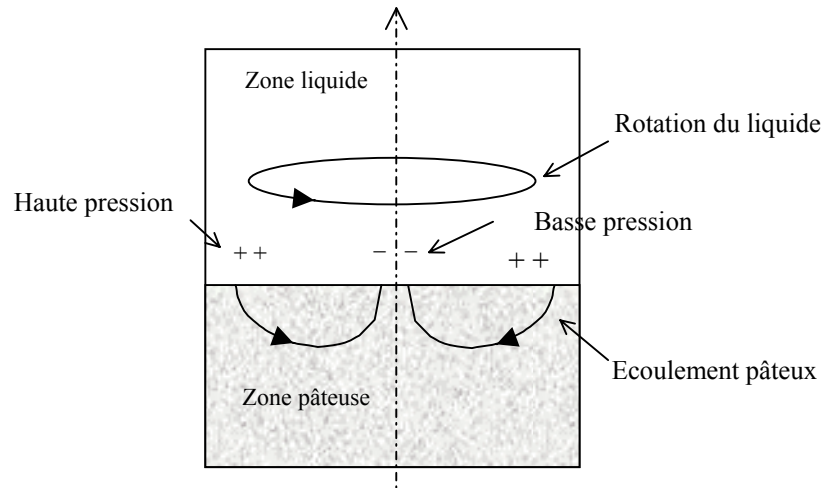


Figure C- 37 : Schéma du mécanisme des pressions qui dirige l'écoulement en zone pâteuse.

Sur le plan des ségrégations, les canaux isolés ont laissé place à un large canal plus ou moins central correspondant à l'écoulement qui s'est mis en place dans la zone pâteuse : effet de lavage et drainage du soluté dus à l'écoulement radial. Le canal n'est pas tout à fait central : on observe aisément sa position au niveau de la tranche présentée figure C-38. Un effet de maillage n'est pas à écarter. De même que dans les cas bidimensionnels examinés précédemment, on observe un lien étroit entre champ magnétique et position ou nombre des canaux ségrégés. Cela conforte le rôle de « pilote de ségrégation » des brassages électromagnétiques et ceci même avec des champs plus complexes tels que le champ rotatif présenté.

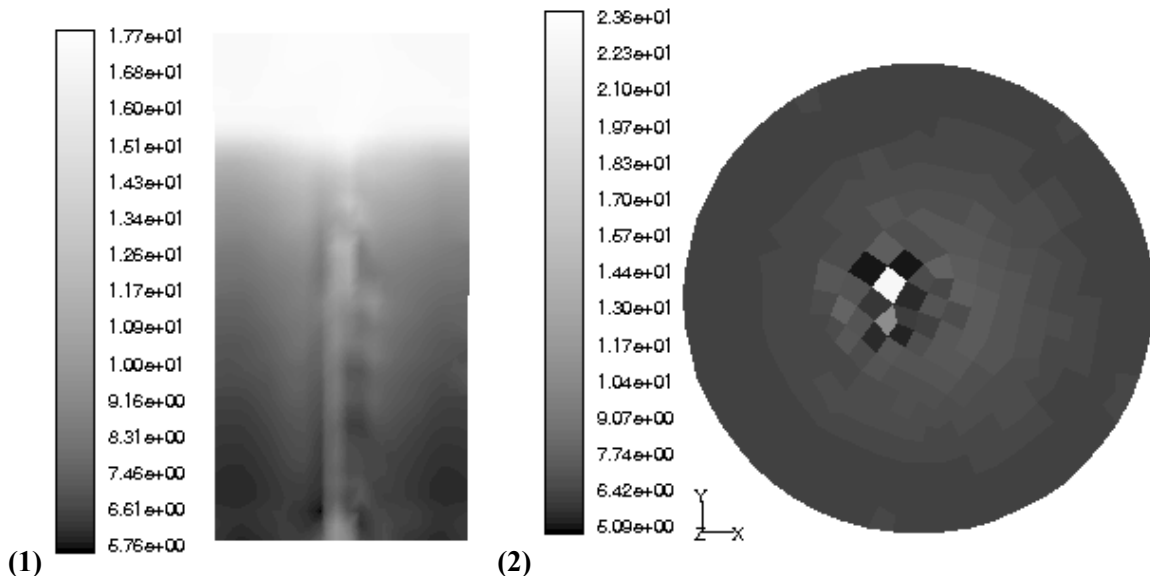


Figure C-38 : Cartes de concentration moyenne.  $t = 2100$  s.

(1) sur une coupe diamétrale [ $C_{m \min} = 5,76 \%$  ;  $C_{m \max} = 17,7 \%$ ].

(2) sur une coupe horizontale à une hauteur de  $5$  mm [ $C_{m \min} = 5,09 \%$  ;  $C_{m \max} = 23,6 \%$ ].

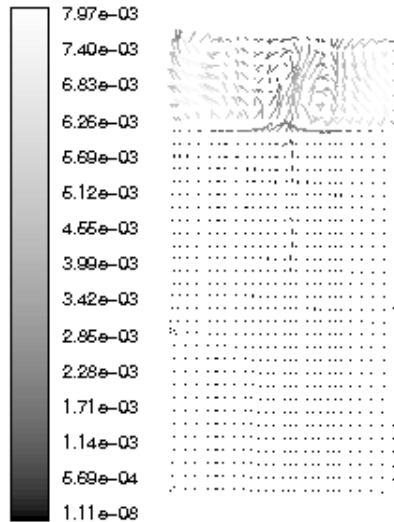


Figure C-39 : Champ de vitesse dans une coupe diamétrale à  $t = 2100$  secondes.  $V_{max} \sim 8 \text{ mm.s}^{-1}$ .

#### C.4 : Conclusion partielle.

Les résultats présentés tout au long de ce chapitre ont permis de mettre en évidence avantages et limites du code programmé dans le logiciel FLUENT. Cela a également permis d'effectuer une validation partielle du code, au regard de la cohérence physique des résultats et de comparaisons qualitatives avec d'autres codes de calcul. La présence de fluctuations sur la vitesse a été mise en évidence et reliée aux ondes de gravité. Plus précisément, la sensibilité du code vis à vis de l'ordre du schéma de calcul, de la taille du maillage a été examinée afin de faire des choix pour la suite des calculs effectués, i.e. un pas de temps de  $30 \text{ ms}$  pour l'ensemble des calculs, un maillage  $20 \times 40$  pour les calculs sur le petit domaine rectangulaire.

Ces choix faits, l'influence de la convection forcée par champ électromagnétique a été étudiée dans différentes configurations de brassage, tant en deux dimensions qu'en trois dimensions. Le rôle de « pilote de position des canaux » du brassage électromagnétique a été conforté par l'ensemble des calculs menés : le brassage n'élimine pas les ségrégations mais les déplace. Le nouveau positionnement des ségrégations dues au brassage électromagnétique est alors entièrement prédictible. La non-prise en compte (dans nos calculs) de l'échauffement provoqué par les inducteurs par effet Joule a été justifié par la simulation.

Le code implanté n'est pas complet dans le sens où la solidification eutectique n'est pas prise en compte. En revanche, les résultats obtenus avant d'atteindre la température eutectique sont riches d'enseignements et offrent de grandes perspectives, surtout dans l'aspect tridimensionnel : on peut observer, dans le cas du barreau cylindrique traité, une répartition aléatoire de canaux ségrévés verticaux avec une préférence pour la proximité des parois latérales. Le positionnement des canaux n'est d'ailleurs pas systématiquement identique si l'on change la répartition aléatoire de concentration



initiale. C'est une différence très notable avec les cas bidimensionnels qui se révèlent être déterministes. De plus, on peut observer que certains canaux, lorsqu'ils sont trop proches les uns des autres, ont tendance à disparaître comme s'il existait une distance minimale entre canaux pour que ceux-ci soient viables. Cette distance minimale pourrait correspondre à la délimitation d'une zone de drainage de soluté afin d'alimenter les canaux ségrégués. En effet, sur des calculs à l'initialisation en concentration différente, on peut remarquer que, même si la répartition change, l'espacement moyen entre les canaux, lui, ne varie pas. Il serait intéressant de mener une étude statistique sur des diamètres de cylindres différents afin d'essayer d'établir une éventuelle loi de dépendance entre rayon du cylindre et espacement entre canaux, nombre de canaux... Dans cet état de fait, l'utilisation d'un brassage électromagnétique prend toute son importance car il permet de passer d'un positionnement aléatoire des canaux ségrégués à un positionnement déterminé (en l'occurrence proche du centre du cylindre pour un brassage rotatif). Poursuivre cette étude avec d'autres champs magnétiques et donc d'autres formes d'écoulements, permettrait de compléter les résultats obtenus.

## Partie D

# Description et conception du Benchmark

Une expérimentation, quelle qu'elle soit, est un compromis entre un objectif, une configuration théorique, des conditions et des solutions techniques mais surtout des limitations techniques...etc. A contrario, en modélisation numérique, il est un certain nombre de contraintes qu'il est aisé de faire disparaître d'un simple « clic de souris ». En partant de ce constat, le but de cette expérience de validation est d'élaborer une expérimentation qui puisse apporter des informations utiles sur la solidification d'alliage métallique binaire et qui soient utilisables pour la validation de simulations numériques.

## D.1 : Comparer une expérience et une simulation, quelles contraintes ?

### D.1.1 : Une géométrie et une configuration adaptées.

#### D.1.1.a : Quelles dimensions pour quel alliage ?

Il est nécessaire, avant toute chose de définir la géométrie de l'échantillon à solidifier. Plusieurs facteurs entrent en jeu. On peut effectivement observer une prédominance de la bidimensionnalité dans les codes de modélisation de la solidification. Les dimensions doivent, autant que faire se peut, tenir compte de cet aspect afin d'avoir une configuration qui soit quasi-2D. Evidemment, il s'agit d'une hypothèse de travail sur l'expérience qui ne peut être vérifiée qu'a posteriori..

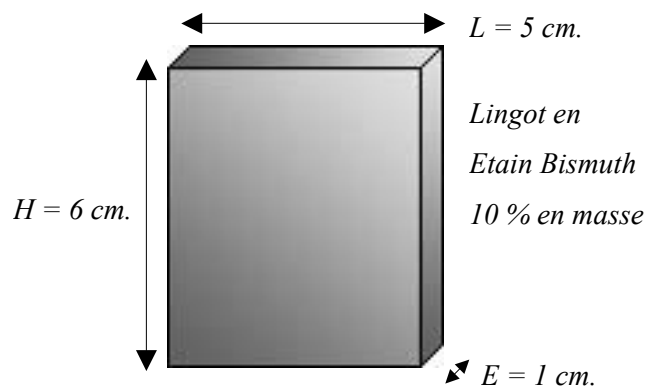


Figure D-1 : Géométrie de l'échantillon.

De plus, la configuration doit favoriser l'apparition du phénomène physique que nous désirons observer : les canaux ségrévés. L'alliage choisi doit également permettre l'apparition de freckles. Il doit être suffisamment connu pour avoir des données physiques accessibles dans la littérature, ne pas présenter de contraintes techniques trop pénalisantes (haut point de fusion, toxicité...). Ainsi, la configuration choisie après une brève étude numérique sur SOLID [21], correspond à un petit lingot de six centimètres de haut, cinq de long et un d'épaisseur (cf. figure D-1). Une épaisseur de un centimètre est un compromis entre un lingot trop fin, où les effets de bords seraient trop conséquents, et un trop

épais qui sortirait de notre approximation de quasi bidimensionnalité. L'alliage, quant à lui, est un Etain-Bismuth 10 % en masse. La basse température de liquidus de l'alliage ( $\sim 216$  °C) permet de simplifier les conditions techniques expérimentales.

#### D.1.1.b : Quelle configuration ?

La configuration de solidification choisie correspond à un domaine aux parois adiabatiques, à l'exception d'une paroi qui permet la fusion ou la solidification de l'échantillon. La gravité est verticale. Ainsi, le bismuth étant plus lourd que l'étain, on peut prévoir l'apparition de ségrégations dans la partie inférieure du lingot.

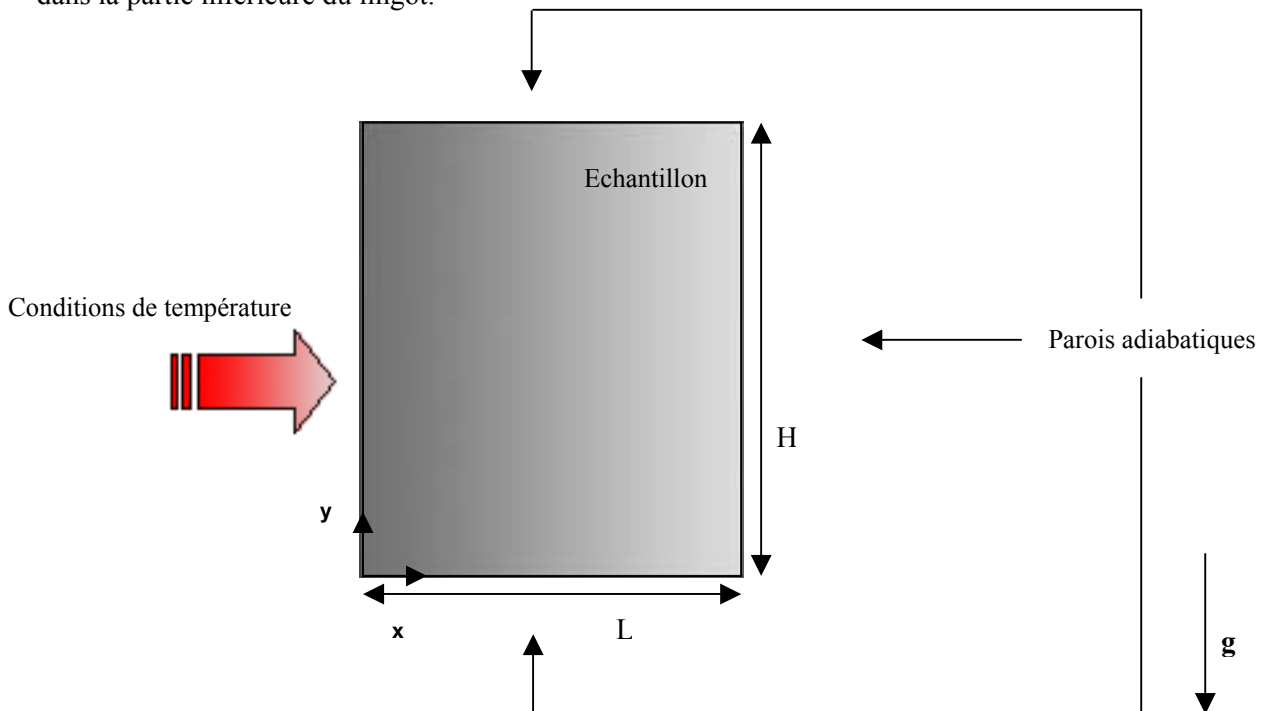


Figure D-2 : Configuration de l'expérience.

#### D.1.2 : Description générale du dispositif expérimental.

On peut décomposer l'ensemble du dispositif expérimental (cf. figure D-3) en quelques parties essentielles qui correspondent à des problématiques différentes. Chacune d'entre elles fera l'objet des paragraphes suivants.

- L'échangeur thermique en cuivre qui permet d'assurer la fusion et la solidification du lingot. Ce système contribue à l'unidirectionnalité du flux de chaleur extrait.
- Le creuset et le système de régulation thermique permettant d'assurer son adiabaticisme (boîte de Kirchhoff).

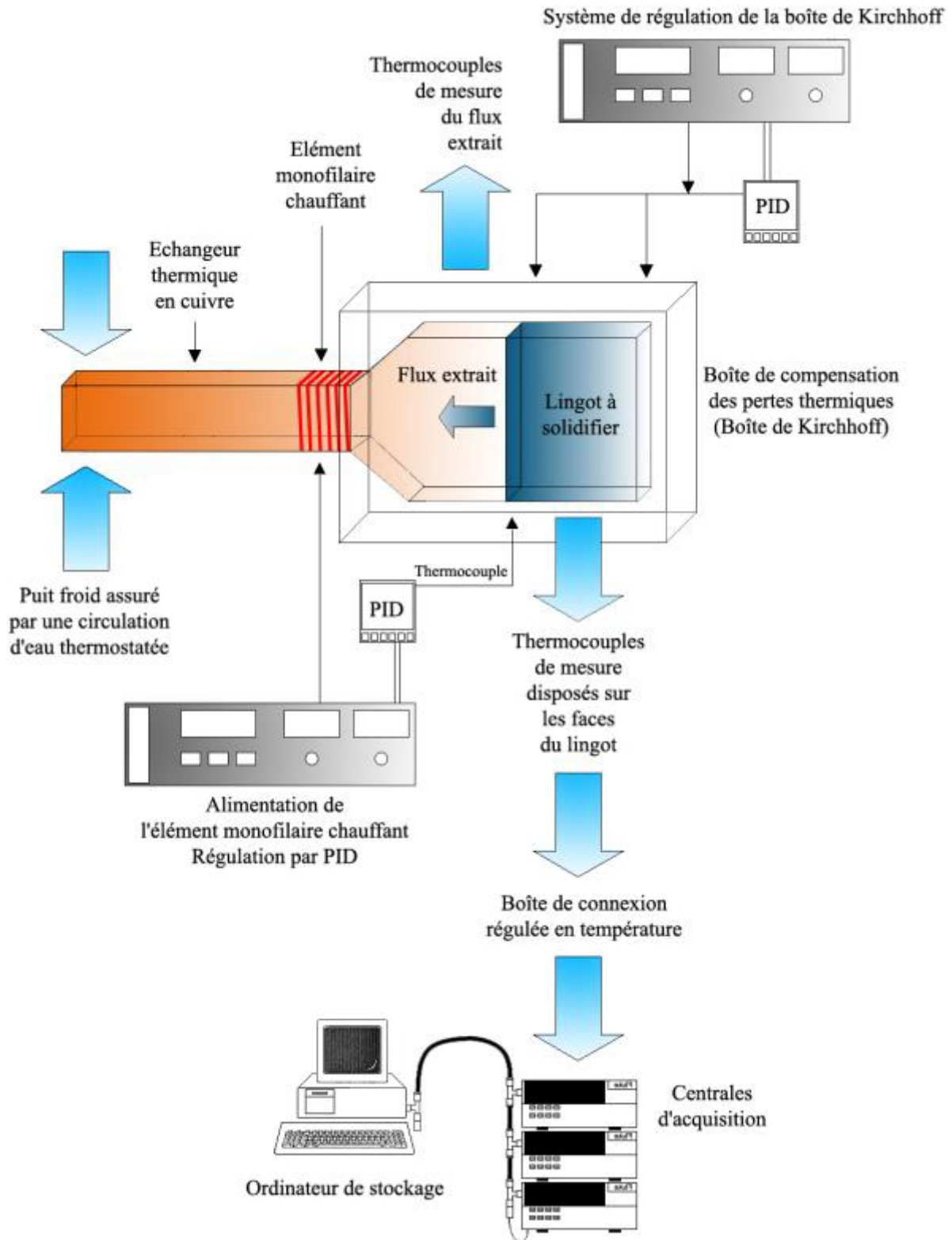


Figure D-3 : Schéma d'ensemble du dispositif expérimental.

- Un système de refroidissement à base d'eau thermostatée qui permet l'extraction de chaleur durant la solidification de l'échantillon ainsi que le maintien à température constante de la boîte de connexion entre les thermocouples et la chaîne d'acquisition.

- La chaîne de mesure qui part de l'échantillon et de l'échangeur cuivre jusqu'aux centrales d'acquisition et l'ordinateur de contrôle.

## **D.2 : Assurer un refroidissement contrôlé.**

L'extraction de chaleur se fait par l'intermédiaire de la paroi gauche du lingot (cf. figure D-2). Cette paroi doit être de température uniforme. Elle assure le refroidissement et la solidification du lingot. Il est important que l'extraction ne se fasse que par celle-ci afin d'avoir un flux le plus unidirectionnel possible, sachant qu'il ne peut pas l'être rigoureusement compte tenu des conditions aux limites (cf. figure D-4). Cette face doit également permettre la fusion préliminaire des échantillons. Un contrôle strict de la température de la face d'échange thermique et du flux extrait doit avoir lieu. Cela est rendu possible par la grande conductibilité thermique du cuivre qui sera utilisé pour réaliser l'échangeur représenté figures D-5 et D-6, échangeur chargé de satisfaire ces contraintes. Le choix du cuivre n'est pas anodin car il pose des contraintes chimiques (interaction du cuivre avec l'étain). Thermiquement, ce choix est indispensable. La neutralité chimique est assurée par la pulvérisation d'une mince couche de nitrure de bore sur la face de l'échangeur. Complètement à gauche, se trouve une gorge parcourue par un écoulement d'eau thermostatée (cf. paragraphe D.4). Cette zone constitue un puits froid qui permet d'extraire de la chaleur de l'ensemble du dispositif lorsque nécessaire. L'eau, couplée au cuivre, permet d'avoir des échanges thermiques optimaux. Suit une zone permettant la fixation de l'ensemble sur son support. Vient une seconde gorge qui est parcourue par une résistance chauffante. Il s'agit d'un élément monofilaire, de diamètre  $1,5\text{ mm}$ , à extrémités froides afin de déporter les connecteurs vers une zone moins élevée en température. L'enceinte comprenant l'ensemble du dispositif étant sous vide, cette déportation est importante pour éviter une surchauffe des connecteurs et de la partie de la résistance chauffante qui ne serait pas en contact avec le cuivre (les échanges thermiques ne pouvant avoir lieu que par rayonnement). Cette surchauffe peut être destructrice pour les connecteurs. La gaine de cet élément chauffant est en inox, lequel est directement brasé dans la gorge, à l'aide d'argent, en assurant le meilleur contact thermique possible entre la résistance et l'échangeur pour optimiser les transferts de chaleur. Cette résistance est asservie à la consigne en température imposée à la paroi d'échange thermique avec le lingot à fondre ou solidifier. Cet asservissement a lieu par l'intermédiaire d'un PID relié à son alimentation. La paroi droite de l'échangeur est celle directement en contact avec le métal liquide (ou solide). La partie parallélépipédique qui la précède est la zone de contrôle de la température et de la mesure du flux. En effet, cette zone est traversée de thermocouples, positionnés au cœur du cuivre (à mi-épaisseur). L'un d'eux (le plus proche de l'interface échangeur-échantillon) permet, par l'intermédiaire d'un PID, de contrôler la température de la paroi d'échange. Les différents autres thermocouples permettent, par

extrapolation, de vérifier la température à l'interface et de déterminer le flux extrait. La figure D-5 permet de visualiser les interactions entre l'échangeur et son environnement.

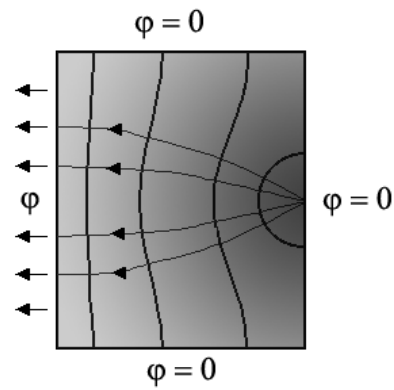


Figure D-4 : Schématisation de l'extraction unidirectionnelle du flux dans le lingot.

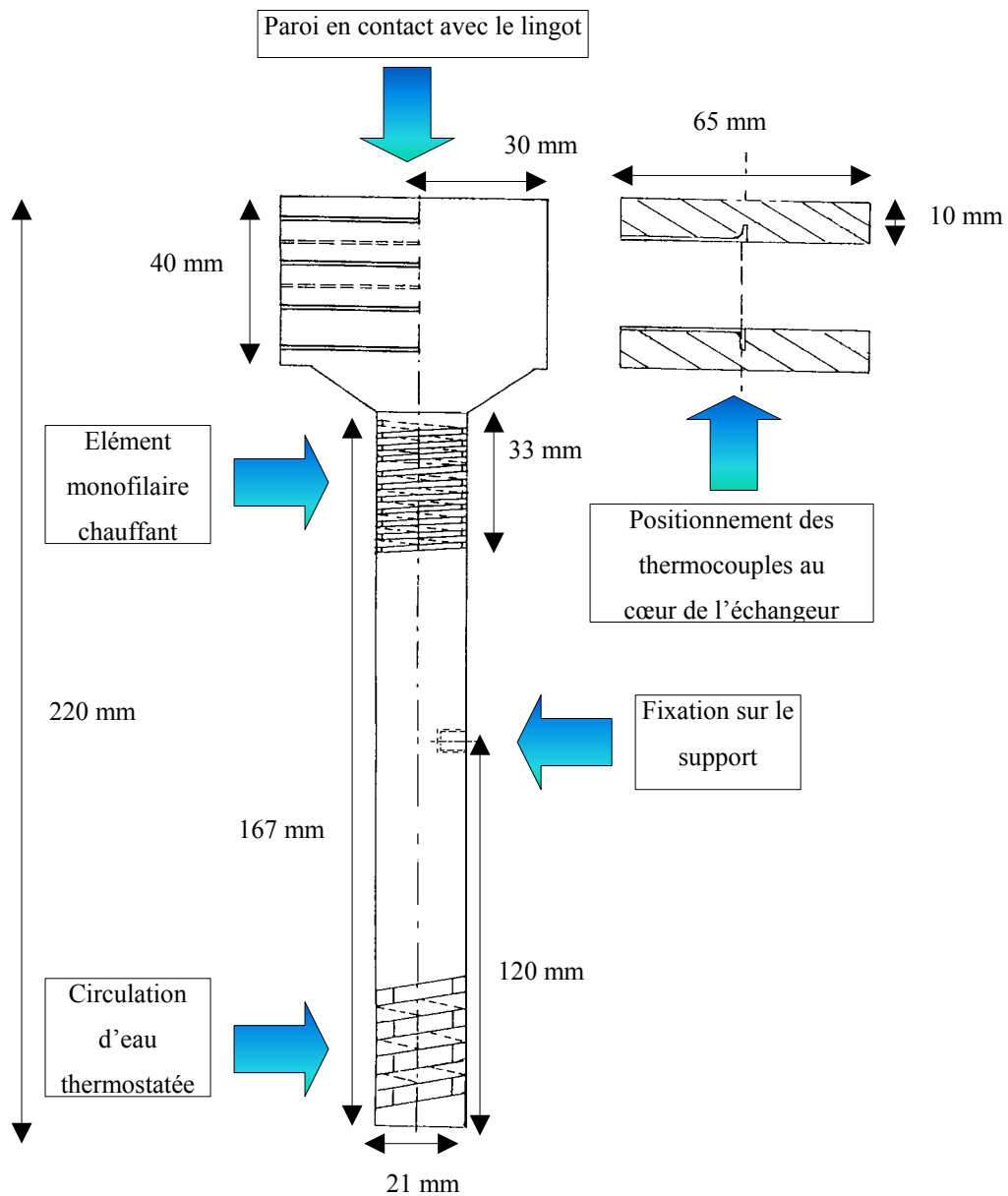


Figure D-5 : Schéma descriptif de l'échangeur cuivre.

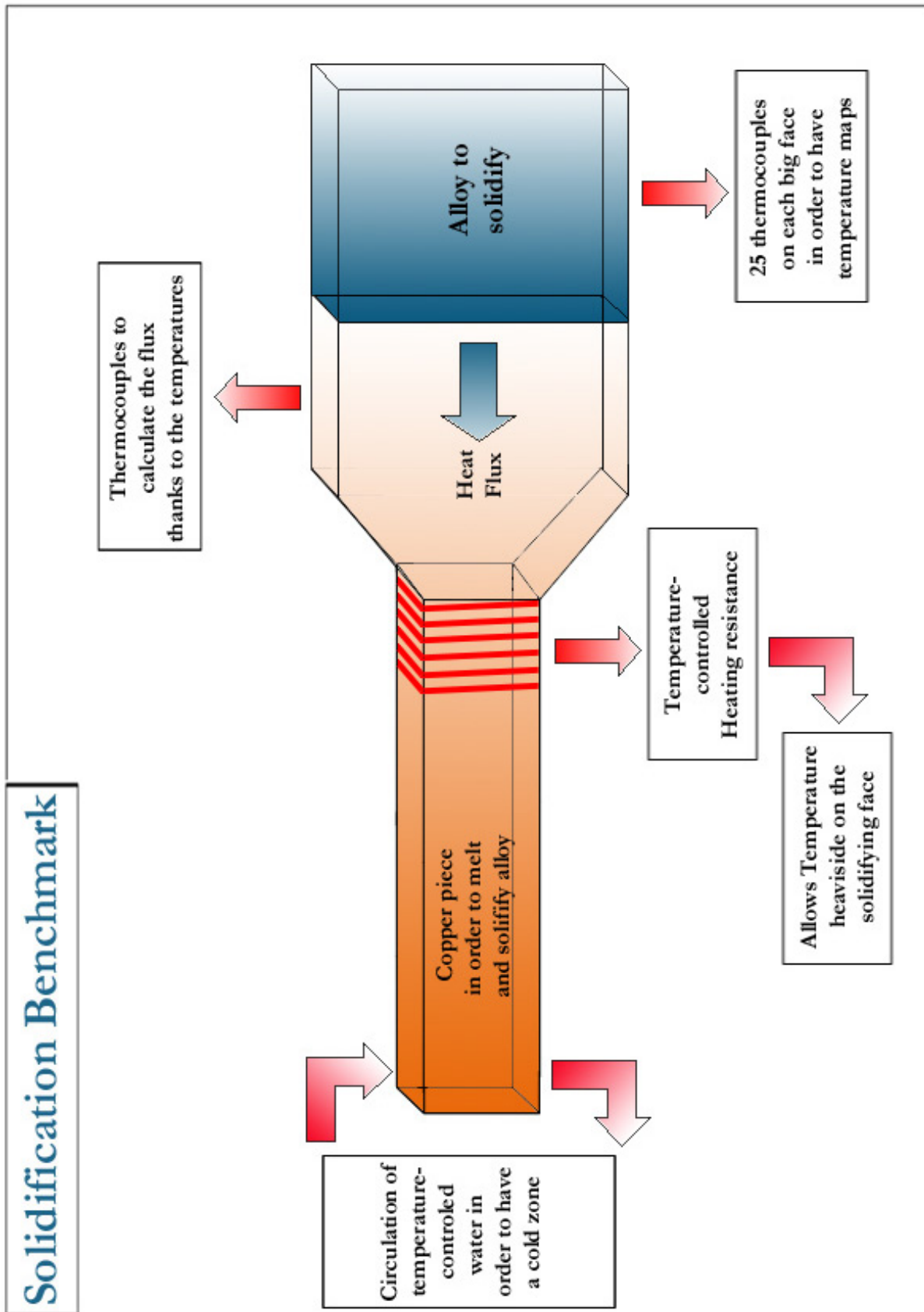


Figure D-6 : Environnement de l'échangeur thermique.



### D.3 : Un creuset virtuel et adiabatique.

#### D.3.1 : Quelle problématique ?

En simulation numérique usuelle, tout se passe comme si le creuset « n’existait pas ». Pratiquement, il faut tenir compte de sa présence, tant dans la capacité calorifique qu’il peut représenter que dans les conditions adiabatiques que l’on désirerait lui imposer.

#### D.3.2 : Quel constituant pour le creuset ?

Pour limiter les pertes thermiques, l’usage d’un isolant de type céramique semble convenable et être un choix « naturel ». Toutefois, un simple calcul d’ordre de grandeur montre que plusieurs centimètres d’isolant sont nécessaires pour minimiser les pertes thermiques. Le creuset possède alors une capacité calorifique conséquente compte tenu de la quantité de chaleur à extraire. En effet, l’échantillon représente une masse de 227 g. Pour un passage de 300 °C à 150 °C, par exemple, il faut extraire :

$$Q = m_{\text{lingot}} C_p \Delta T + m_{\text{lingot}} L = 22,13 \text{ kJ} \quad (\text{D.1})$$

Pour un environnement isolant en céramique (de type *Cotronics 902* par exemple) de un centimètre d’épaisseur tout autour du lingot, on a :

$$V_{\text{céramique}} = 114 \text{ cm}^3, m_{\text{céramique}} = 262 \text{ g}, C_{p \text{ céramique}} = 0,9 \text{ J.g}^{-1}.\text{K}^{-1}, \quad (\text{D.2})$$

soit une quantité de chaleur à extraire de  $Q = 35,4 \text{ kJ}$ .

De même, pour un creuset en monalyte,  $m_{\text{monalyte}} = 317,4 \text{ g}$ ,  $C_{p \text{ monalyte}} = 1,05 \text{ J.g}^{-1}.\text{K}^{-1}$  d’où une quantité de chaleur de  $Q = 17,4 \text{ kJ}$ , soit tout de même 79 % de la quantité de chaleur à extraire du lingot. Ainsi, si l’on envisage un creuset en céramique (quelle qu’elle soit), on ne peut s’affranchir de sa présence et de sa capacité calorifique. Au contraire, plus ses propriétés isolantes augmentent, plus sa capacité calorifique augmente. L’épaisseur du creuset pose le problème de l’unidirectionnalité de la solidification par la présence de gradients thermiques latéraux. Une autre solution doit être envisagée afin de minimiser l’existence du creuset et d’assurer son adiabaticisme.

Dans un premier temps, la capacité calorifique du creuset est minimisée en constituant ce dernier de plaques d’inox de cinq dixièmes de millimètre d’épaisseur, renforcées par deux entretoises

du même matériau, respectivement sur la partie basse et la partie droite du creuset (conformément à l'orientation présentée figure D-2). Cela représente 31 g d'inox, avec  $C_{p_{inox}} = 0,6 \text{ J.g}^{-1}.\text{K}^{-1}$ , une quantité de chaleur  $Q = 2,77 \text{ kJ}$ , soit 12,5 % de la quantité de chaleur à extraire du lingot seul.

Remarque : Le choix d'utiliser de l'inox est un compromis avec, d'une part, la résistance mécanique de l'ensemble supportant cinquante thermocouples brasés sur ses faces et, d'autre part, la neutralité chimique du creuset vis à vis du lingot (ceci afin d'éviter toute pollution).

### D.3.3 : Rendre le creuset adiabatique.

Le choix du creuset étant fait, il faut désormais résoudre le problème de l'adiabatisation. La première étape consiste à placer l'échantillon, le creuset et l'échangeur thermique dans une enceinte sous vide afin de réduire les pertes thermiques au simple rayonnement.

#### D.3.3.a : Les pertes thermiques par rayonnement.

Ces pertes peuvent être approchées par la loi de Stefan :

$$P = \sigma_{Stefan} \varepsilon S (T_1^4 - T_2^4) \quad (\text{D.3})$$

pour un corps 1 qui rayonne vers un corps 2 qui l'entoure complètement où  $\varepsilon$  est l'émissivité (0,8 pour l'inox),  $\sigma_{Stefan}$  la constante de Stefan qui vaut  $5,67.10^{-8} \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-4}$ ,  $S$  la surface rayonnante du corps 1,  $T_1$  et  $T_2$  les températures respectives (en Kelvin) des deux corps. Ainsi, si l'on considère le lingot à une température de 523 K (300 °C) et l'enceinte sous vide qui l'entoure à 293 K (20 °C), on a  $P = 23 \text{ W}$  pour le creuset en inox. Or, si l'on compare aux 22,13 kJ à extraire (pour un  $\Delta T = 150 \text{ °C}$ ), en un temps d'environ trente minutes, on a  $P = 12,29 \text{ W}$ . Il est donc crucial de réduire les pertes thermiques par rayonnement car, pour un refroidissement lent, elles sont presque deux fois supérieures à l'extraction. Conformément à la formule de Stefan, comme il nous est difficile de réduire la surface rayonnante, les deux paramètres sur lesquels nous pouvons agir sont l'émissivité et la température du corps 2.

Un des moyens de réduire l'émissivité est d'employer de l'or :  $\varepsilon_{or} = 0,02$ . Les pertes seraient alors de 0,6 W. soit 4,8 % de l'extraction de chaleur. Une telle valeur serait satisfaisante pour considérer un adiabatisation expérimental et assurer l'unidirectionnalité du flux extrait durant le processus de solidification. La seule possibilité est d'effectuer la dorure du creuset. Celle-ci ne pouvant avoir lieu que par électrolyse, cela est rendu difficile par la présence de thermocouples (une cinquantaine) sur les

parois du creuset. Leur fixation peut être grandement gênée par la présence d'or. Cette solution a donc été abandonnée. Le paramètre à travailler est alors la température du corps récepteur du rayonnement du creuset inox.

### D.3.3.b : La boîte de Kirchhoff.

Comme il est peu pratique d'agir sur la température de l'enceinte elle-même, une boîte thermostatée en cuivre est installée autour de l'échantillon (cf. figure D-7). Cette boîte sera dénommée « boîte de Kirchhoff ». Si l'on considère deux corps dont l'un entoure totalement l'autre, il est possible d'affirmer, en accord avec la loi de Kirchhoff, qu'à température donnée, l'émissivité et l'absorption de n'importe quelle surface solide sont les mêmes quand le rayonnement est en équilibre entre les surfaces solides. Cela est également valable si l'on considère les longueurs d'ondes séparément. Qui plus est, il est possible de considérer que les deux corps ici en présence (le creuset en inox et la boîte de Kirchhoff en cuivre) ont même émissivité (i.e. 0,8) car les surfaces ne sont pas polies. Cette valeur de l'émissivité peut être utilisée pour des émissions hémisphériques du rayonnement. Si l'on considère un corps à 255 °C entourant un second corps de surface 76 cm<sup>2</sup> (surface du creuset) à une température de 250 °C, il est possible d'évaluer la borne supérieure des pertes, en utilisant la relation D.3. Celle-ci est estimée à 1 W (20 fois moins que l'estimation faite précédemment). Les températures du creuset et de la boîte de Kirchhoff doivent donc être très voisines. La boîte est située à un centimètre de part et d'autre du creuset en inox, deux centimètres au niveau du fond. Sa longueur est suffisante pour intercepter le rayonnement à partir d'un angle de 7° pour les zones les plus proches de l'échangeur, un angle de 4,5° de pour les parties les plus lointaines (cf. figure D-7). Il y a donc un angle de fuite si l'on a un rayonnement totalement hémisphérique. L'objectif principal reste de compenser les pertes thermiques par rayonnement du creuset. Or, pendant le processus de solidification, il existe un gradient horizontal de température le long du creuset.

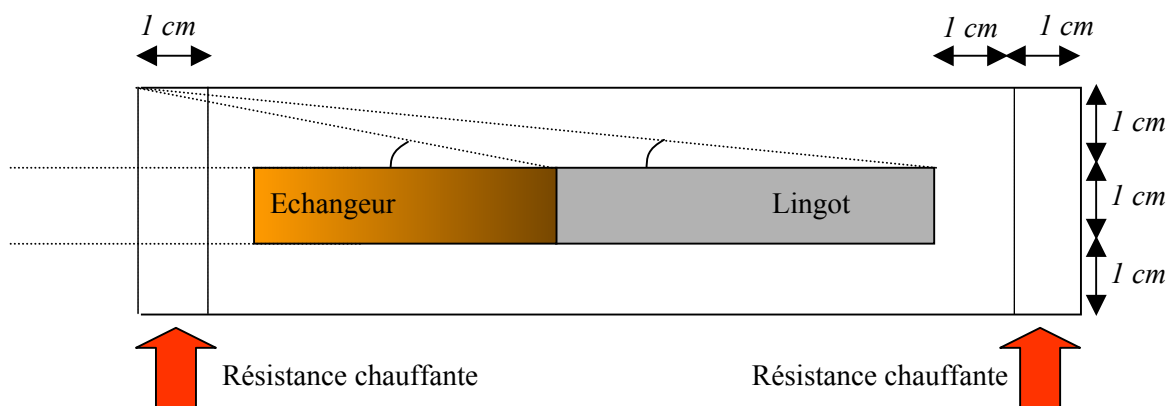


Figure D-7 : Boîte de Kirchhoff (coupe médiane vue de dessus).

Afin de tenir compte de ce gradient, la boîte comporte deux résistances chauffantes. Ces résistances chauffantes entourent la boîte cuivre à ses deux extrémités sur une largeur d'un centimètre. Ces deux résistances comportent deux thermocouples montés en opposition avec deux autres thermocouples de part et d'autre du creuset inox. Il est possible de jouer sur ces deux consignes pour compenser les pertes par rayonnement. Ces deux résistances permettent de créer le long de la boîte de Kirchhoff un gradient de température qui permet de corriger au mieux les pertes thermiques par rayonnement, ainsi que l'angle de fuite ou la direction de rayonnement (facteur de forme). Ces résistances restent asservies tout au long du processus de solidification. Le réglage des consignes se fait lorsque le lingot est à l'état liquide et l'ensemble à l'équilibre.

#### **D.3.4 : Les autres fuites thermiques.**

Ces dimensionnements étant faits pour l'ensemble du creuset, il reste à considérer les fuites thermiques ayant lieu par l'intermédiaire des cinquante thermocouples en contact direct avec le lingot métallique. En effet, ceux-ci représentent une surface de fuite de  $10 \text{ mm}^2$ . A cette surface correspond une longueur de thermocouple de un mètre. Les pertes thermiques par les thermocouples se chiffrent donc à une puissance  $P_{TC}$  :

$$P_{TC} = k \frac{\Delta T}{l} S = 0,045 \text{ W} \quad (\text{D.4})$$

où  $S$  est la surface de fuite,  $l$  la longueur des thermocouples (i.e.  $1 \text{ m}$ ),  $k$  la conductivité thermique ( $30 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ),  $\Delta T = 150 \text{ }^\circ\text{C}$  (pour un passage de  $250 \text{ }^\circ\text{C}$  à  $100 \text{ }^\circ\text{C}$  par exemple). Les pertes thermiques par les thermocouples sont donc logiquement négligeables.

#### **D.4 : La circulation d'eau thermostatée.**

Ce circuit assure l'extraction de chaleur du dispositif durant la solidification ainsi que le maintien à température constante de la boîte de jonction des thermocouples aux nappes de raccordement des centrales d'acquisition. En effet, ces connexions doivent être sérieusement surveillées du point de vue thermique afin que des gradients de température parasites ne faussent pas les signaux mesurés. Ces gradients de température pourraient, par effet Seebeck, créer des courants électriques supplémentaires. Le schéma général est visible figure D-7. Le contrôle thermique des connexions se fait par de l'eau en circuit fermé : une pompe assure le mouvement, un échangeur contrôlé par un PID (par l'intermédiaire d'une sonde  $PT100$ ) assure le maintien de la température à une consigne donnée ( $25 \text{ }^\circ\text{C}$ ). Un refroidisseur permet d'évacuer la chaleur accumulée lors du passage dans les différents éléments du

dispositif. Une telle régulation à 25 °C permet d'éviter les problèmes de condensation sur les tuyaux (la condensation est un changement de phase entraînant des pertes d'énergie considérables). De plus, les différents tuyaux d'arrivée d'eau ont été isolés.

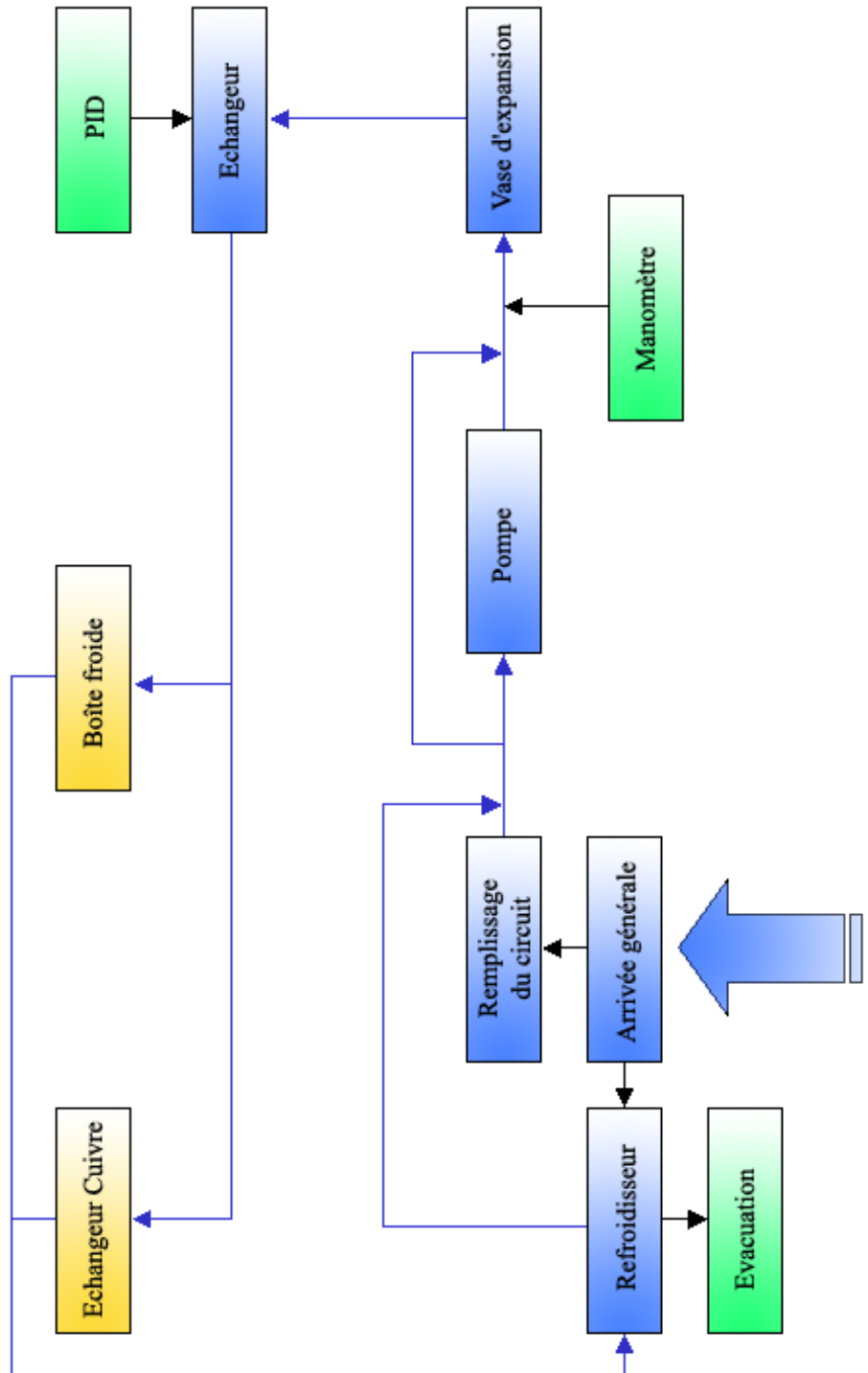


Figure D-8 : Schéma du système de circulation d'eau.

## D.5 : La chaîne de mesure.

La chaîne de mesure principale part des thermocouples se situant sur l'échantillon jusqu'à l'ordinateur chargé de recueillir les données. Une deuxième chaîne de mesure part du cœur du refroidisseur vers le système d'acquisition (cf. figure D-9).

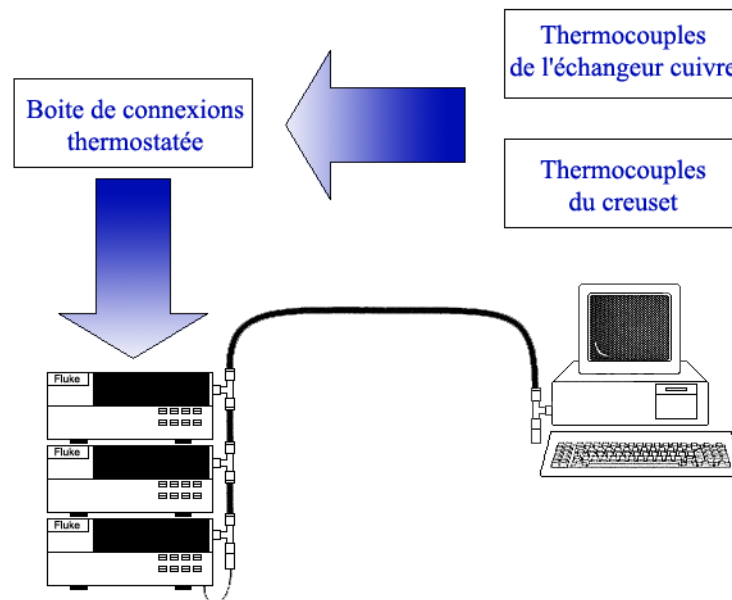


Figure D-9 : Schéma descriptif de la chaîne de mesure.

Les thermocouples sont disposés sur chaque face selon un quadrillage dont le pas vaut un centimètre (cf. figure D-10).

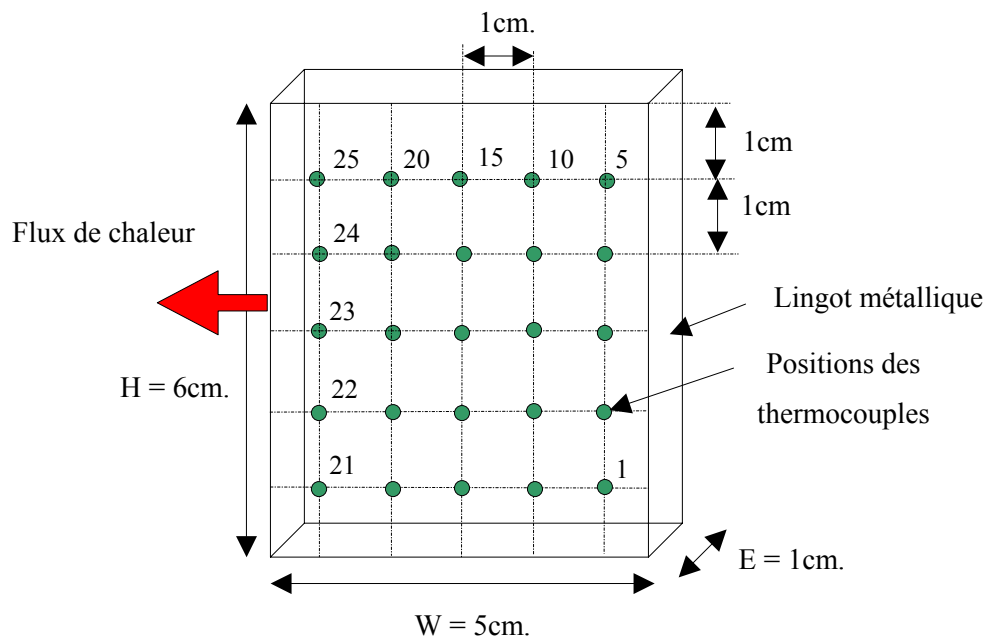


Figure D-10 : Positions des thermocouples sur le lingot.

## D.6 : Autres considérations techniques.

Plusieurs problèmes se posent : la fabrication des échantillons, la fixation des thermocouples sur le creuset inox, le choix du contact thermocouple / échantillon... Les thermocouples utilisés sont tous de type K.

### D.6.1 : Fabrication des échantillons.

Un dispositif particulier a été créé afin d'élaborer les lingots. Il correspond à une double contrainte. D'une part, il doit permettre de fabriquer les échantillons aux dimensions désirées avec une grande simplicité de reproduction du procédé ; d'autre part, les lingots doivent être homogènes au niveau de la concentration en soluté. Ces deux critères nous conduisent à un système induction / trempe présenté au niveau de la figure D-11. A noter que le support du creuset en quartz n'est pas représenté.

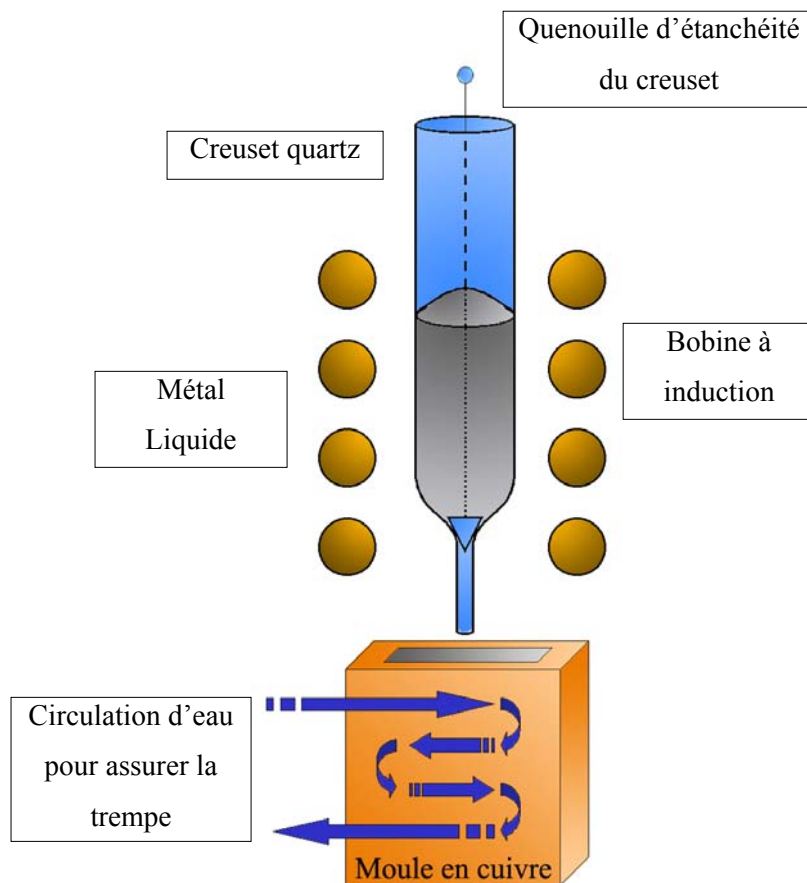


Figure D-11 : Dispositif d'élaboration des échantillons.

Ce dispositif est constitué de deux parties. La première correspond à un creuset quartz, dont la sortie est obstruée par une quenouille escamotable. Cette dernière rend le creuset étanche au métal liquide. Le tout est inséré à l'intérieur d'une bobine à induction. Cela permet de fondre et de brasser les composants métalliques solides disposés dans le creuset. L'alliage est en effet constitué à partir des métaux purs (Etain et Bismuth avec une pureté de 4N) pesés précisément pour correspondre au volume et à la concentration désirés. Une fusion par induction permet de cantonner les oxydes dans la peau de la surface libre. Un faible diamètre de sortie du creuset entraîne le dépôt des oxydes dans le creuset lors de la vidange de son contenu dans le moule. Si des oxydes éventuels quittaient le creuset, ils se retrouveraient dans la partie la plus supérieure du lingot. Il suffit alors de couper cette extrémité lors de l'ultime mise aux dimensions de l'échantillon. La deuxième partie du dispositif est justement constitué de ce moule. Ce dernier est en cuivre (grande conduction thermique idéale pour la trempe) et parcouru par une circulation d'eau (en circuit ouvert) qui permet de tremper le métal liquide lorsqu'il envahit le moule. L'intérieur du moule est recouvert d'une légère couche de graphite afin d'éviter toute interaction chimique entre le cuivre et l'alliage et favoriser le démoulage. Une analyse chimique de contrôle n'a montré aucune pollution de l'échantillon par du cuivre ou du graphite.

#### **D.6.2 : Fixation des thermocouples sur le creuset.**

Le creuset inox est composé de plaques de cinq dixièmes de millimètre d'épaisseur. Les thermocouples sont eux-mêmes d'un diamètre de cinq dixièmes, le tout pour les considérations thermiques précédemment décrites. La fixation des thermocouples sur ces plaques résulte d'un compromis entre résistance mécanique, pertes thermiques et facilité de reproductibilité du procédé de fixation si besoin est. Le choix retenu pour réaliser cette fixation est celui d'une pâte à braser à base argent. Il faut en effet que la fixation puisse résister à des températures avoisinant les 300 °C sans détérioration (ce qui élimine aisément toute fixation à base étain par exemple). Cette pâte a une température de fusion de l'ordre de 650 °C. Les plaques inox devant accueillir les thermocouples sont percées de trous de six dixièmes de diamètre. On procède plaque par plaque. La plaque considérée est bridée sur un bloc cuivre afin d'obtenir un contact intime entre les deux.

Le bloc cuivre est enduit d'une fine couche de graphite enfin d'éviter toute interaction chimique entre ce dernier et l'argent fondu. Les thermocouples sont introduits un à un dans leurs emplacements, en procédant rangée par rangée. Ceux-ci sont également bridés quelques centimètres au-dessus de la plaque pour éviter tout déplacement pendant l'opération (cf. figure D-12). Une fois en place, chaque thermocouple de la rangée est enduit de pâte argent et de décapant. Le montage fini, le bloc cuivre est monté en température au chalumeau le plus rapidement possible (une minute) afin d'entraîner une fonte rapide du métal contenu dans la pâte. En effet, une montée en température lente provoque l'évaporation du décapant inclus dans le mélange ainsi qu'une fixation friable car la fonte du métal de brasure est trop tardive. Le procédé est répété pour les deux faces à une différence près : le



bloc cuivre utilisé pour la brasure des thermocouples normaux est parfaitement lisse afin que ceux ci soient affleurants sur la face interne de la plaque inox. A contrario, le bloc cuivre utilisé pour la brasure des autres thermocouples est percé de trous. Les thermocouples sans soudures froides traversent la plaque de part en part. Les parties qui dépassent sont ensuite sectionnées et polies afin d'être à leur tour affleurantes, les deux fils internes à chaque thermocouple étant parfaitement dégagés. Chaque extrémité est vérifiée au microscope optique. Une fois les brasures sur les deux plaques réalisées, l'ensemble du creuset inox est soudé et son étanchéité vérifiée.

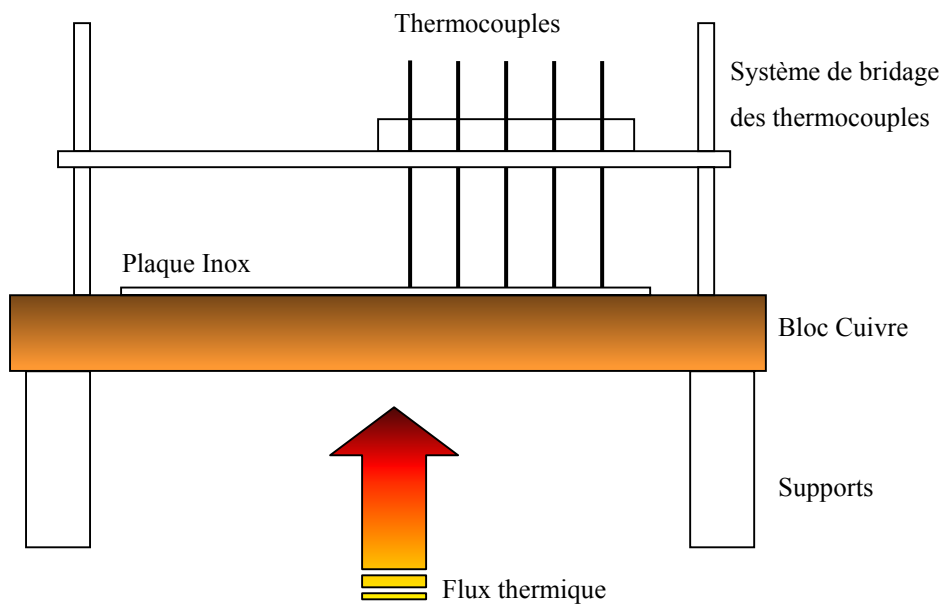


Figure D-12 : Dispositif de brasure des thermocouples sur les parois inox.

### D.6.3 : « Amorçage » des thermocouples sans soudures froides.

En ce qui concerne les contacts thermocouples/échantillon, deux choix ont été faits :

- Une face de thermocouples « normaux ».
- Une face de thermocouples sans soudures froides (les fils chromel-alumel ne sont pas reliés entre eux).

Le premier choix (i.e. la face de thermocouples normaux) correspond à un choix classique. Ce choix présente le risque de ne pas être satisfaisant quant à la mesure de fluctuations thermiques autres que l'évolution générale de température. Il permet tout de même l'acquisition de thermogrammes et de cartes de température des plus intéressants. Le deuxième choix (i.e. la face de thermocouples sans

soudures froides) résulte d'une volonté de mesure des fluctuations thermiques (de type Rayleigh-Bénart par exemple) car le temps de réponse de tels thermocouples est beaucoup plus rapide. L'extrémité du thermocouple est coupée (cf. figure D-13) afin de mettre à jour les deux fils chromel-alumel. Le contact électrique se fait directement à travers le métal liquide.

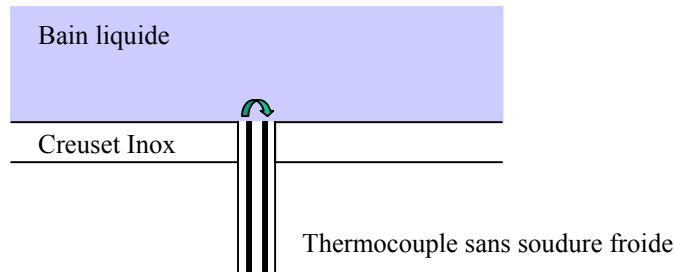


Figure D-13 : Schéma de principe des thermocouples sans soudures froides.

Il est nécessaire de protéger l'intérieur de ces thermocouples de l'humidité ambiante lorsque le dispositif n'est pas en phase d'utilisation. Toute humidité à l'intérieur des thermocouples pourrait entraîner une dérive de leurs mesures. A cette fin, une mince couche de nitrure de bore est pulvérisée à l'intérieur du creuset inox. Cette couche permet aussi un démoulage plus aisé de l'échantillon car elle évite une interaction chimique entre le métal liquide et son environnement immédiat. Le nitrure de bore est communément utilisé comme lubrifiant sec thermiquement stable. La difficulté consiste alors à amorcer ces thermocouples. En effet, la pellicule de nitrure de bore empêche tout contact électrique, le mouillage du métal liquide sur les deux fils des différents thermocouples est des plus hasardeux et des couches d'oxydes peuvent se former sur les zones de contact thermocouples / échantillon. Pour réaliser cet amorçage, on applique une décharge électrique (1000 V sous très faible ampérage) aux extrémités du thermocouple qui crée un arc électrique entre les fils chromel-alumel. Cet arc électrique rompt la couche de nitrure de bore, l'éventuelle couche d'oxyde et crée une jonction électrique à travers le métal liquide. Cette méthode a préalablement été testée avec de bons résultats. Toutefois, lors de la réalisation à plus grande échelle (i.e. avec les 25 thermocouples), le taux d'amorçage fut très mauvais : un certain nombre de thermocouples n'a jamais pu être amorcé, d'autres ont été amorcés mais quelque part à l'intérieur de la gaine (sans doute dans une zone de faiblesse de l'isolant). En ce qui concerne les thermocouples amorcés avec succès, certains n'ont pas gardé leur connexion avec le lingot durant tout le temps de la solidification. Cela est peut être dû à un phénomène de décollement du lingot d'avec certaines parois du creuset lors de la solidification ou un problème de mouillage avec le métal liquide.

## **D.7 : Conclusion partielle.**

L'ensemble du dispositif expérimental a été présenté et décrit. A chaque problématique soulevée, une réponse, une solution technique a essayé d'être apportée. Certaines limites apparaissent d'ores et déjà : le taux d'amorçage réussi très faible des thermocouples sans soudures froides (on peut se poser des questions sur la qualité des thermocouples), l'éventuel décollement de l'échantillon d'avec son creuset lorsque celui-ci se solidifie, les compensations des pertes thermiques par rayonnement... La description des principes et des solutions techniques a été faite de la manière la plus détaillée possible pour permettre la réutilisation du dispositif et son perfectionnement.

## Partie E

# Résultats de mesures et simulations numériques du dispositif expérimental

Cette partie de l'exposé concerne un certain nombre de résultats obtenus dans les diverses campagnes d'expériences menées avec le dispositif décrit partie D. L'organisation de cette partie se fera en trois points essentiels. Premièrement, une vérification des hypothèses posées dans la partie description et conception du dispositif expérimental afin de vérifier si notre système est conforme au cahier des charges désiré. Cela permettra de confirmer ou de nuancer certaines hypothèses faites sur le système expérimental, de tester partiellement sa validité. Dans un deuxième temps, les résultats et les mesures seront présentés dans leur ensemble, tant pour l'étain pur que pour un alliage étain-bismuth 10 % en masse soumis à deux vitesses de refroidissement différentes. Dans un troisième temps, nous nous appliquerons à réaliser une étude numérique de notre expérience à partir du code numérique décrit dans les parties B et C de cet exposé.

## **E.1 : Analyse et étude des conditions expérimentales grâce aux mesures.**

Les études menées dans ce paragraphe consistent à vérifier si le système expérimental est conforme au cahier des charges présenté dans la partie D de l'exposé. Nous nous poserons la question de l'adiabaticité du creuset et de la reproductibilité des expérimentations. Un point est à préciser : la paroi d'échange thermique entre le lingot à solidifier et l'extracteur de chaleur peut-elle être considérée comme isotherme ? Une fois ce point établi, il sera précisé comment déterminer sa température (autrement que par la simple définition théorique du refroidissement) et des méthodes d'estimation du flux extrait seront présentées.

### **E.1.1 : De l'adiabaticité du creuset.**

Lorsque la boîte de Kirchhoff de compensation des pertes thermiques n'est pas activée, les mesures de températures peuvent présenter des différences allant jusqu'à dix degrés entre le thermocouple à la température la plus élevée et le thermocouple à la température la plus basse. Avec la boîte de compensation activée et après les phases de réglages nécessaires sur les consignes (qui s'effectuent à l'état liquide), il est possible d'obtenir des cartes de température de l'allure de celle de la figure E-1 où l'écart entre le point le plus chaud et le point le plus froid est inférieur à un degré et demi. Cette configuration de température est stable (moyennant les légères fluctuations thermiques) à travers le temps ce qui signifie que nous sommes à l'équilibre thermique. Cette carte n'est pas stratifiée ce qui montre que nous sommes dans une situation d'adiabatisme et non pas une situation d'équilibre entre deux extrémités à deux températures différentes. Cette situation d'équilibre permet d'apporter des corrections sur les mesures de chaque thermocouple. En effet, les thermocouples utilisés sont de type K avec une tolérance donnée par le constructeur de plus ou moins deux degrés et demi dans la gamme de température  $-40\text{ }^{\circ}\text{C} / +330\text{ }^{\circ}\text{C}$ . Cela signifie qu'une température mesurée par un thermocouple est

considérée comme correcte lorsqu'elle se situe à moins de deux degrés et demi de différence de la température de référence à mesurer. La correction se fait pour s'aligner sur la température théorique supposée du lingot liquide (250 °C par exemple) car toutes les mesures sont relatives. Cet écart peut être considéré comme constant au long d'une même expérience. En revanche au cours du temps, il est nécessaire de recalibrer au début de chaque expérience pour tenir compte au mieux du vieillissement, de la dérive et de la maturation du thermocouple et de l'environnement expérimental. Le fait que les thermocouples de mesure soient juste « piqués » au niveau de leurs pointes et non pas immergés sur une certaine longueur accentue ce genre de phénomènes. Une deuxième correction doit avoir lieu après la réalisation d'une expérience, sur les températures mesurées afin de caler l'ensemble du thermogramme sur la température de fusion (température du palier de solidification) pour un métal pur, sur la température de liquidus pour un alliage..

Les résultats qui seront présentés à partir du paragraphe E.2 sont uniquement **les résultats bruts hors corrections**. Il sera nécessaire d'effectuer ces corrections afin d'obtenir des résultats complets à la comparaison avec les simulation numériques.

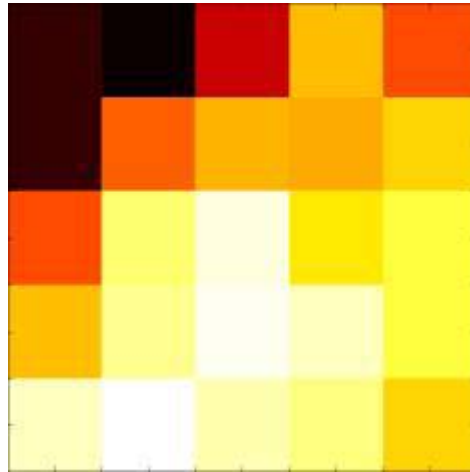


Figure E-1 : Carte de température. Valeurs brutes.

$$[T_{min} = 254,423 \text{ °C} ; T_{max} = 255,584 \text{ °C}].$$

$$\begin{bmatrix} 254,423 & 254,337 & 255,694 & 255,143 & 254,935 \\ 254,424 & 254,973 & 255,124 & 255,113 & 255,185 \\ 254,931 & 255,399 & 255,531 & 255,219 & 255,334 \\ 255,154 & 255,431 & 255,564 & 255,487 & 255,333 \\ 255,493 & 255,584 & 255,4 & 255,425 & 255,18 \end{bmatrix} \quad (\text{E.1})$$

Cela nous donne, à titre d'exemple la matrice de correction suivante pour un alignement sur 255 °C :

$$\begin{bmatrix} +0,577 & +0,663 & -0,694 & -0,143 & 254,935 \\ +0,576 & +0,27 & -0,124 & -0,113 & -0,185 \\ +0,069 & -0,399 & -0,531 & -0,219 & -0,334 \\ -0,154 & -0,431 & -0,564 & -0,487 & -0,333 \\ -0,493 & -0,584 & -0,4 & -0,425 & -0,18 \end{bmatrix} \quad (\text{E.2})$$

L'idéal est de faire cet alignement sur la température moyenne des thermocouples afin de s'affranchir de l'influence des fluctuations thermiques lors de l'établissement de la matrice de correction.

### E.1.2 : La paroi cuivre de l'échangeur est-elle isotherme ?

Une rapide étude thermique de l'échangeur et de l'échantillon réalisée sous FLUENT (dans des conditions théoriques quelque peu différentes des conditions expérimentales) montre que les isothermes dans l'échangeur cuivre, à proximité de la paroi d'échange, sont quasiment des plans parallèles à cette paroi. L'écart de température entre la partie inférieure et supérieure de la paroi est inférieur au dixième de degré à consigne de température constante. La référence expérimentale de la consigne se situe au milieu de la paroi. Ses extrémités se situent à trois centimètres de ce point de référence, ce qui représente au plus un temps caractéristique de diffusion de huit secondes.

$$\tau_D = \frac{L^2}{\alpha} \approx 8 \text{ secondes avec } L = 3 \text{ cm et } \alpha = 1,1 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}. \quad (\text{E.3})$$

En pratique, cela représente bien moins car le déplacement des isothermes suit une direction horizontale et non pas verticale. Si l'on examine le déplacement horizontal des isothermes (quasi verticales), le temps de diffusion devient d'environ quatre centièmes de seconde pour une distance de deux millimètres.

Comparé à la vitesse de refroidissement imposée (deux ou cinq degrés par minute) qui donne des temps de solidification de quinze à quarante minutes, cela ne met pas en défaut l'hypothèse de paroi d'échange isotherme.

Remarque : Il est à noter que la conductivité thermique de l'échangeur en cuivre est six fois supérieure à celle du lingot en étain ou celle du lingot en étain-bismuth.

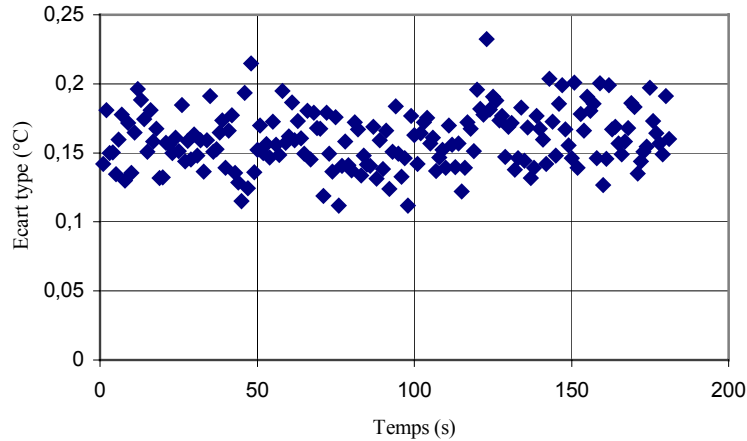


Figure E-2 : Ecart type sur la colonne de thermocouples la plus proche de la paroi.

Sur la figure E-2 sont représentés les écarts types de la colonne de thermocouples la plus proche de la paroi de refroidissement, côté lingot (étain-bismuth à l'état liquide). Cette colonne se situe à cinq millimètres de cette paroi. Les mesures sont effectuées toutes les secondes alors que la consigne de température est fixe. L'acquisition présentée a une durée de trois minutes. L'écart type moyen s'établit à  $0,16$  °C. Compte tenu du fait que la convection influence et perturbe les mesures de température et qu'il existe des fluctuations sur les mesures thermiques, le résultat est suffisamment satisfaisant pour considérer la paroi comme expérimentalement isotherme.

### **E.1.3 : Température de la paroi et flux extrait.**

La température de la paroi est asservie à une consigne par l'intermédiaire d'un PID. Sa température peut donc être déduite. Il est possible d'estimer grossièrement la température de la paroi en fonction du temps grâce aux mesures effectuées par les quelques thermocouples situés dans l'échangeur cuivre. L'interpolation linéaire de ces mesures permet de déterminer approximativement la température de la paroi. Il est à noter que le premier thermocouple de mesure dans l'échangeur cuivre se situe à cinq millimètres de la paroi d'échange ce qui donne un temps de diffusion, en utilisant l'expression E.2, de  $0,23$  secondes alors que le temps d'acquisition lors des expériences de solidification est d'au mieux une seconde (certaines acquisitions furent effectuées avec des pas de temps de cinq secondes). Il n'est donc pas pertinent de rechercher des phénomènes plus rapides car ils seront « filtrés » par l'acquisition. C'est pour cette raison que nous nous contenterons d'une extrapolation linéaire même si l'utilisation d'une méthode inverse aurait été bienvenue et plus précise. Elle n'a pas été mise en œuvre ici. Cette interpolation linéaire, de par sa pente, nous permet de reconstruire le flux extrait et de là la puissance extraite.



Une deuxième méthode (indirecte) est accessible. Elle découle d'une approximation du bilan thermique sur le lingot (en considérant les faces comme adiabatiques, conformément à notre configuration théorique).

$$mC_p \frac{d\bar{T}}{dt} = P_{\text{extraite}} - L \frac{\partial m_L}{\partial t} + \text{fuites éventuelles} \quad (\text{E.4})$$

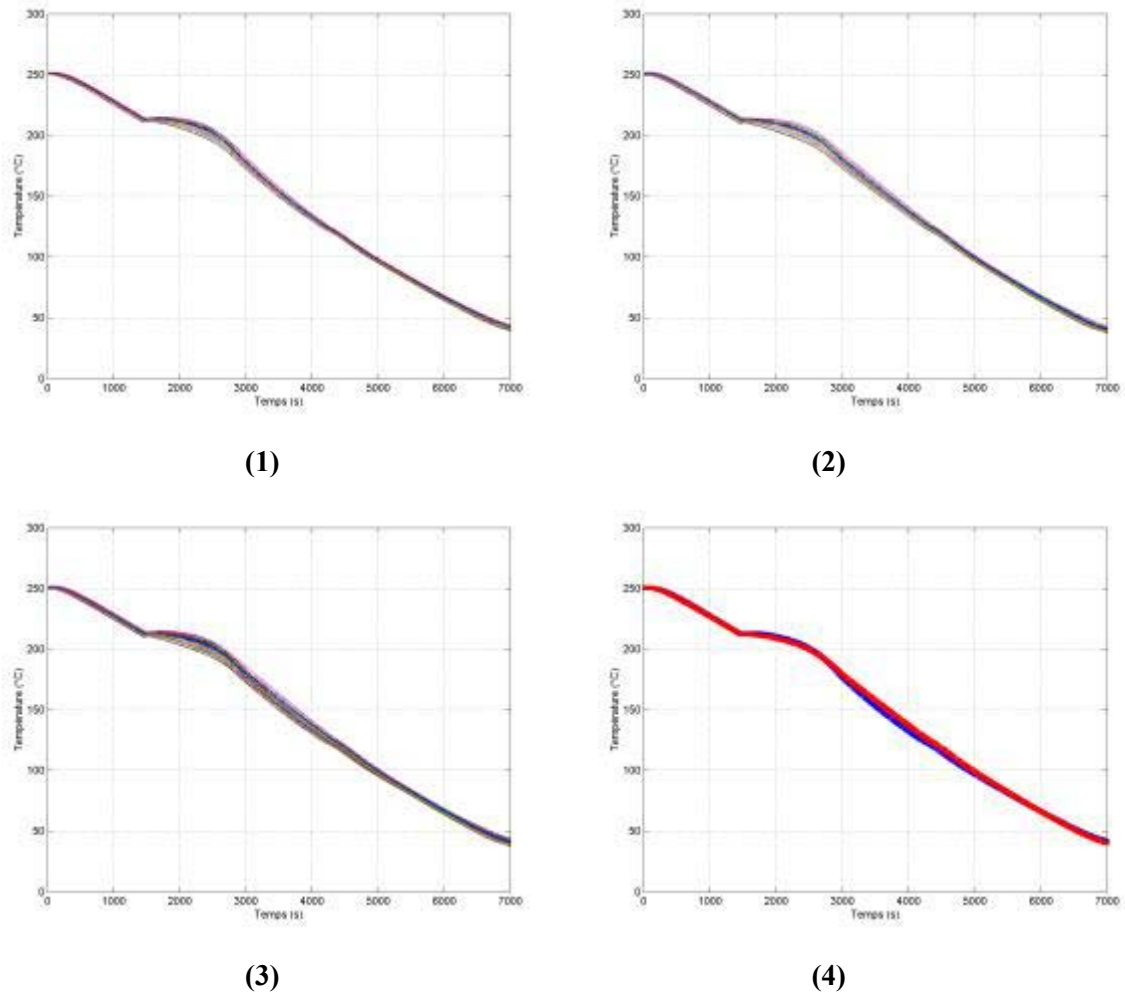
où  $m_l$  représente la masse de métal liquide. De manière plus générale, l'avant-dernier terme de l'équation correspond à la puissance créée à l'intérieur du lingot par le changement de phase liquide  $\rightarrow$  solide.  $\bar{T}$  correspond à la température moyenne du lingot. Elle est calculée en effectuant la moyenne des mesures des vingt-cinq thermocouples. Il est difficile d'estimer la variation de masse liquide dans l'échantillon. Toutefois, hors de la zone de solidification (et donc de changement de phase), lorsque le lingot est **entièrement liquide** ou **entièrement solide**, il est possible d'utiliser l'expression suivante :

$$(P_{\text{extraite}})_{\text{solide ou liquide}} = m(C_p)_{\text{solide ou liquide}} \frac{d\bar{T}}{dt} \quad (\text{E.5})$$

A contrario, en dehors de ces zones (zone liquide ou zone solide), cette expression représente l'évolution du stockage de chaleur à l'intérieur du lingot. Une question à vérifier est de savoir si, au niveau de la masse et de la capacité calorifique à prendre en compte, il faut considérer l'échantillon seul ou l'échantillon et son creuset en inox (cf. paragraphe D.3.2). Cette expression est à comparer avec le flux estimé grâce aux thermocouples situés dans l'échangeur cuivre. L'avantage de la première méthode est de déterminer le flux extrait, que le lingot soit liquide, pâteux ou solide. En toute rigueur, la différence des résultats des deux méthodes devrait permettre d'accéder à une estimation de la quantité instantanée de chaleur latente rejetée pendant la solidification.

### E.1.3 : De la reproductibilité des expériences.

Afin d'estimer la reproductibilité des expériences menées, les résultats de deux solidifications caractéristiques ont été considérés (solidification d'étain-bismuth à une vitesse de  $2 \text{ } ^\circ\text{mm}^{-1}$ ). Pour augmenter la lisibilité d'un graphe de comparaison, les températures moyennes des deux solidifications ont été reportées sur un même graphe afin d'évaluer l'écart entre deux expériences similaires. Ces graphes sont regroupés figure E-3.



**Figure E-3 :** (1) Expérience de solidification n°5 ; (2) Expérience de solidification n°6 ;  
(3) Superposition des mesures des expériences n°5 et n°6 ;  
(4) Superposition des températures moyennes des expériences n°5 et n°6.

Compte tenu des incertitudes sur les mesures de température, les résultats des deux expériences se superposent nous permettant de conclure à une reproductibilité acceptable des expériences.

### **E.1.5 : Conclusion sur le système expérimental.**

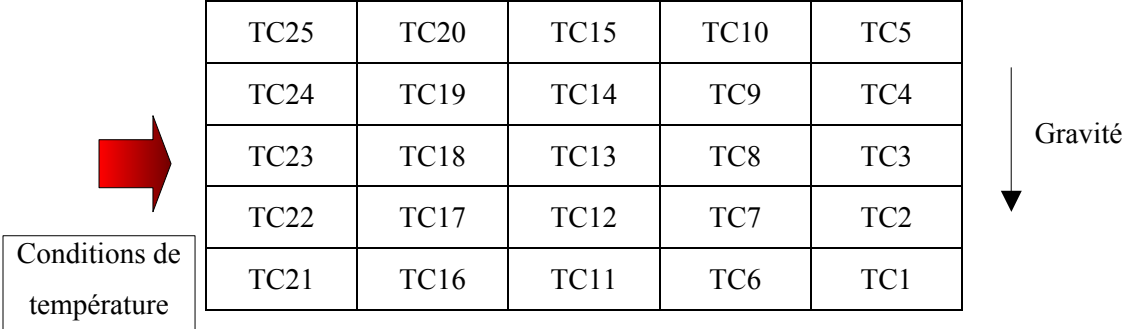
Compte tenu des résultats présentés précédemment, aucune information ne met réellement en défaut les hypothèses faites lors de la conception du système expérimental. La validité du système semble conforté même s'il est trop tôt pour statuer définitivement. Le système et le principe des corrections à apporter a été précisé même s'il n'a pas été utilisé sur les résultats présentés par la suite qui sont des résultats bruts.

## E.2 : Exploitation des mesures effectuées sur le Benchmark.

Les mesures de température représentent une part très importante des mesures effectuées. Ces mesures s'effectuent en temps réel et de manière non destructive (au contraire des analyses de concentration par exemple). Elles ont eu lieu sur de l'étain pur ainsi que sur un alliage d'étain-bismuth 10 %. Elles permettent de tester la reproductibilité des expérimentations en utilisant le même lingot d'étain et ceci exactement dans les mêmes conditions de solidification.

L'étain permet en effet, de par son palier de solidification, de positionner les mesures des thermocouples par rapport à la température de fusion de l'étain. De plus, l'étain permet de faire des cycles de fusion / solidification que n'autorise pas l'alliage de par la présence de ségrégations après le processus de solidification.

Les thermocouples seront repérés et numérotés conformément au tableau suivant (figure E-4), et ceci pour l'ensemble des mesures présentées :



TC25	TC20	TC15	TC10	TC5
TC24	TC19	TC14	TC9	TC4
TC23	TC18	TC13	TC8	TC3
TC22	TC17	TC12	TC7	TC2
TC21	TC16	TC11	TC6	TC1

Figure E-4 : Numérotation des thermocouples.

### E.2.1 : Les mesures de température et le corps pur.

Plusieurs expériences avec de l'étain pur ont été menées. Elles concernent presque toutes des vitesses de refroidissement de deux degrés par minute ou pour les quelques fusions enregistrées, des vitesses de réchauffement également de deux degrés par minute. Nous ne nous intéresserons ici qu'à ces dernières car elles permettent de vérifier le bon fonctionnement du système expérimental avant de se préoccuper de l'alliage étain-bismuth.

N° Expérience	Nature	Conditions
F1	Fusion	Consigne de l'échangeur brutalement à 255 °C.
F2	Fusion	Rampe de deux degrés par minute.
F3	Fusion	Rampe de deux degrés par minute.
F4	Fusion	Rampe de deux degrés par minute.
Stab1	Stabilité	Etude de stabilité des mesures par changement de consigne sur la boîte de Kirchhoff.
Stab2	Stabilité	Etude de stabilité des mesures par changement de consigne sur la boîte de Kirchhoff.
Stab3	Stabilité	Etude de stabilité des mesures par changement de consigne sur la boîte de Kirchhoff.
Stab4	Stabilité	Etude de stabilité des mesures par changement de consigne sur la boîte de Kirchhoff.
S1	Solidification	Coupe de la résistance chauffante.
S2	Solidification	Refroidissement de deux degrés par minute.
S3	Solidification	Refroidissement de deux degrés par minute.
S4	Solidification	Refroidissement de deux degrés par minute.

*E.2.1.a : Solidification du corps pur.*

Certaines caractéristiques physiques de l'étain sont données en annexe A.

Les données physiques se situant en annexe A et les résultats présentés dans la suite du paragraphe nous permettent d'estimer quelques nombres adimensionnels. Pour le nombre de Rayleigh thermique un  $\Delta T$  de 10 °C est considéré pour une longueur de 5 cm.

Nombre de Prandtl $Pr$	$7,15.10^{-3}$
Nombre de Rayleigh thermique $Ra_T$	$\sim 27529$

La figure E-5 correspond à une solidification avec une vitesse de refroidissement de deux degrés par minute au niveau de la face d'échange. L'état initial correspond à un bain liquide à une température d'environ 255°C. On peut remarquer un étalement des températures sur deux degrés au niveau de l'état stable précédant le début du refroidissement.

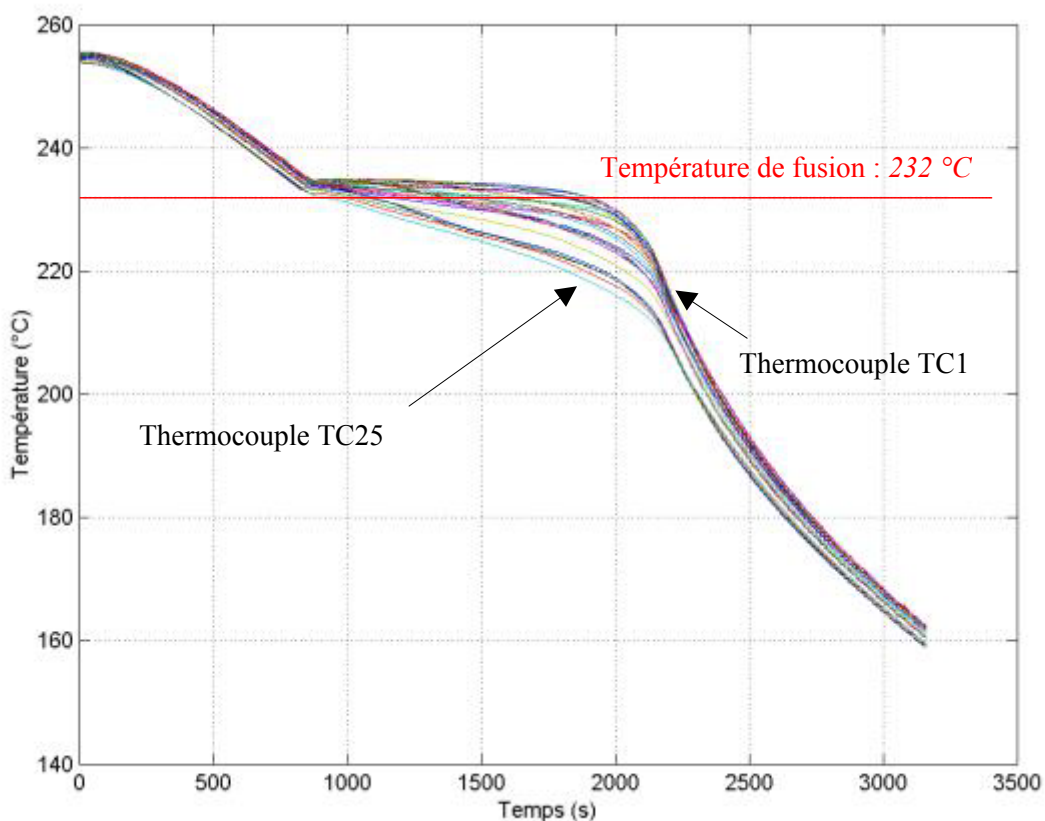


Figure E-5 : Mesures de température lors d'une expérience de solidification d'étain pur.  
Vitesse de refroidissement : deux degrés par minute.

Les températures les plus élevées correspondent aux températures de la dernière colonne (la plus éloignée de la paroi d'échange thermique), c'est à dire les thermocouples *TC1* à *TC5*. La zone se situant entre la première colonne de thermocouples et la paroi de refroidissement se solidifie rejetant de la chaleur (changement de phase). Ce rejet de chaleur infléchit l'évolution temporelle des rangées de thermocouples. Au fur et à mesure que l'étain se solidifie, il rejette de plus en plus de chaleur latente, entraînant l'apparition d'un palier thermique pour les mesures des thermocouples les plus éloignés de la paroi de refroidissement, qui à leur tour deviennent inférieures à la température de fusion du métal pur. Ces mesures de température permettent de reconstituer des cartes instantanées de température. Les cartes de température présentées auront toujours les mêmes conditions de refroidissement que les thermogrammes qui les précèdent.

Les cartes de température seront données sous forme de matrices (correspondant à la configuration donnée dans le tableau E-4) pour illustrer les propos. Ces matrices permettent d'établir des cartes « instantanées » de température. Les matrices qui seront données correspondent aux valeurs enregistrées. Il est évident que seule la première décimale présente un intérêt. Il est à noter que la rampe sur la consigne de la paroi de refroidissement ne débute que soixante secondes après le début de

l'enregistrement des températures. Le temps d'enregistrement sera celui utilisé pour numérotter les cartes de température et est celui correspondant à l'axe des abscisses de la figure E-6.

Les cartes de température présentées ont une échelle de couleurs qui va du noir (zone la plus froide) au blanc (zone la plus chaude) en passant par une gamme de rouges. De par la dissymétrie entre la longueur et la largeur de l'échantillon, les cartes de température présentées correspondent à des zones représentées dans la figure E-6.

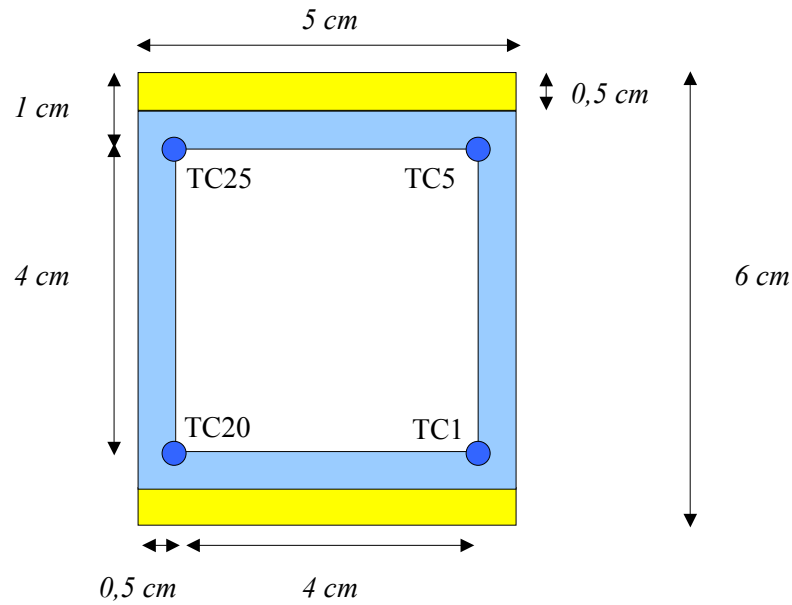


Figure E-6 : Schéma de positionnement des cartes de température.

Si l'on se réfère au schéma de la figure E-6, le carré blanc délimité par les thermocouples *TC1*, *TC5*, *TC20* et *TC25*, de quatre centimètres de côté, correspond aux cartes interpolées de température (par exemple, la carte donnée à la figure E-7-(2)). Le carré bleu, de cinq centimètres de côté, correspond aux cartes non-interpolées (i.e. les valeurs brutes mesurées) où les mesures se trouvent au centre des mailles. Celle-ci est alors d'une couleur correspondant à cette mesure. Le rectangle d'ensemble (avec les bandes jaunes), de dimensions  $6\text{ cm} \times 5\text{ cm}$ , correspond au lingot.

Ces cartes sont à considérer de manière relative pour étudier l'évolution du champ de température. En effet, les cartes peuvent donner l'impression, compte tenu de l'allure des isothermes que le front de solidification est courbé vers le haut. C'est ne pas tenir compte des corrections à apporter sur les mesures afin d'avoir une carte réellement instantanée de température.

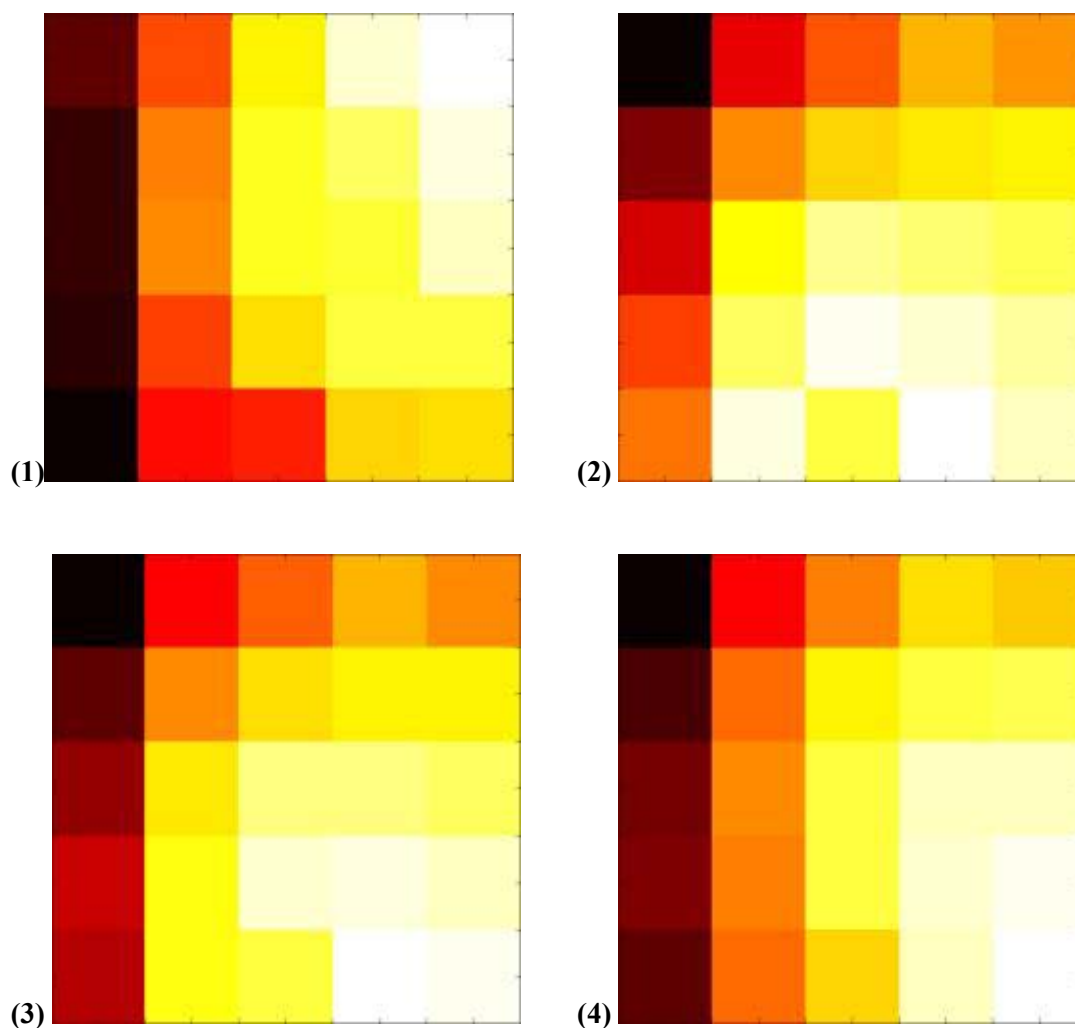


Figure E-7 : Cartes de température en valeurs brutes.

Refroidissement de deux degrés par minute.

(1) à  $t = 800$  s. [ $T_{min} = 234,289$  °C ;  $T_{max} = 237,033$  °C].

(2) à  $t = 1000$  s. [ $T_{min} = 231,19$  °C ;  $T_{max} = 234,673$  °C].

(3)  $t = 1250$  s. [ $T_{min} = 227,924$  °C ;  $T_{max} = 234,837$  °C].

(4) à  $t = 1750$  s. [ $T_{min} = 221,339$  °C ;  $T_{max} = 233,298$  °C].

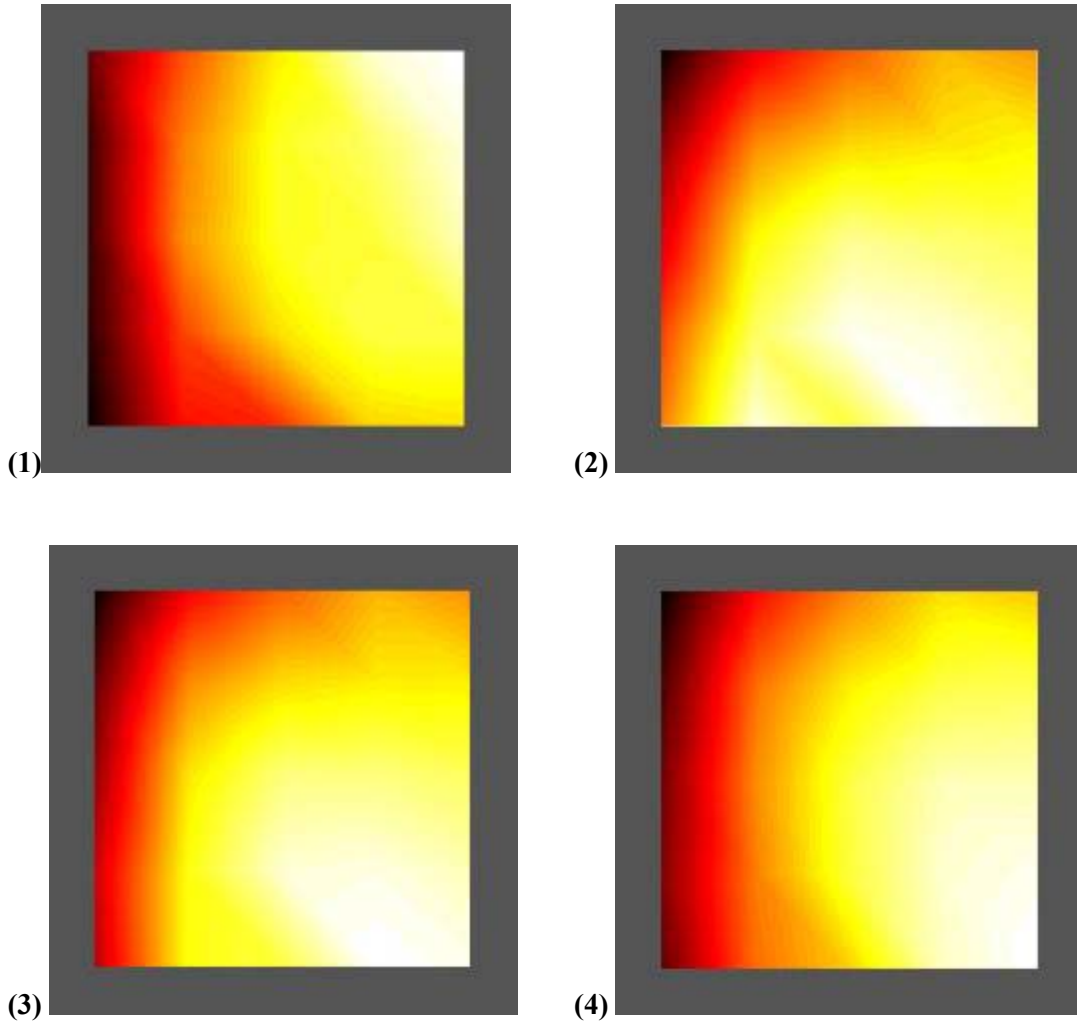


Figure E-8 : Cartes de température en valeurs interpolées.

(1) à  $t = 800 \text{ s}$ . [ $T_{min} = 234,289 \text{ } ^\circ\text{C}$  ;  $T_{max} = 237,033 \text{ } ^\circ\text{C}$ ].

(2) à  $t = 1000 \text{ s}$ . [ $T_{min} = 231,19 \text{ } ^\circ\text{C}$  ;  $T_{max} = 234,673 \text{ } ^\circ\text{C}$ ].

(3)  $t = 1250 \text{ s}$ . [ $T_{min} = 227,924 \text{ } ^\circ\text{C}$  ;  $T_{max} = 234,837 \text{ } ^\circ\text{C}$ ].

(4) à  $t = 1750 \text{ s}$ . [ $T_{min} = 221,339 \text{ } ^\circ\text{C}$  ;  $T_{max} = 233,298 \text{ } ^\circ\text{C}$ ].

Les matrices représentatives des cartes précédentes sont présentées afin de les illustrer et les compléter.

$$t = 800 \text{ s} : \begin{bmatrix} 234,649 & 235,608 & 236,265 & 236,884 & 237,033 \\ 234,493 & 235,8 & 236,407 & 236,59 & 237,932 \\ 234,491 & 235,861 & 236,405 & 236,466 & 236,83 \\ 234,425 & 235,55 & 236,2 & 236,509 & 236,509 \\ 234,289 & 235,336 & 235,446 & 236,147 & 236,212 \end{bmatrix} \quad (\text{E.6})$$



$$t = 1000 \text{ s} : \begin{bmatrix} 231,19 & 232,445 & 233,055 & 233,575 & 233,39 \\ 231,882 & 233,313 & 233,748 & 233,835 & 233,926 \\ 232,339 & 233,956 & 234,493 & 234,359 & 234,268 \\ 232,907 & 234,326 & 234,837 & 234,745 & 234,55 \\ 233,214 & 234,763 & 234,189 & 234,921 & 234,673 \end{bmatrix} \quad (\text{E.7})$$

$$t = 1250 \text{ s} : \begin{bmatrix} 227,924 & 230,418 & 231,429 & 232,299 & 231,913 \\ 228,849 & 231,886 & 232,753 & 232,932 & 232,927 \\ 229,395 & 232,831 & 233,953 & 233,942 & 233,709 \\ 229,938 & 233,146 & 234,51 & 234,617 & 234,326 \\ 229,735 & 233,164 & 233,494 & 234,837 & 234,673 \end{bmatrix} \quad (\text{E.8})$$

$$t = 1750 \text{ s} : \begin{bmatrix} 221,339 & 225,789 & 228,055 & 229,679 & 229,279 \\ 222,61 & 227,68 & 229,99 & 231,048 & 231,182 \\ 223,238 & 228,177 & 231,022 & 232,365 & 232,377 \\ 223,549 & 227,933 & 230,946 & 232,674 & 233,034 \\ 222,955 & 227,648 & 229,382 & 232,506 & 233,298 \end{bmatrix} \quad (\text{E.9})$$

La figure E-10-(1) représente l'évolution de la température moyenne du lingot en fonction du temps. On y distingue aisément le choc thermique initial qui correspond au début du refroidissement, le palier de solidification... Sur la courbe en regard qui représente la puissance instantanée, la période de rejet de chaleur latente est très visible. Les accidents sont, pour l'essentiel, imputables aux fluctuations des mesures des thermocouples ou à la manière de calculer la dérivée temporelle de la température moyenne du lingot. En l'occurrence, la puissance instantanée extraite lorsque le lingot est **entièrement liquide** ou **entièrement solide** est ici calculée suivant la formule suivante :

$$P_n = mC_p \frac{T_{n+1} - T_{n-1}}{2\Delta t} \quad (\text{E.10})$$

On peut utiliser, pour la capacité calorifique de l'étain, des expressions dépendantes de la température (Smithells Metals Reference Book) afin de bien prendre en compte l'état solide ou l'état liquide du lingot. Ces expressions sont les suivantes :

$$C_p = 4,1868(8,29 - 2,2 \cdot 10^{-3}T) \text{ dans le liquide.} \quad (\text{E.11})$$

$$C_p = 4,1868(5,16 + 4,34 \cdot 10^{-3}T) \text{ dans le solide.} \quad (\text{E.12})$$

où  $C_p$  est en  $J.K^{-1}.mol^{-1}$  et  $T$  est la température en Kelvin. Le volume molaire de l'étain peut être estimé à  $16,24 cm^3.mol^{-1}$ . Soit, en considérant une masse volumique de  $6,986 g.cm^{-3}$  pour l'état liquide et de  $7,28 g.cm^{-3}$  à l'état solide :

$$C_p = 36,9(8,29 - 2,2.10^{-3}T) \text{ dans le liquide, avec } C_p \text{ en } J.kg^{-1}.K^{-1}. \quad (E.13)$$

$$C_p = 35,41(5,16 + 4,34.10^{-3}T) \text{ dans le solide, avec } C_p \text{ en } J.kg^{-1}.K^{-1}. \quad (E.14)$$

Ces expressions sont regroupées dans la courbe présentée au niveau de la figure E-9.

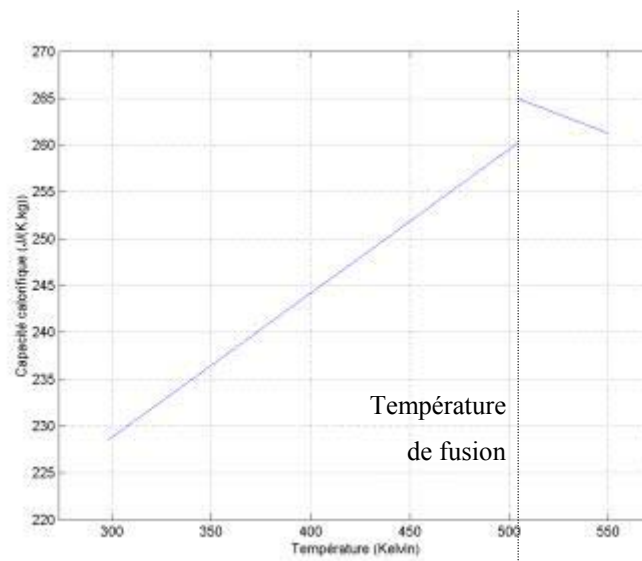
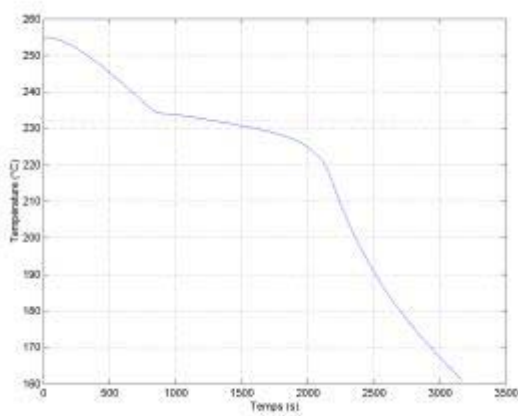


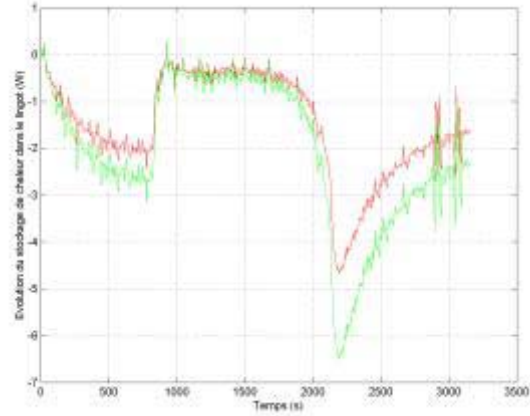
Figure E-9 : Evolution de la capacité calorifique de l'étain en fonction de la température.

La troisième courbe (figure E-10-(3)) représente la température de la paroi de refroidissement avec une évolution de deux degrés par minute.

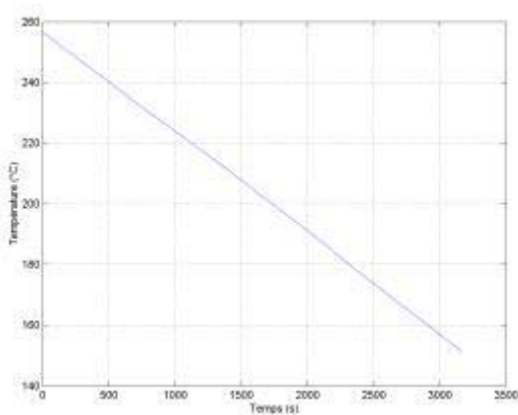
La quatrième courbe, quant à elle, correspond à la puissance instantanée extraite, déterminée à partir des valeurs de températures mesurées à l'intérieur de l'échangeur cuivre.



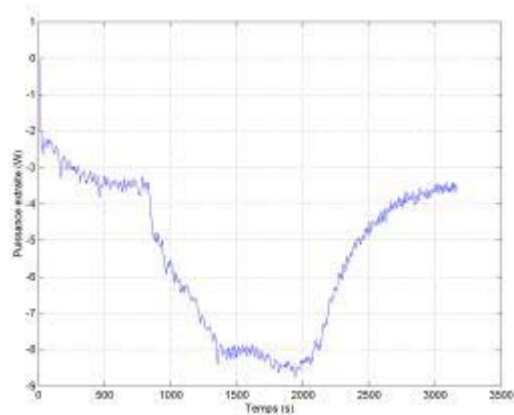
(1)



(2)



(3)



(4)

**Figure E-10 :** (1) Température moyenne du lingot ( $^{\circ}\text{C}$ ). Refroidissement de deux degrés par minute.  
 (2) Evolution du stockage de chaleur dans le lingot ( $W$ ) calculée à partir de la température moyenne.  
 (Rouge) Sans tenir compte du creuset ; (Verte) En tenant compte du creuset.  
 (3) Température de refroidissement : extrapolation de la température de paroi ( $^{\circ}\text{C}$ ).  
 (4) Puissance extraite ( $W$ ) calculée à partir des thermocouples de l'échangeur thermique.

On peut remarquer que, si les allures sont similaires hors zone de solidification, si les changements d'allure des courbes se situent aux mêmes instants, il existe un décalage d'environ un à deux watts entre les deux courbes de puissance extraite. Cette différence est imputable à la méthode de calcul de la température moyenne pour le tracé de la première courbe qui n'est fait qu'à partir de la moyenne des vingt-cinq mesures des thermocouples. La disposition des thermocouples laisse « de côté » des bandes de un centimètre en haut et en bas du lingot, d'un demi-centimètre à gauche et à droite. Ainsi, la température moyenne calculée correspond plus à celle de l'intérieur du lingot qu'à celle du lingot complet. Consécutivement, l'évolution temporelle de la température moyenne calculée présente une erreur qui transparaît au niveau de la puissance extraite calculée. L'apparition d'une

résistance de contact thermique entre le lingot en cours de solidification et la paroi de refroidissement. Cette résistance perturbe l'évaluation, grâce à l'échangeur, du flux extrait.

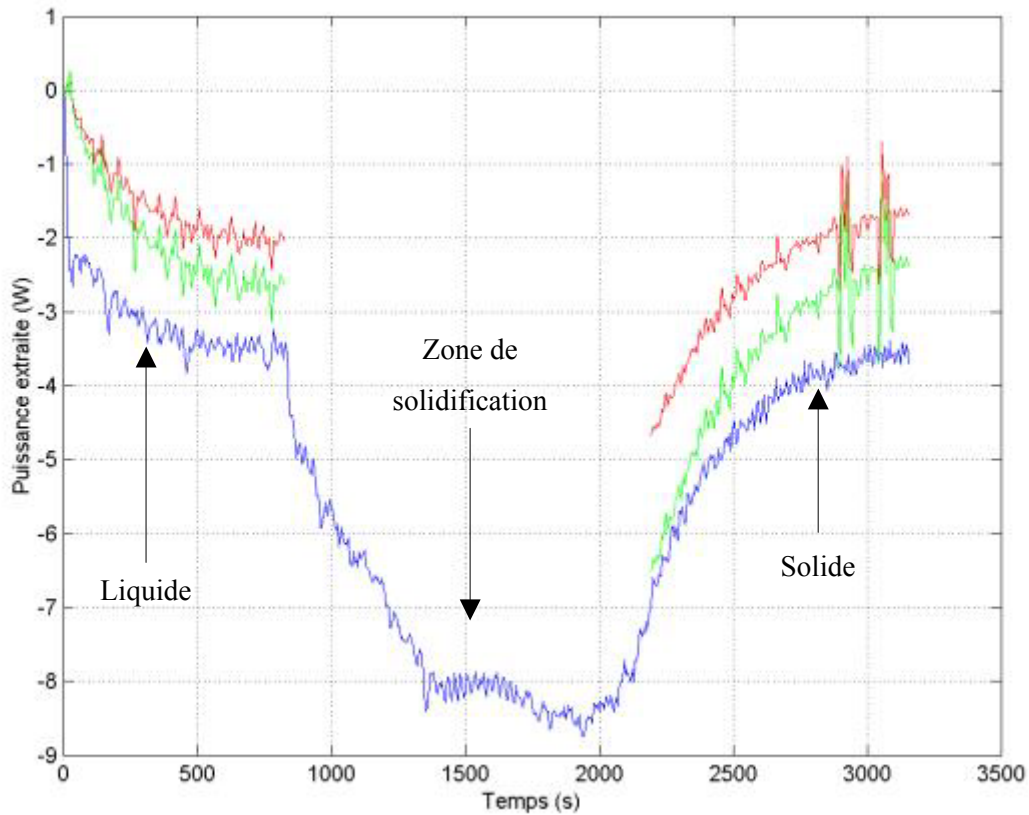


Figure E-11 : Superposition des puissances extraites ( $W$ ).

(rouge) Calcul à partir de la température moyenne en considérant le lingot seulement ; (vert) Calcul à partir de la température moyenne en considérant le lingot et le creuset ; (bleu) Calcul à partir de l'échangeur.

Si l'on superpose sur un même graphe les puissances extraites calculées de diverses manières (cf. figure E-11), on peut constater que la prise en compte de la capacité calorifique du creuset dans le calcul de la puissance extraite (courbe verte) permet de réduire la différence entre les deux méthodes de calcul. Cette puissance est calculée de la manière suivante :

$$P_{\text{extraite}} = \left( m_{\text{charge}} C_{p \text{ charge}} + m_{\text{creuset}} C_{p \text{ creuset}} \right) \frac{d\bar{T}}{dt} \quad (\text{E.15})$$

Dans les calculs à venir, le creuset en inox sera systématiquement pris en compte. On peut remarquer avec aisance sur les courbes de flux le début et la fin de la solidification par des fortes variations, en l'occurrence à respectivement  $800 \text{ s}$  et  $2000 \text{ s}$ .

## E.2.1.b : Fusion du corps pur.

Le dispositif n'étant pas conçu pour des études de fusion, les résultats suivants ne sont présentés qu'à **titre indicatif**. En effet, le réglage précis de la boîte de compensation des pertes thermiques se fait lorsque le métal est en phase liquide. Dans le cas présent, l'échantillon a été fondu. Les réglages ont été effectués puis le lingot a été solidifié puis refondu. La première fusion permet d'avoir un bloc d'étain qui théoriquement épouse au mieux son creuset et surtout la paroi d'échange thermique. Au regard des mesures obtenues, ce n'est pas le cas. C'est pour cette raison que nous ne développerons pas l'aspect fusion du corps pur plus avant.

L'état initial correspond au lingot solide à 25 °C. Une rampe de température est appliquée sur la face gauche, à une vitesse de  $2^{\circ}.mn^{-1}$ . La température finale est de 250 °C. Les courbes de températures mesurées sont présentées figure E-13. Les températures les plus basses correspondent aux températures de la dernière colonne (thermocouples *TC1* à *TC5*) et les températures les plus élevées à celles de la première colonne (thermocouples *TC20* à *TC25*). Après la phase de fusion (palier où les mesures des thermocouples forment un « peigne » plus large), la température continue à monter afin d'atteindre la consigne fixée. On remarquera que les pentes sont similaires avant et après la zone de fusion (environ deux degrés par minute).

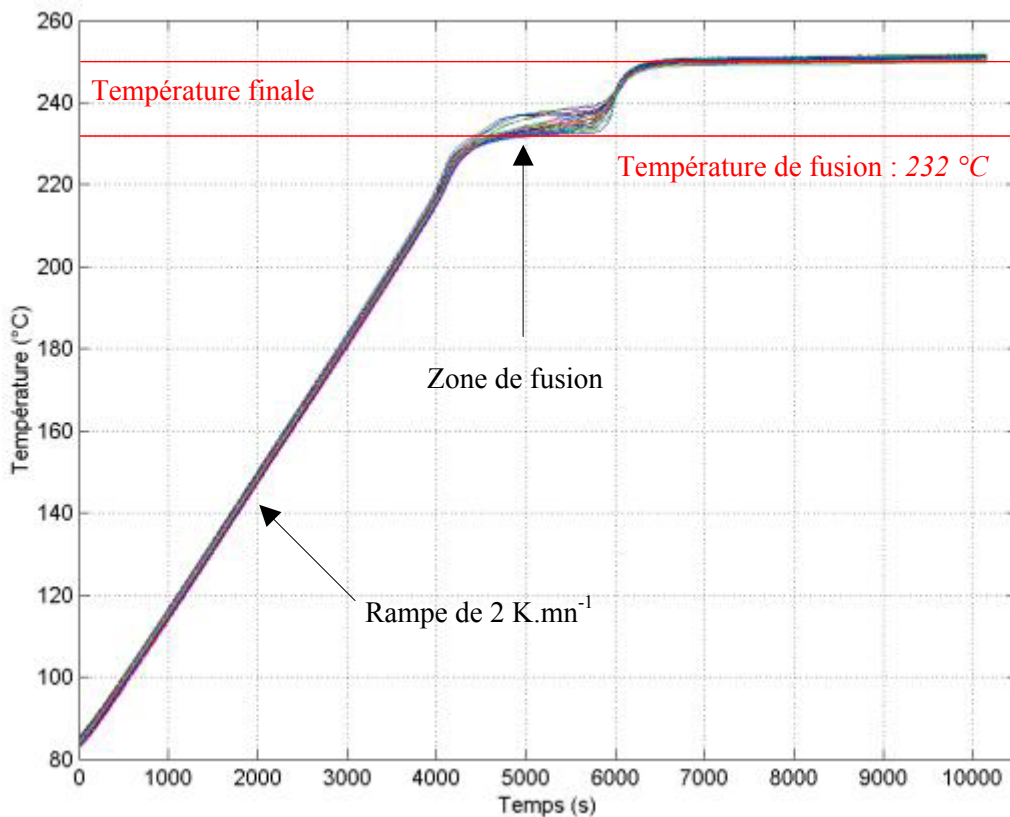
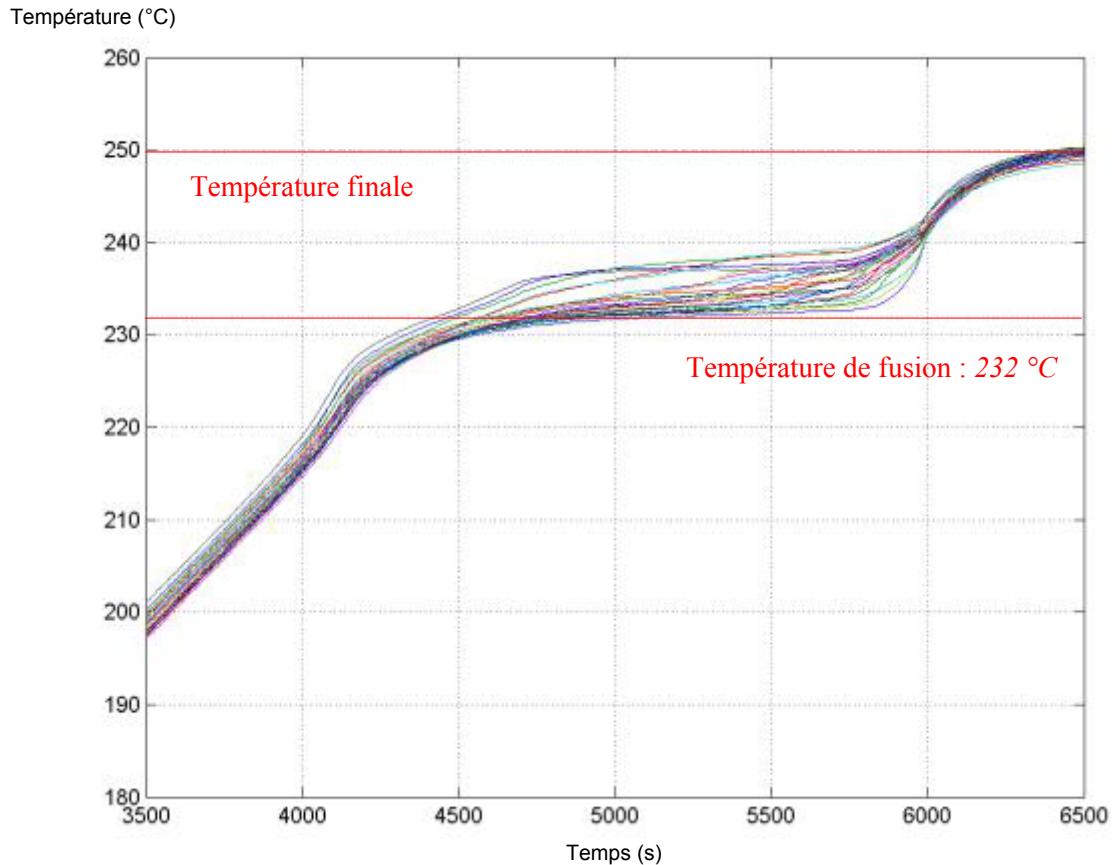


Figure E-12 : Fusion d'étain pur. Vitesse de fusion : deux degrés par minute.



**Figure E-13 :** Fusion d'étain pur. Vitesse de fusion : deux degrés par minute.  
Zoom sur la zone comprise entre 3500 secondes et 6500 secondes.

Les cartes de température qui vont suivre permettent d'illustrer l'inhomogénéité des échanges thermiques qui ont lieu entre la paroi d'échange thermique et le lingot solide durant la phase initiale de fusion. Il est aisé de constater que le réchauffement du lingot se fait par la partie inférieure de la paroi et non sur l'ensemble (cf. carte à  $t = 1000$  s). On peut supposer qu'un film de vide se trouve partiellement entre la paroi de fusion et le lingot suite au retrait du lingot à la fin de la solidification préparatoire. En revanche, dès que le lingot est entièrement liquide (cf. carte à  $t = 5500$  s), on constate que l'on a une boucle de convection conforme à celle attendue : le métal liquide épouse parfaitement la paroi d'échange thermique.

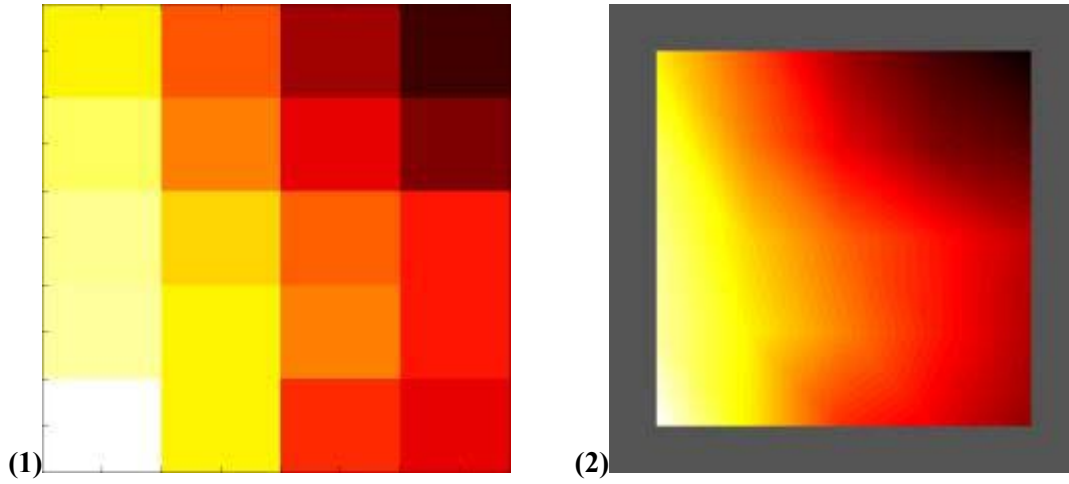


Figure E-14 : Cartes de température à  $t = 1000$  s. (1) Valeurs brutes. (2) Valeurs interpolées.  
 $[T_{min} = 113,518 \text{ °C} ; T_{max} = 116,754 \text{ °C}]$ .

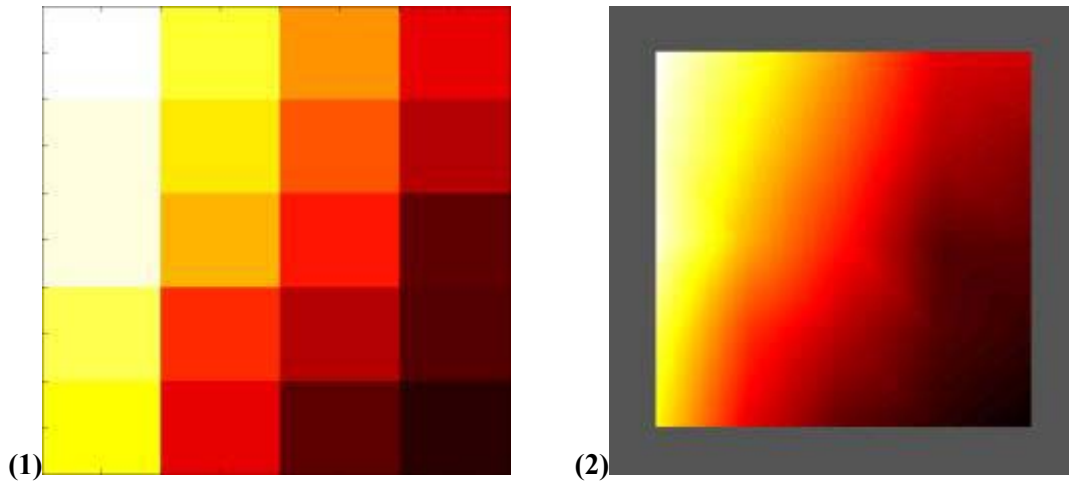


Figure E-15 : Cartes de température à  $t = 5500$  s. (1) Valeurs brutes. (2) Valeurs interpolées  
 $[T_{min} = 232,402 \text{ °C} ; T_{max} = 238,707 \text{ °C}]$ .

$$t = 1000 \text{ s} : \begin{bmatrix} 115,852 & 115,1 & 114,251 & 113,814 & 113,518 \\ 116,229 & 115,305 & 114,603 & 114,096 & 113,9 \\ 116,388 & 115,713 & 115,186 & 114,794 & 114,389 \\ 116,447 & 115,868 & 115,332 & 114,807 & 114,329 \\ 116,754 & 115,85 & 114,884 & 114,586 & 114,17 \end{bmatrix} \quad (\text{E.16})$$

$$t = 5500 \text{ s} : \begin{bmatrix} 238,707 & 237,39 & 236,098 & 234,52 & 234,349 \\ 238,45 & 236,889 & 235,538 & 234,03 & 233,628 \\ 238,483 & 236,349 & 234,885 & 233,215 & 233,182 \\ 237,6 & 235,16 & 234,008 & 233,129 & 232,821 \\ 237,086 & 234,472 & 233,2 & 232,741 & 232,402 \end{bmatrix} \quad (\text{E.17})$$

### E.2.2 : Les mesures de température et l'alliage étain-bismuth.

Différentes mesures ont été effectuées durant des solidifications d'alliage. Deux vitesses de solidification ont été choisies : cinq degrés par minute et deux degrés par minute. L'état initial correspond à un bain liquide à 250 °C. Si une telle température a été choisie, cela est dû à la phase de réglage du système de compensation des pertes thermiques qui peut considérablement faire varier la température. Ce réglage se fait alors que le lingot à solidifier est à l'état liquide. Il faut donc absolument éviter de commencer à solidifier le lingot durant ces réglages.

N° du lingot	Refroidissement	Remarques
Lingot n°1	2 °.mn <sup>-1</sup>	Pertes thermiques mal compensées.
Lingot n°2	2 °.mn <sup>-1</sup>	Rupture du vide lors de la solidification..
Lingot n°3	5 °.mn <sup>-1</sup>	R.A.S.
Lingot n°4	5 °.mn <sup>-1</sup>	R.A.S.
Lingot n°5	2 °.mn <sup>-1</sup>	R.A.S.
Lingot n°6	2 °.mn <sup>-1</sup>	R.A.S.
Lingot n°7	5 °.mn <sup>-1</sup>	R.A.S.
Lingot n°8	5 °.mn <sup>-1</sup>	R.A.S.

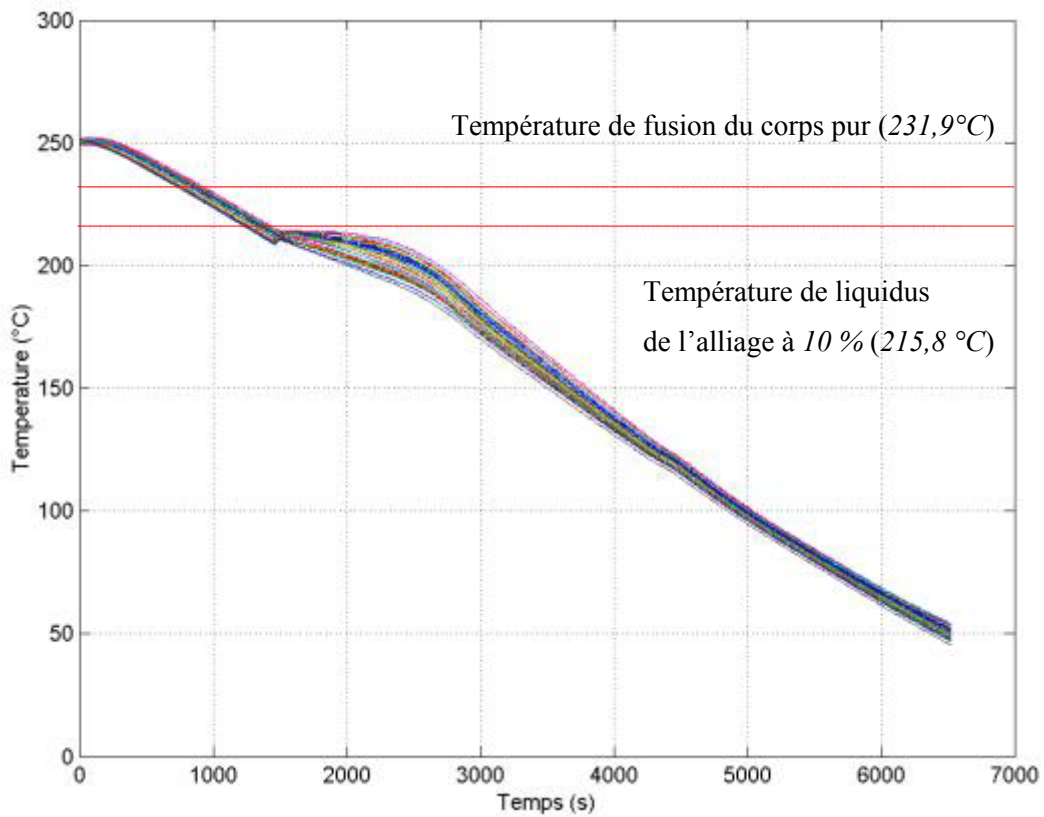
Figure E-16 : Tableau récapitulatif des vitesses de refroidissement.

#### E.2.2.a : Mesures de température et refroidissement de 2 °.mn<sup>-1</sup>.

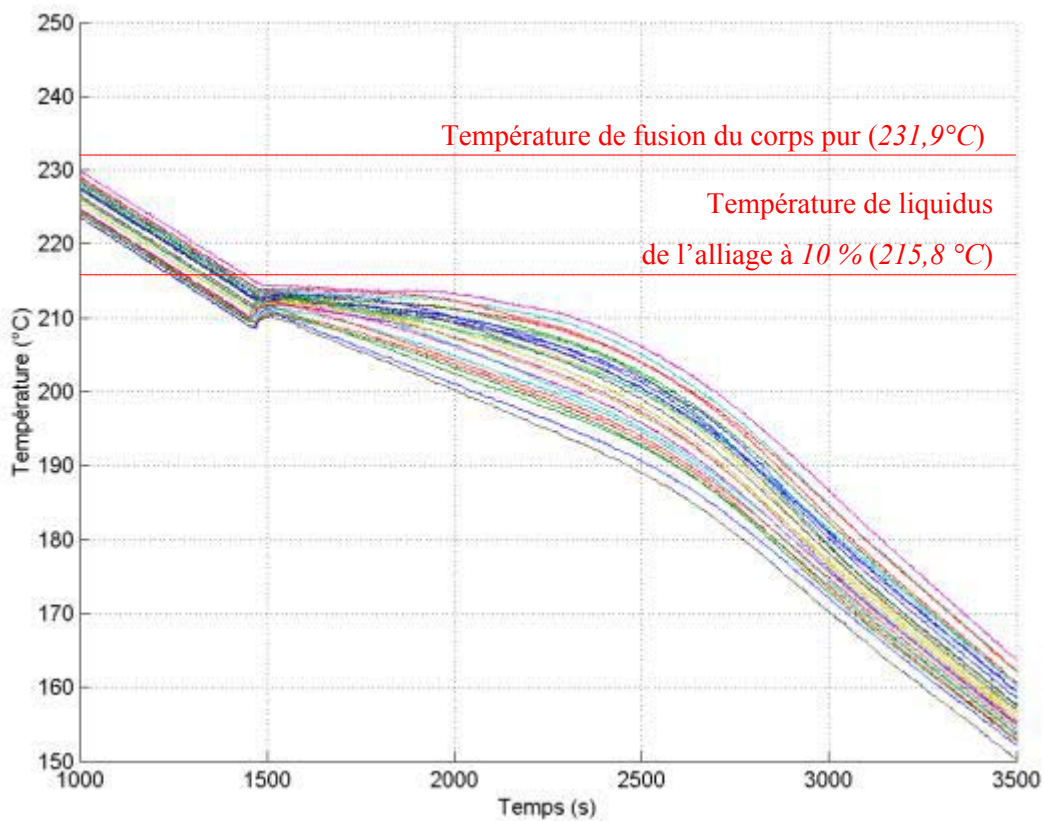
On trouvera sur la figure E-17 l'ensemble des mesures de température concernant la solidification d'un lingot d'alliage SnBi 10 % wt. Le refroidissement s'effectue à une vitesse de deux degrés par minute. Il est possible d'observer un plateau de température qui correspond aux thermocouples les plus éloignés de la paroi d'échange thermique (thermocouples TC1 à TC5, i.e. la dernière colonne). Ce plateau est consécutif au rejet de chaleur latente dû à la solidification de l'alliage. Il est également possible d'apercevoir un rebond de température concernant les thermocouples de la première colonne, i.e. la colonne la plus proche de la paroi de refroidissement. L'explication la plus vraisemblable quant à la présence de ces rebonds est l'apparition, au début de la solidification, d'une importante résistance thermique entre la paroi d'échange thermique et le lingot en cours de solidification. Son apparition perturbe fortement l'évolution du flux extrait et donc les conditions de refroidissement. Enfin, ces rebonds sont d'autant moins visibles que l'on s'éloigne de la paroi de refroidissement. Leur amplitude est de l'ordre de deux degrés. On peut observer, sur l'ensemble des courbes, un décalage de deux à trois degrés par rapport à la température théorique de liquidus qui est de 215,8 °C. Nous renvoyons au



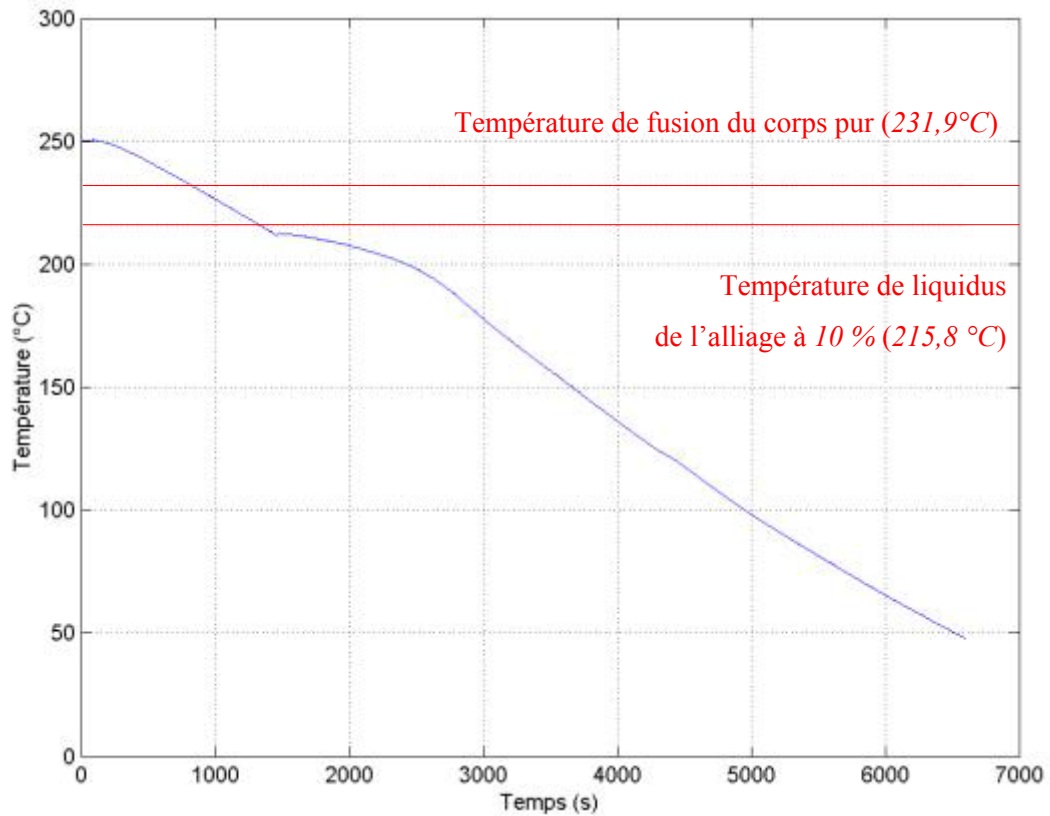
paragraphe E-1 pour une explication. Les résultats corrigés devront en tenir compte. Cela ne change guère l'allure et l'évolution des courbes.



(1)



(2)

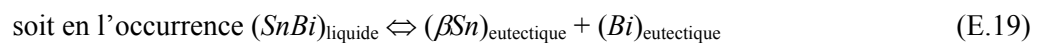
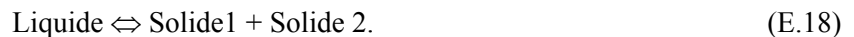


(3)

Figure E-17 : Solidification d'étain-bismuth 10 % wt. Refroidissement de deux degrés par minute.

- (1) Thermogrammes d'ensemble de la solidification. (2) Zoom sur la zone de solidification.  
 (3) Evolution de la température moyenne en fonction du temps.

Que ce soit au niveau de l'ensemble des thermogrammes ou au niveau du tracé de l'évolution temporelle de la température moyenne, un léger rebond est observable aux alentours de 120-125 °C. Or la température eutectique de l'alliage est de 139 °C. Ce rebond peut correspondre à la solidification finale du liquide interdendritique même s'il intervient un peu tard. Toutefois, pour rappel, l'équilibre eutectique correspond au changement de phase suivant :



où  $(\beta\text{Sn})_{\text{eutectique}}$  est une solution solide d'étain à 21 % en bismuth et  $(\text{Bi})_{\text{eutectique}}$  une solution solide de bismuth à 0,1 % d'étain. L'étain est très peu soluble dans la phase solide bismuth. Il est nécessaire, pour être à l'équilibre eutectique, de faire germer la solution solide riche en bismuth  $(\text{Bi})_{\text{eutectique}}$ . Il y a une « surfusion », une barrière de germination à franchir qui peut expliquer en très grande partie le décalage entre la température eutectique théorique et le rebond mesuré. Une autre part du décalage est

expliquée par le décalage des mesures relatives des températures (deux à trois degrés). L'un et l'autre des décalages qui viennent d'être cités résolvent le problème de retard du « rebond eutectique ».

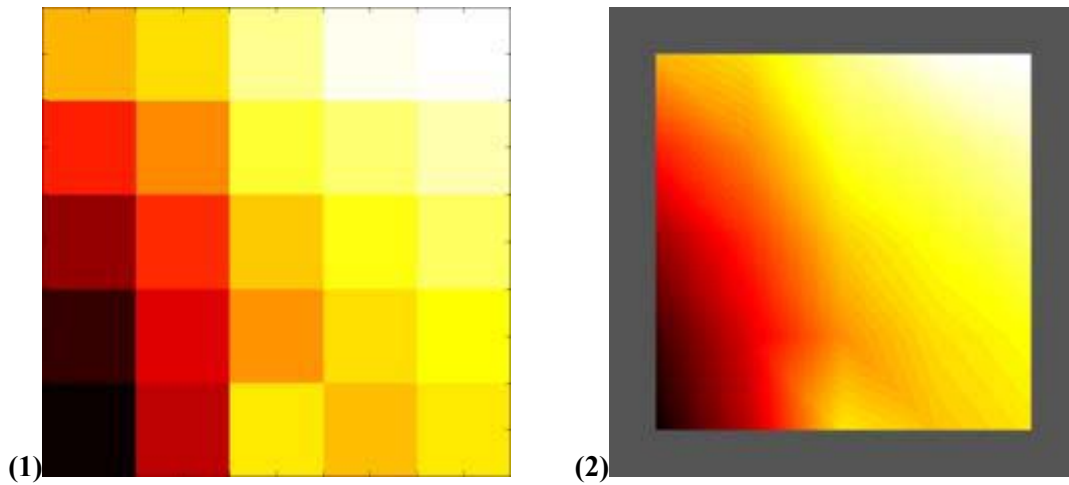


Figure E-18 : Cartes de température à  $t = 1750$  s. (1) Valeurs brutes. (2) Valeurs interpolées  
 $[T_{min} = 205,354$  C ;  $T_{max} = 213,762$  °C].

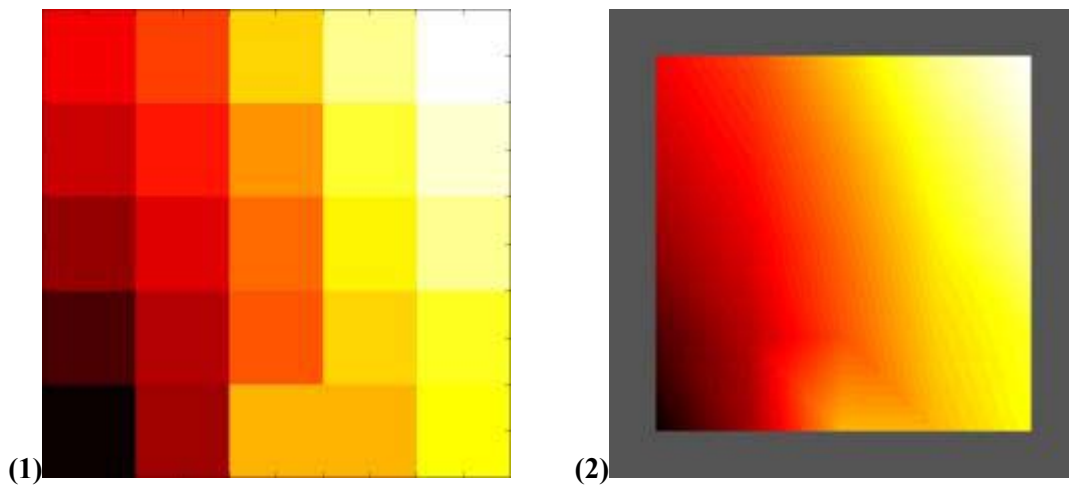
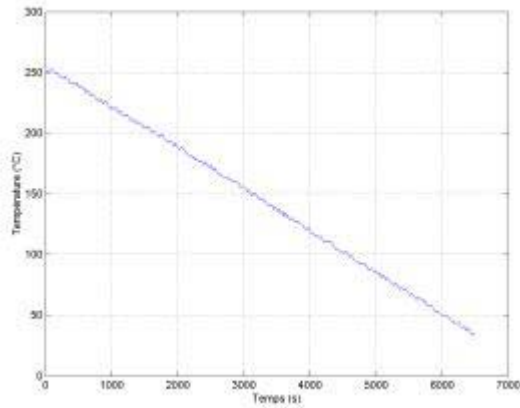


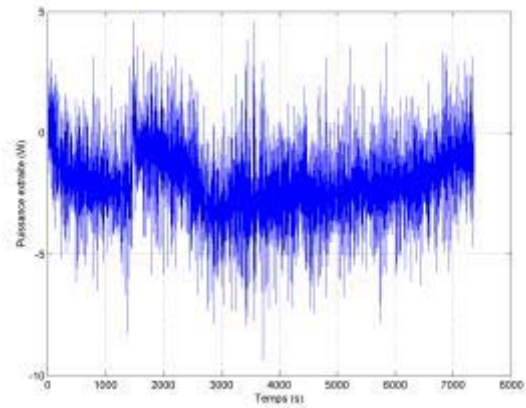
Figure E-19 : Cartes de température à  $t = 2500$  s. (1) Valeurs brutes. (2) Valeurs interpolées  
 $[T_{min} = 189,039$  °C ;  $T_{max} = 206,179$  °C].

$$t = 1750 \text{ s} : \begin{bmatrix} 210,679 & 211,249 & 212,755 & 213,592 & 213,762 \\ 208,779 & 210,119 & 211,941 & 212,45 & 213,072 \\ 207,079 & 208,954 & 211,001 & 211,712 & 212,349 \\ 205,986 & 208,083 & 210,256 & 211,216 & 211,633 \\ 205,354 & 207,597 & 211,362 & 210,866 & 211,317 \end{bmatrix} \quad (\text{E.20})$$

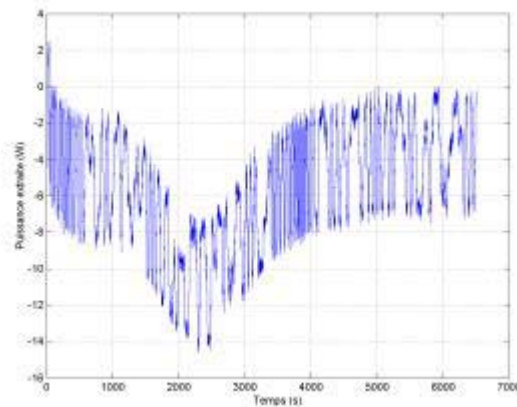
$$t = 2500 \text{ s} : \begin{bmatrix} 195,064 & 197,063 & 200,58 & 204,08 & 206,179 \\ 193,873 & 195,833 & 199,079 & 202,592 & 205,147 \\ 192,546 & 194,647 & 198,009 & 201,411 & 204,091 \\ 190,685 & 193,53 & 197,371 & 200,66 & 202,241 \\ 189,039 & 192,8687 & 199,966 & 199,966 & 201,866 \end{bmatrix} \quad (\text{E.21})$$



(1)



(2)



(3)

Figure E-20 : (1) Evolution de la température de paroi ( $^{\circ}\text{C}$ ) ; (2) Puissance extraite ( $W$ ) calculée à partir de la température moyenne du lingot ; (3) Puissance extraite ( $W$ ) calculée à partir des mesures de température à l'intérieur de l'échangeur.

La température de paroi et son évolution temporelle montrent bien plus de fluctuations que dans le cas de l'étain pur. Ces fluctuations sont visibles sur l'ensemble des solidifications d'étain-bismuth effectuées. Cela peut être imputable à la convection qui est plus importante qu'avec l'étain. La résistance de contact intervient également. La régulation de la température de paroi s'en retrouve légèrement affectée. Consécutivement, la courbe représentant la puissance extraite présente de nombreuses fluctuations. Une courbe de tendance, tracée à partir d'une moyenne mobile, permet

d'avoir un tracé plus lisible (cf. figure E-20). En examinant les deux courbes de puissances extraites déterminées à partir des deux méthodes de calcul et en faisant abstraction des fluctuations, on peut remarquer une évolution similaire jusqu'au début de la solidification (aux alentours de *1500 secondes*), moyennant les remarques préalablement faites au niveau du calcul des puissances pour l'étain pur. Cela n'est plus du tout le cas de par la suite, le rejet de chaleur latente se faisant ressentir.

On peut espérer que les corrections à effectuer sur les températures tendront à fortement réduire ces fluctuations et lisser les courbes tracées.

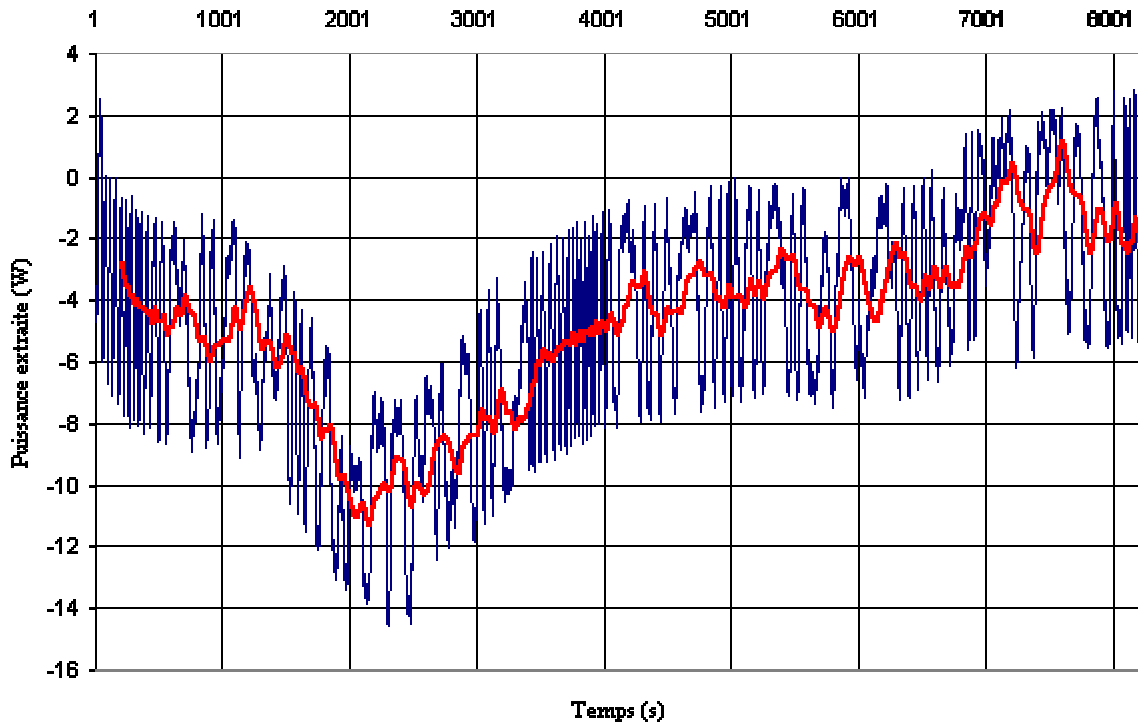
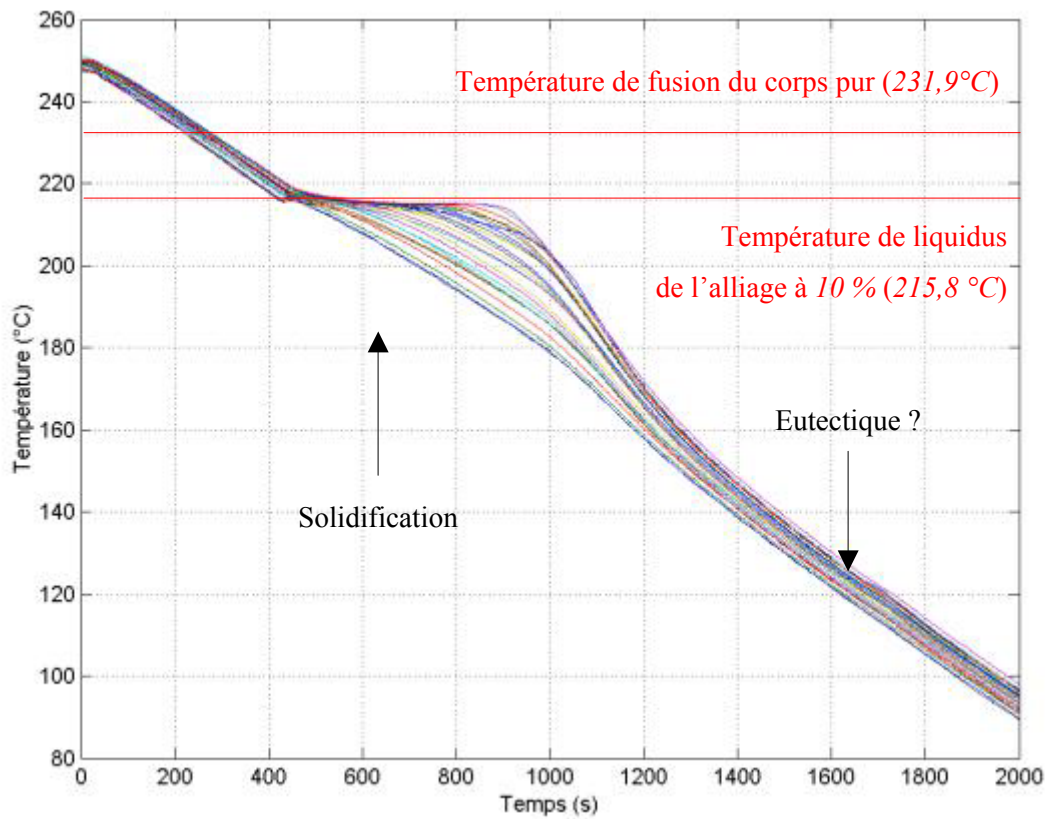


Figure E-21 : (bleu) Puissance extraite calculée à partir des mesures de températures dans l'échangeur cuivre ; (rouge) Moyenne mobile.

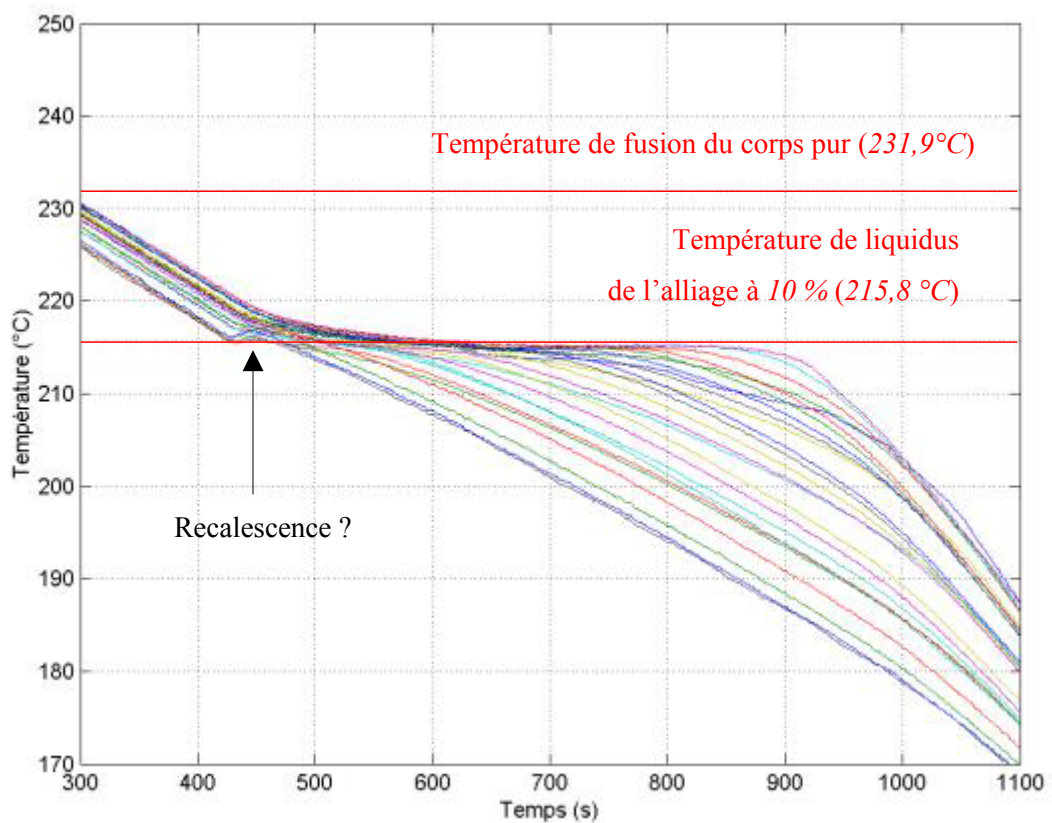
#### E.2.2.b : Mesures de température et refroidissement de $5\text{ }^{\circ}\text{.mn}^{-1}$ .

Des solidifications effectuées avec une vitesse de refroidissement de cinq degrés par minute ont également été réalisées. L'objectif est, en augmentant la vitesse d'extraction de chaleur, de rendre le flux extrait encore plus unidirectionnel. Il s'agit également de réaliser des solidifications plus rapides. Un rebond de certaines mesures tout au début du processus de solidification (vers *450 secondes*), rebond dont l'amplitude va de  $1$  à  $2\text{ }^{\circ}\text{C}$ , est fortement visible. Les explications apportées précédemment (paragraphe E.2.2.a) restent d'actualité. On observe un léger rebond au niveau des températures mesurées vers *1700 s*. Ce rebond correspond t'il à la solidification du liquide interdendritique ? Dans l'affirmative, celle-ci intervient encore une fois tardivement en regard de la

température : vers 125 °C pour une température eutectique de 139 °C. Les conclusions restent les mêmes que pour les solidifications d'étain-bismuth à deux degrés par minute.

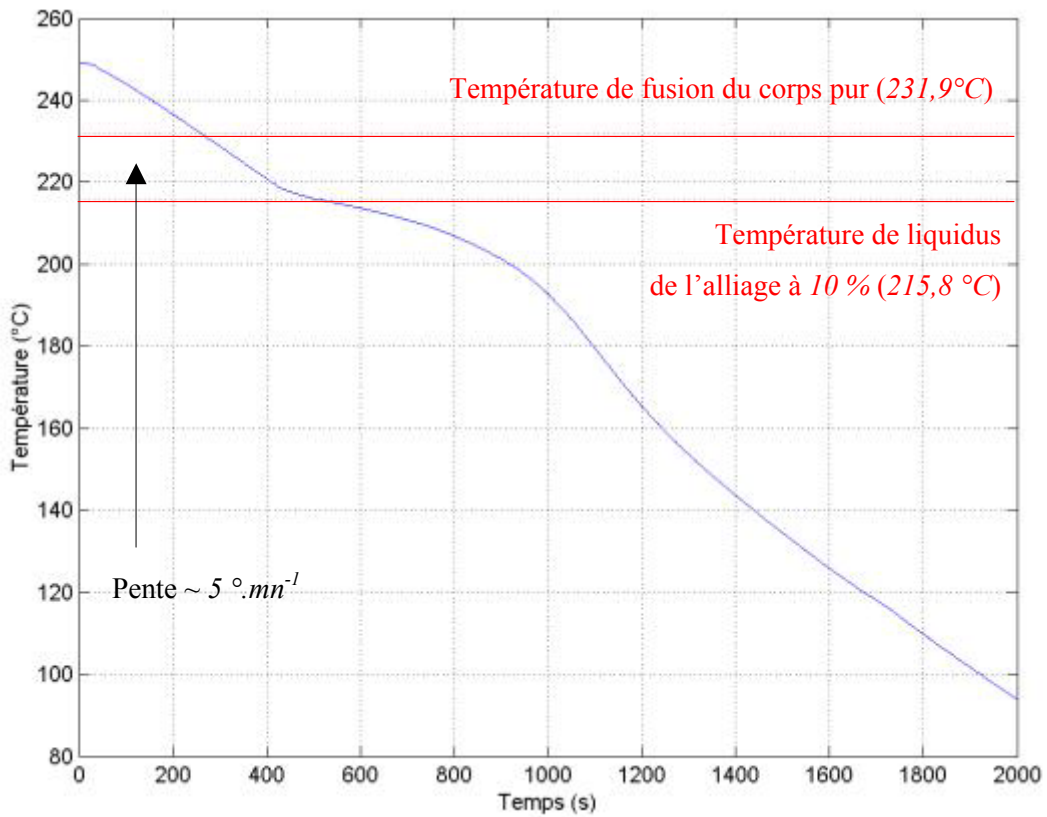


(1)



(2)





(3)

Figure E-22 : Solidification d'étain-bismuth 10 % wt.

Vitesse de refroidissement de cinq degrés par minute.

(1) Thermogrammes d'ensemble de la solidification.

(2) Zoom sur la zone de solidification.

(3) Evolution de la température moyenne.

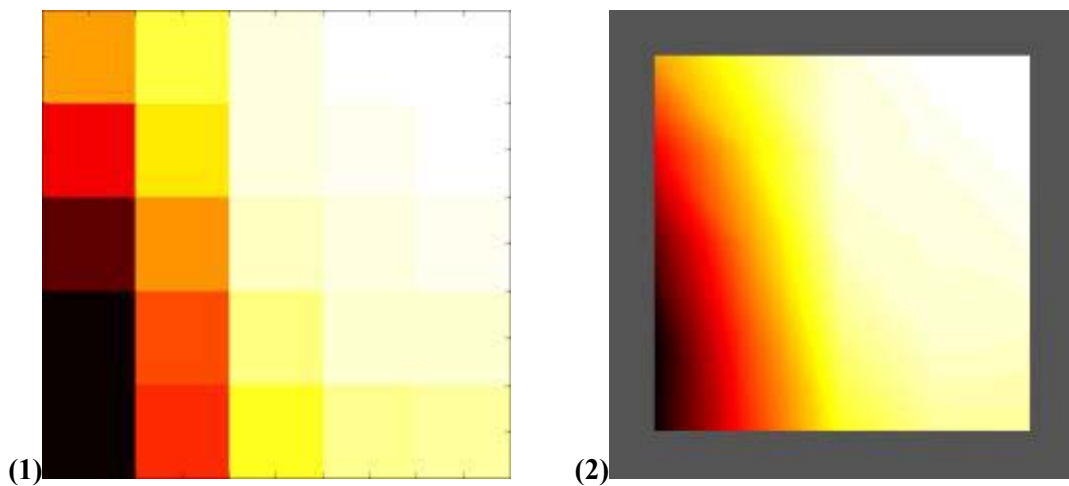


Figure E-23 : Cartes de température à  $t = 640 \text{ s}$ . (1) Valeurs brutes. (2) Valeurs interpolées.

$[T_{min} = 205,351 \text{ } ^\circ\text{C} ; T_{max} = 215,387 \text{ } ^\circ\text{C}]$ .

$$t = 640 \text{ s} : \begin{bmatrix} 211,442 & 213,496 & 215,015 & 215,376 & 215,387 \\ 208,865 & 212,42 & 215,027 & 215,094 & 215,387 \\ 206,66 & 211,279 & 214,756 & 214,948 & 215,083 \\ 205,351 & 210,162 & 214,049 & 214,858 & 214,767 \\ 205,374 & 209,605 & 213,1 & 214,248 & 214,305 \end{bmatrix} \quad (\text{E.22})$$

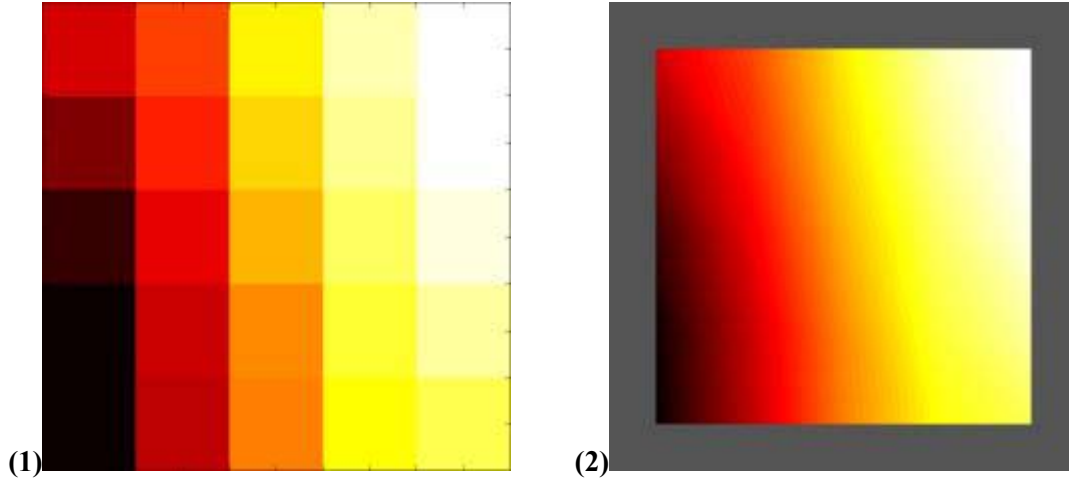
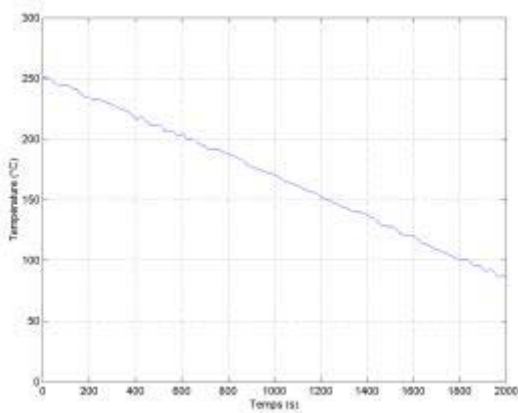


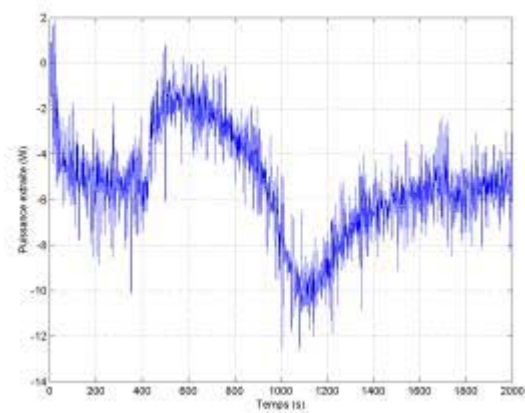
Figure E-24 : Cartes de température à  $t = 840 \text{ s}$ . (1) Valeurs brutes. (2) Valeurs interpolées.

$$[T_{min} = 191,316 \text{ } ^\circ\text{C} ; T_{max} = 215,14 \text{ } ^\circ\text{C}].$$

$$t = 840 \text{ s} : \begin{bmatrix} 198,501 & 202,433 & 208,462 & 213,191 & 215,14 \\ 195,567 & 201,101 & 207,559 & 212,443 & 215,072 \\ 192,985 & 199,422 & 206,208 & 211,214 & 214,283 \\ 191,602 & 198,066 & 204,896 & 210,197 & 212,692 \\ 191,316 & 197,669 & 204,442 & 209,074 & 210,875 \end{bmatrix} \quad (\text{E.23})$$

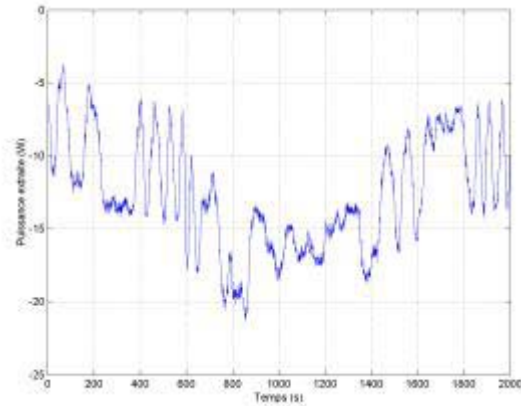


(1)



(2)





(3)

Figure E-25 : (1) Evolution temporelle de la température de paroi ( $^{\circ}\text{C}$ ) ; (2) Puissance extraite ( $W$ ) calculée à partir de la température moyenne du lingot ; (3) Puissance extraite ( $W$ ) calculée à partir des mesures de température à l'intérieur de l'échangeur.

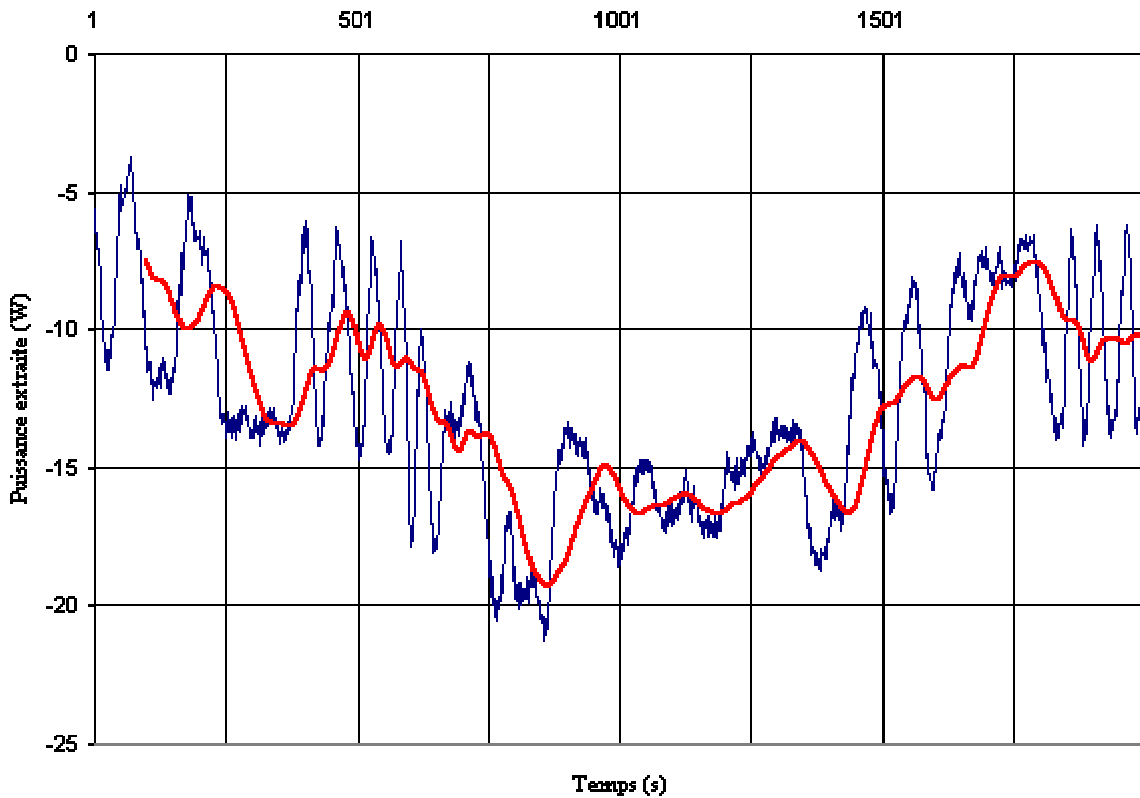


Figure E-26 : (bleu) Puissance extraite calculée à partir des mesures de températures dans l'échangeur cuivre ; (rouge) Moyenne mobile.

De même que précédemment, des estimations de la puissance extraite sont représentées sous forme de courbes au niveau des figures E-25 et E-26. Ces estimations correspondent aux méthodes de

calcul présentées et discutées au préalable. La vitesse de refroidissement plus élevée évite que les courbes ne soient trop bruitées et fluctuantes : elles le restent tout de même bien plus qu'avec l'étain pur. On y retrouve les différentes zones préalablement décrites dont celle, centrale, qui correspond à une période de rejet de chaleur latente.

### E.2.3 : Mesures de température et estimation de la convection.

Comme il est possible de le voir sur l'ensemble des thermogrammes présentés précédemment, des fluctuations de température sont présentes tout au long des mesures. Si l'on étudie, par l'intermédiaire de transformées de Fourier, ces fluctuations de température, il est possible de trouver quelques fréquences caractéristiques d'oscillations (cf. figure E-27). Ces fluctuations sont encore plus accentuées avec les quelques thermocouples sans soudures froides, directement amorcés à travers le métal liquide. Les fréquences caractéristiques mises en évidence permettent d'estimer des temps de retournement et de là, en rapportant ces temps à la longueur du lingot, des vitesses convectives.

Les mesures ont été faites avec un pas d'acquisition d'un dixième de seconde alors que le système est stable à 250 °C.

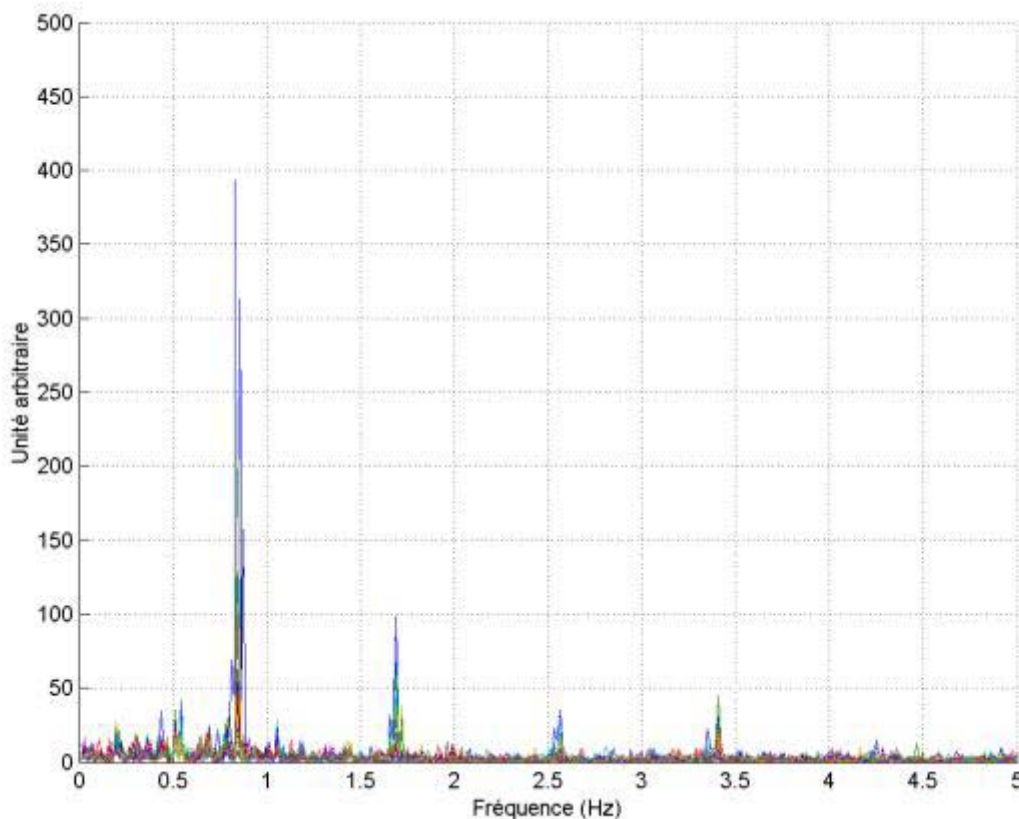


Figure E-27 : Spectre des fluctuations.

Ainsi, les pics principaux se situant à  $0,8 \text{ Hz}$ , cela nous donne un temps de retournement de  $1,25$  secondes soit, rapporté à une longueur de lingot de  $5 \text{ cm}$ , une vitesse caractéristique de convection de  $4 \text{ cm.s}^{-1}$ . Cette valeur est comparable en ordre de grandeur à celle calculée dans le paragraphe E.4 (i.e. le centimètre par seconde).

Remarque : Si ce sont effectivement des fluctuations de vitesse, les fluctuations thermiques mesurées correspondantes doivent s'atténuer au cours du temps car la vitesse décline au passage du front de solidification. Toutefois, il est difficile, compte tenu de la durée d'une expérience de solidification, d'effectuer des mesures à une telle fréquence d'acquisition ( $10 \text{ Hz}$  !). Il serait tout de même intéressant de vérifier ce point.

### **E.3 : Radiographies X et analyses chimiques des échantillons.**

Des radiographies X ont été réalisées sur les différents lingots d'étain-bismuth solidifiés. Elles ont été effectuées au CEA de Saclay. Les échantillons et leur moule en plomb sont montrés sur la figure E-28. Les résultats obtenus sont présentés au niveau de la figure E-30. Le principe des radiographies est basé sur la différence de densité entre étain et bismuth qui entraîne des différences d'absorption des rayons X. Cela permet d'établir des cartes en niveaux de gris de la concentration en bismuth du solide. Ces cartes sont moyennées sur l'ensemble de l'épaisseur de l'échantillon. Les zones les plus claires correspondent aux zones les plus riches en bismuth, les zones les plus sombres aux zones les plus pauvres (cf. annexe D pour le protocole de radiographie).



Figure E-28 : Photo des échantillons dans leur moule, avant radiographie.

### E.3.1 : Quelles informations tirer des radiographies ?

Les radiographies permettent essentiellement d'obtenir des informations qualitatives. Les effets de bords (zones noires floues autour des échantillons) dus au moule en plomb empêchent d'avoir une carte correctement délimitée. Il peut également y avoir certains artefacts de mesure lors de la radiographie (par exemple la zone blanche sur la gauche de la radiographie n°6 qui est totalement absente des mesures de bismuth par dissolution effectuées par la suite). Elles permettent, étant donnée la taille de l'échantillon, de savoir où découper les lingots afin d'établir des métallographies, d'effectuer des mesures à la microsonde... Il est toutefois possible d'obtenir quelques informations supplémentaires : disposition et nombre des canaux, angles que ceux-ci font avec la verticale... Les radiographies correspondent, pour rappel, aux vitesses de refroidissement suivantes, récapitulées dans le tableau figure E-29 :

N° du lingot	Refroidissement	Remarques
<b>Lingot n°1</b>	$2 \text{ } ^\circ.mn^{-1}$	Pertes thermiques mal compensées.
<b>Lingot n°2</b>	$2 \text{ } ^\circ.mn^{-1}$	Rupture du vide lors de la solidification..
<b>Lingot n°3</b>	$5 \text{ } ^\circ.mn^{-1}$	R.A.S.
<b>Lingot n°4</b>	$5 \text{ } ^\circ.mn^{-1}$	R.A.S.
<b>Lingot n°5</b>	$2 \text{ } ^\circ.mn^{-1}$	R.A.S.
<b>Lingot n°6</b>	$2 \text{ } ^\circ.mn^{-1}$	R.A.S.
<b>Lingot n°7</b>	$5 \text{ } ^\circ.mn^{-1}$	R.A.S.
<b>Lingot n°8</b>	$5 \text{ } ^\circ.mn^{-1}$	R.A.S.

Figure E-29 : Tableau récapitulatif des vitesses de refroidissement.

Comme il est possible de le constater, entre les remarques du tableau et les radiographies correspondantes, une mauvaise compensation des pertes thermiques (que ces pertes soient dues à un mauvais réglage de la boîte de Kirchhoff ou à une fuite de vide) modifie considérablement les cartes de concentration et ceci d'autant plus que les pertes sont grandes. On trouve toutefois trace d'une ségrégation majeure dans la partie basse des lingots (1) et (2) due à une densité supérieure du bismuth par rapport à l'étain. De plus, les radiographies montrent systématiquement une zone de ségrégation dans le coin inférieur droit et des canaux ségrégés dans la partie gauche des lingots. Si l'on examine ces canaux, on peut remarquer que ceux-ci sont surmontés de zones très appauvries qui doivent correspondre à des zones de drainage de soluté vers les canaux (du haut vers le bas, toujours pour des considérations de densité).

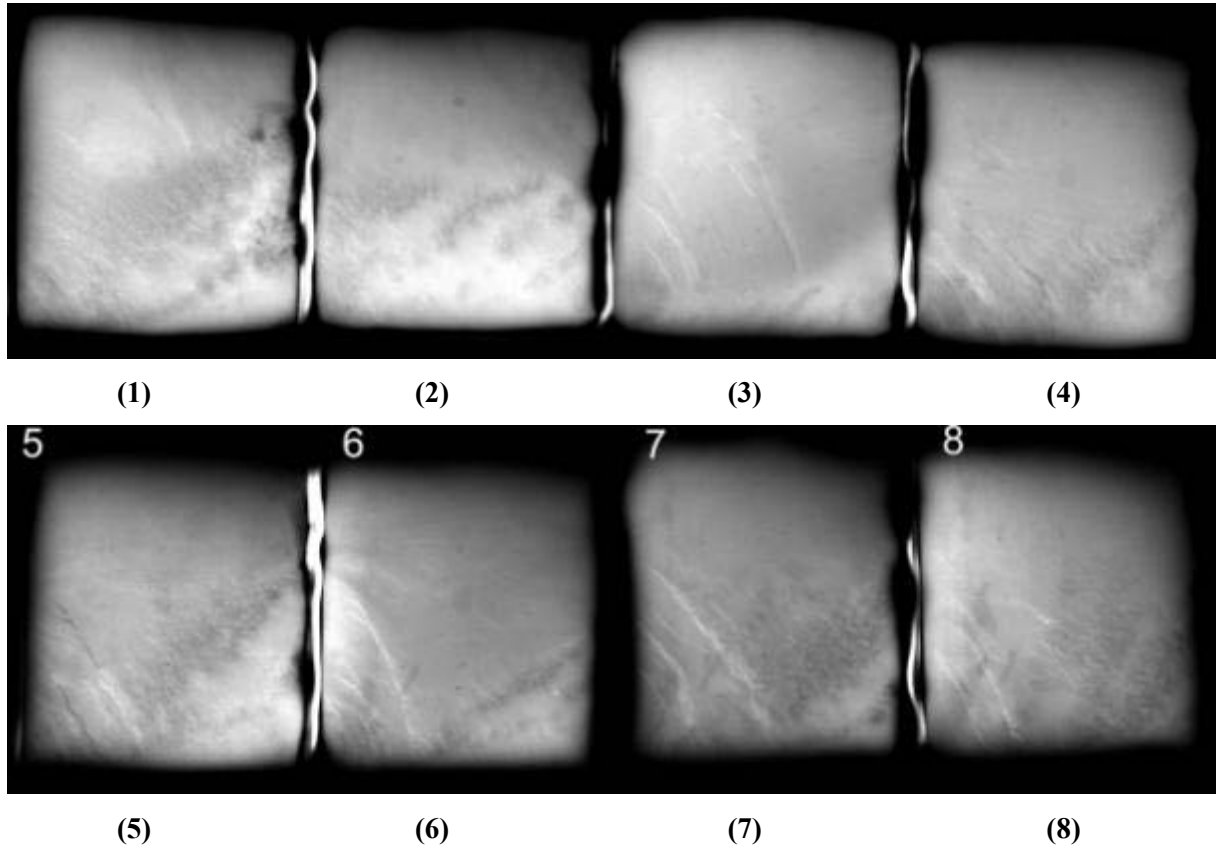


Figure E-30 : Radiographies X des différents lingots d'alliage solidifiés.

### E.3.2 : De l'échantillon brut à une carte maillée de concentration.

Un lingot a été découpé par électroérosion suivant un maillage  $12 \times 10$  afin d'établir une carte de concentration. Il s'agit du lingot n°6 solidifié à une vitesse de deux degrés par minute. Le découpage par un tel procédé permet de minimiser les pertes de matière estimées à deux dixièmes de millimètres par coupe. On obtient ainsi *120 éléments* d'environ  $5 \text{ mm} \times 5 \text{ mm} \times 10 \text{ mm}$ . Chaque élément, dont la position dans le lingot a été repérée, a été dosé en Bismuth par dissolution de l'étain. Une carte de concentration moyenne en Bismuth est reconstituée et représentée figure E-31. Le tableau comportant les valeurs mesurées lors des analyses et qui ont été utilisées pour tracer l'image de la figure E-31 est rapporté au niveau de la figure E-32. Les valeurs supérieures à la concentration nominales de 10 % ont été notées en gras. Cette analyse étant destructive, il n'en a été fait qu'une seule à présent. Il serait intéressant, dans un futur proche, de le répéter sur d'autres lingots (solidifiés dans des conditions expérimentales similaires) afin d'établir une carte type, plus valable d'un point de vue « statistique ». La radiographie correspondante (radiographie n°6) est présentée figure E-33.

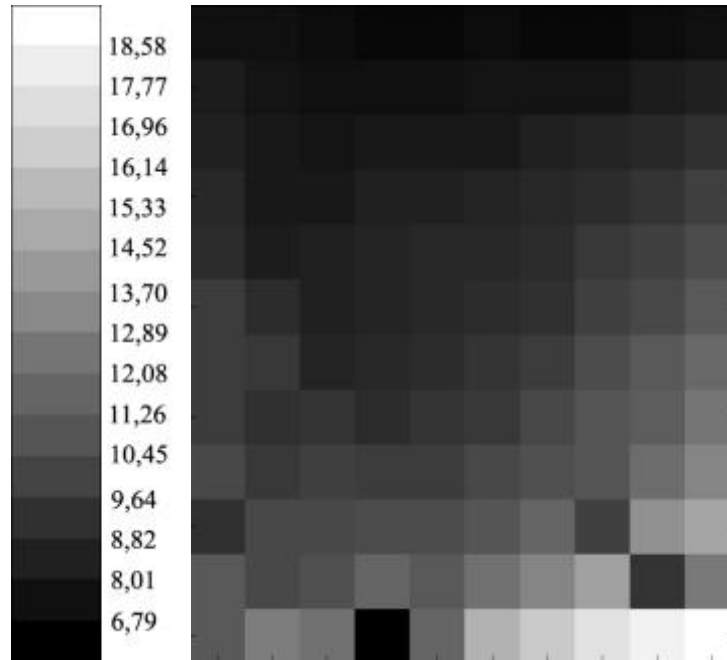


Figure E- 31 : Carte de concentration. [ $C_{min} = 6,79\%$  ;  $C_{max} = 18,99\%$ ]. Vitesse :  $2\text{ }^{\circ}.mn^{-1}$ .

7,75	7,67	7,42	7,30	7,24	7,44	7,33	7,36	7,49	7,64
8,20	7,89	7,74	7,58	7,71	7,84	7,87	7,96	8,26	8,53
8,43	8,04	7,95	7,98	8,04	8,16	8,45	8,61	8,89	9,20
8,78	8,12	8,13	8,44	8,52	8,65	8,79	9,10	9,47	<b>10,00</b>
9,04	8,31	8,47	8,59	8,81	8,90	9,14	9,62	<b>10,08</b>	<b>10,67</b>
9,82	8,98	8,46	8,71	8,83	9,00	9,32	9,99	<b>10,51</b>	<b>11,34</b>
9,88	9,64	8,73	8,85	9,10	9,46	9,88	10,61	<b>11,23</b>	<b>12,10</b>
9,82	9,37	9,41	9,03	9,46	9,77	<b>10,39</b>	<b>11,09</b>	<b>11,39</b>	<b>12,79</b>
<b>10,39</b>	9,67	<b>10,01</b>	9,82	9,88	<b>10,44</b>	<b>10,91</b>	<b>11,09</b>	<b>12,32</b>	<b>13,45</b>
9,21	<b>10,53</b>	<b>10,49</b>	<b>10,76</b>	<b>10,63</b>	<b>11,03</b>	<b>11,88</b>	9,99	<b>14,13</b>	<b>15,15</b>
<b>11,34</b>	<b>10,58</b>	<b>10,91</b>	<b>11,91</b>	<b>11,25</b>	<b>12,47</b>	<b>13,52</b>	<b>14,81</b>	9,50	<b>12,96</b>
<b>11,37</b>	<b>13,05</b>	<b>12,43</b>	6,76	<b>11,90</b>	<b>15,68</b>	<b>16,98</b>	<b>18,06</b>	<b>18,96</b>	<b>19,63</b>

Figure E-32 : Carte de concentration moyenne (% wt) en bismuth.

En gras sont notées les valeurs supérieures à la concentration nominale de 10 %.

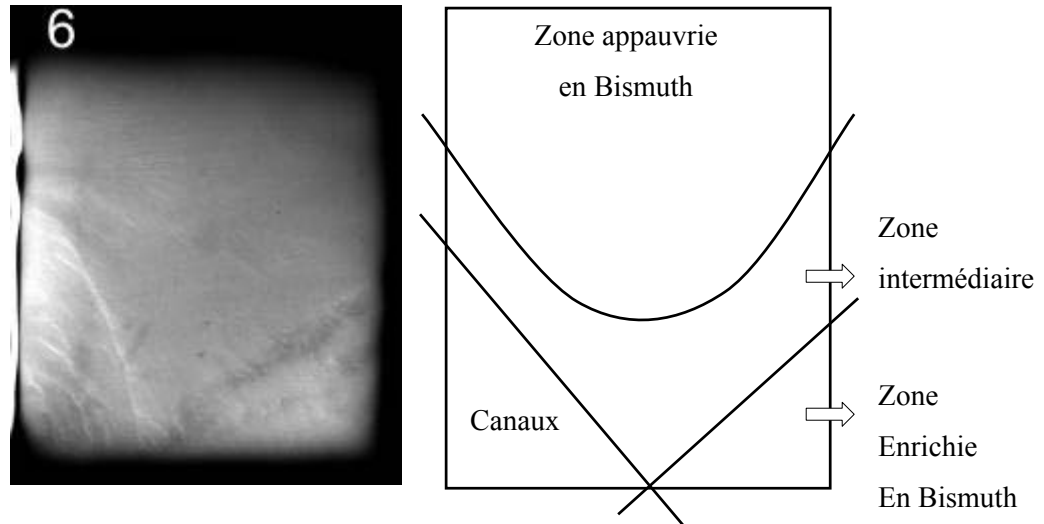


Figure E- 33 : Radiographie de l'échantillon n°6 (découpé et analysé).

Les moyennes ligne par ligne (en partant du bas) des concentrations solides en bismuth se répartissent de la manière suivante (tableau E-34) :

Ligne 1	Ligne 2	Ligne 3	Ligne 4
14,82 %	11,925 %	11,38 %	10,798 %

Ligne 5	Ligne 6	Ligne 7	Ligne 8
10,252 %	9,948 %	9,496 %	9,163 %

Ligne 9	Ligne 10	Ligne 11	Ligne 12
8,8 %	8,375 %	7,958 %	7,464 %

Figure E-34 : Tableau des concentrations moyennes en bismuth (% wt), ligne par ligne.

La moyenne totale de la concentration solide en bismuth s'établit à 10,0034 %. Compte tenu des arrondis faites sur les mesures (et les moyennes), on peut être rassuré sur la justesse de concentration initiale et l'efficacité du système d'élaboration des lingots présenté dans le chapitre D. Cela permet également d'estimer les pertes de matières dues au découpage par électroérosion comme non perturbatrices pour l'établissement de cette carte de concentration. Les moyennes, colonne par colonne, depuis la paroi gauche (paroi de refroidissement) sont données dans les tableaux de la figure E-35. Les courbes qui correspondent aux moyennes par lignes et aux moyennes par colonnes sont représentées figure E-36.

Colonne 1	Colonne 2	Colonne 3	Colonne 4	Colonne 5
9,502 %	9,321 %	9,179 %	8,81 %	9,281 %

Colonne 6	Colonne 7	Colonne 8	Colonne 9	Colonne 10
9,903 %	10,372 %	10,691 %	11,019 %	11,955 %

Figure E-35 : Tableau des concentrations moyennes en bismuth (% wt), colonne par colonne.

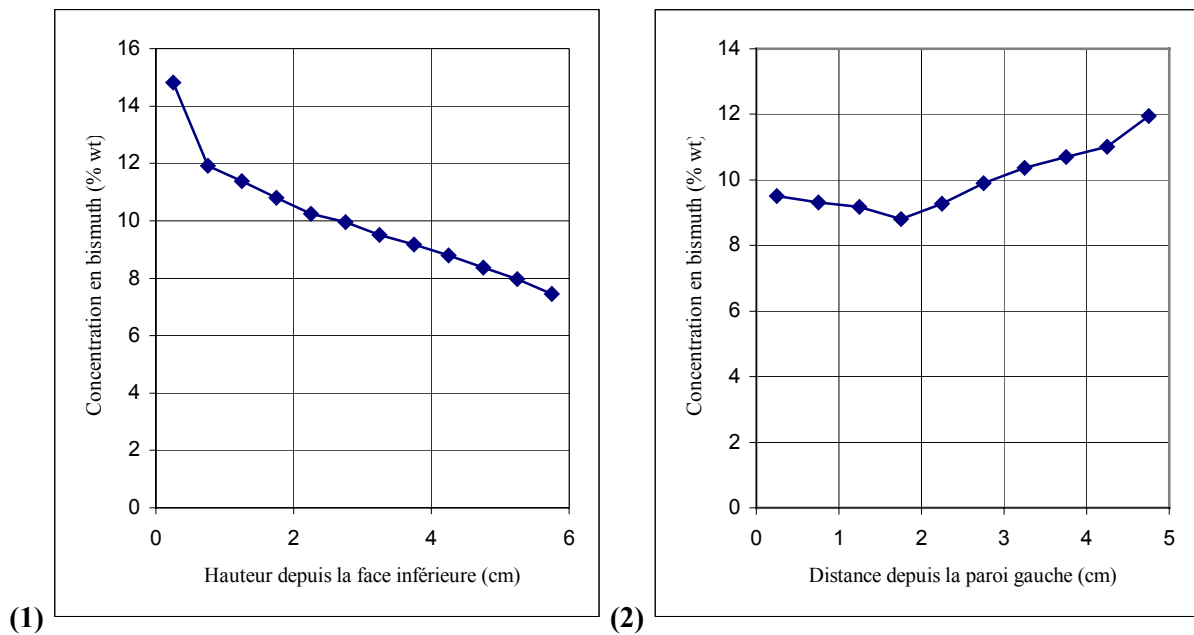


Figure E-36 : Profils de concentrations (% wt). Vitesse de solidification : deux degrés par minute.

(1) Profil vertical moyen ; (2) Profil horizontal moyen.

Au vu des différentes courbes précédentes, deux zones principales de ségrégation apparaissent. La première se situe dans la partie basse du lingot. Elle est principalement due au fait que le soluté (le bismuth) est plus dense que le solvant (l'étain). Il y a donc enrichissement en bismuth de la partie inférieure. Cette zone est, dans sa partie gauche, alimentée en soluté par l'intermédiaire des canaux discernables sur les radiographies. Sur sa partie droite, elle se confond avec la deuxième zone majeure de ségrégation qui correspond à la zone liquide dont la concentration en soluté augmente au fur et à mesure de la solidification. Cette zone deuxième correspond à la ségrégation normale des fondeurs. De part la configuration du dispositif, elle se retrouve dans le quart inférieur droit. Sa présence est également visible dans la dernière colonne qui correspond à une des dernières zones liquides lors du processus de solidification.



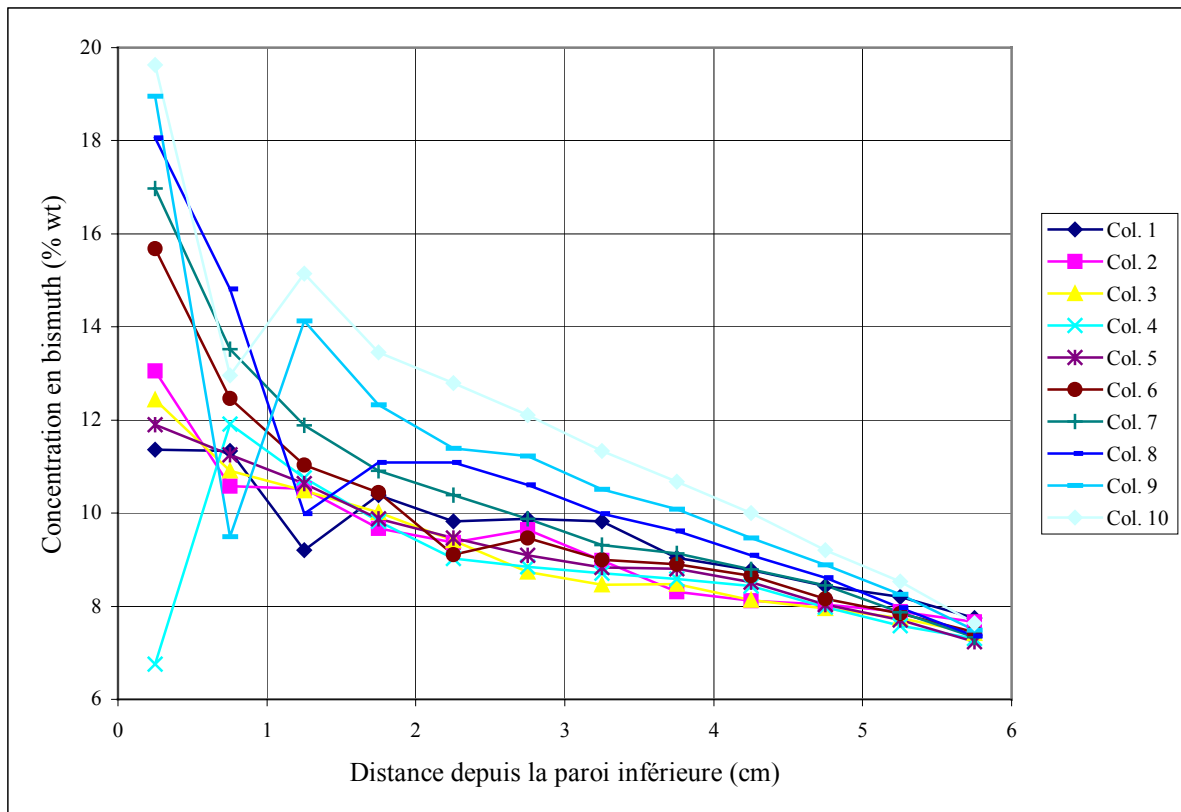
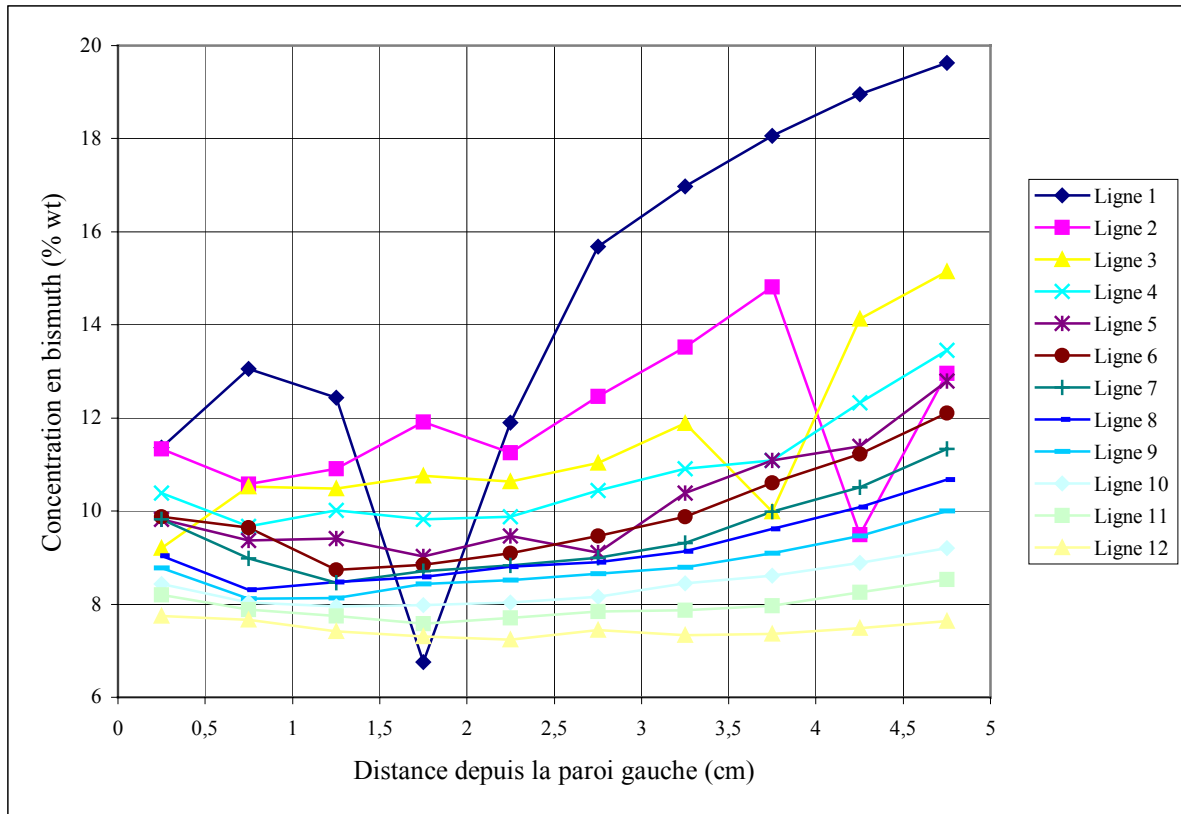


Figure E-37 : [Haut] Composition en bismuth (% wt) de chaque ligne horizontale, fonction de la distance à la paroi gauche (cm) ; [Bas] Composition en bismuth (% wt) de chaque colonne, fonction de la distance à la paroi inférieure (cm).

Un « point » à basse concentration est visible au niveau de la ligne la plus inférieure du lingot. Cette valeur (6,76 %) peut sembler singulière au regard des valeurs qui l'entourent. Elle correspond peut être à un point de germination dès le début de la solidification. Répéter l'établissement de carte de concentration permettrait peut être de vérifier la présence systématique ou non de cette zone. La radiographie permet de deviner que cette zone existe bel et bien et n'est par un artefact de mesure. Il en va de même pour l'ensemble des zones pauvres en bismuth en plein cœur des zones riches qui correspondent peut être à des zones de croissance équiaxe. Les cartes de macrostructure présentées paragraphe E.3.3 tendent à conforter ces explications.

Quoi qu'il en soit, il est possible d'établir une gamme de concentration type pour notre configuration qui va d'environ 7 % pour les zones les plus pauvres (partie haute de l'échantillon) jusqu'à 20 % pour les zones les plus riches (coin inférieur droit).

### **E.3.3 : Analyses chimiques : macrostructures et fraction eutectique.**

D'autres analyses que les radiographies et les dosages par dissolution ont été réalisées afin d'établir des cartes de macrostructures et pour vérifier le positionnement des canaux ségrévés dans l'épaisseur du lingot. Il est très difficile d'établir des cartes de microstructures car l'étain est un métal mou qui tend à s'étaler durant le polissage et donc à masquer ces microstructures. Les cartes de macrostructures ne sont pas plus aisées à réaliser compte tenu des dimensions de l'échantillon et de la régularité du polissage à obtenir pour que les attaques chimiques révèlent les grains. Compte tenu de ces difficultés, seules trois cartes ont été réalisées jusqu'à présent. Les deux premières ont été effectuées sur l'échantillon n°5, solidifié à une vitesse de deux degrés par minute : une carte sur la face verticale en contact avec les thermocouples dont sont issues les différentes courbes et cartes de température présentées jusqu'à présent, une seconde sur un plan vertical médian. Ces cartes sont présentées figures E-38 et E-39. La carte extérieure montre le développement de longs grains colonnaires avec toutefois des grains plus petits dans le quart inférieur droit qui peuvent correspondre à des grains équiaxes. La seconde montre quelques grands grains colonnaires mais une bien plus grande quantité de petits grains équiaxes. Au niveau des macrostructures, l'hypothèse de bidimensionnalité est mise gravement en défaut. Les traces obliques noires, situées dans le quart inférieur gauche, correspondent à des zones de retassures. Elles se trouvent dans la zone de développement des canaux ségrévés, telle que dévoilée par les radiographies des échantillons. Ces retassures correspondent à des zones dont la teneur en bismuth est très faible. En effet, le bismuth est un semi-métal qui se dilate à la solidification. L'étain lui se contracte à la solidification. La teneur en bismuth de l'alliage fait donc considérablement varier les coefficients d'expansion suivant les zones. Les zones à faible teneur en bismuth se contractent plus fortement en se solidifiant d'où l'apparition de retassures.

Paroi de  
refroidissement.



Figure E-38 : Macrostructure de la face extérieure de l'échantillon n°5.  
Vitesse de refroidissement de  $2 K.mn^{-1}$ .

Paroi de  
refroidissement.



Figure E-39 : Macrostructure de la face médiane de l'échantillon n°5.  
Vitesse de refroidissement de  $2 K.mn^{-1}$ .

La troisième carte de macrostructure a été effectuée sur l'échantillon n°7 solidifié à une vitesse de cinq degrés par minute. Il s'agit d'une coupe horizontale effectuée à deux centimètres depuis la paroi inférieure de l'échantillon. Cette coupe a été réalisée dans le but de vérifier le positionnement dans l'épaisseur des canaux ségrégués. Malheureusement, la carte obtenue ne permet pas de répondre à cette question. Qui plus est, le polissage n'est pas assez fin pour discerner les microstructures.



Figure E-40 : Macrostructure réalisée sur l'échantillon n°7. Plan horizontal.

Vitesse de refroidissement de  $5 K.mn^{-1}$ .

Une carte de fraction eutectique a été réalisée sur la face médiane correspondant à la figure E-39. Cette carte est visible figure E-41.

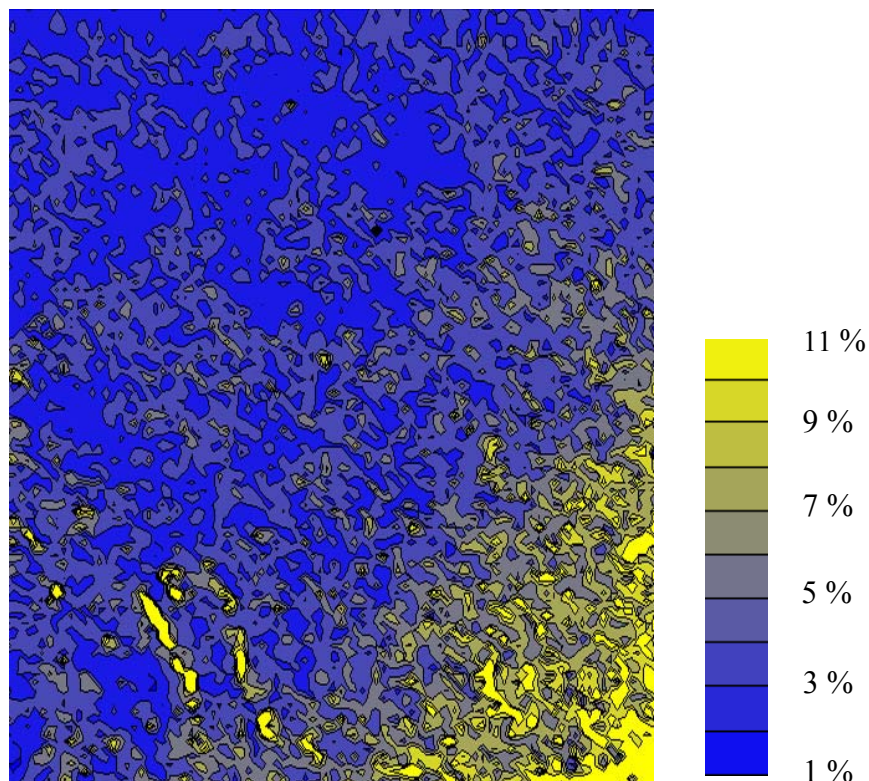


Figure E-41 : Carte de fraction eutectique. Echantillon n°5. Plan médian.

Vitesse de refroidissement de  $2 K.mn^{-1}$ .

Cette carte représente la quantité de solide à la composition eutectique. Celle ci va jusqu'à 11 % pour les zones les plus riches. Les zones riches en eutectique correspondent aux canaux ségrégués ainsi qu'au triangle terminal de solidification (inférieur droit). Les résultats obtenus quant aux ségrégations vont totalement dans le même sens. Toutefois, cette carte met en évidence l'existence de ces canaux au centre même de l'échantillon. Il serait nécessaire d'effectuer le même type de carte sur la face extérieure afin de déterminer si les ségrégations traversent de part et d'autre le lingot (très peu probable), si d'autres ségrégations se situent sur cette face ou s'il n'y en a pas (cas le plus probable).

## **E.4 : Simulation numérique du Benchmark.**

A partir du code numérique développé et présenté dans les parties B et C de cet exposé, différentes simulations bidimensionnelles et tridimensionnelles de l'expérience ont été réalisées. Les deux cas ont été étudiés afin d'observer les différences de résultats éventuels. Différentes vitesses de refroidissement ont été également étudiées.

### **E.4.1 : Quelles conditions initiales ? Quelles conditions aux limites ?**

Nous nous limiterons aux conditions théoriques de l'expérience de solidification. Le bain liquide est uniforme en température. La concentration est de la forme :

$$C(x, y) = C_0 \pm 0.0005C_0 \quad (\text{E.24})$$

pour les mêmes raisons que celles présentées dans la partie C. Les vitesses sont nulles sur l'ensemble du domaine (liquide au repos). La température initiale minimale du domaine étant bien supérieure à la température de liquidus de l'alliage, la fraction liquide est initialement fixée à 1.

Les conditions aux limites, quant à elles, sont les suivantes :

- (i) Les parois sont toutes considérées comme adiabatiques sauf, bien entendu, la paroi de refroidissement.
- (ii) Les vitesses sont nulles au niveau des parois.
- (iii) Pas de transfert de soluté au niveau des parois.
- (iv) Un refroidissement lent est appliqué sur la paroi gauche, refroidissement de la forme :



$$T = T_{\text{initiale}} - (V_r)_{mn} \frac{t}{60} \quad (\text{E.25})$$

où  $(V_r)_{mn}$  est la vitesse de refroidissement exprimée en degrés par minute (en l'occurrence deux ou cinq degrés par minute),  $t$  le temps en secondes.

#### E.4.2 : Quelques nombres adimensionnels.

Compte tenu des différentes propriétés physiques données en annexe A quant à l'alliage étain-bismuth 10% wt et compte tenu des différents résultats obtenus, il est possible de calculer certains nombres adimensionnels (pour une vitesse de refroidissement de deux degrés par minute).

Si l'on se réfère aux considérations et aux définitions discutées et présentées dans les parties B et C de cet exposé, il est possible de définir un nombre de flottaison dont la valeur est :

$$N = \frac{\beta_C \Delta C}{\beta_T \Delta T} = \left( \frac{\beta_c}{m \beta_T} \right)_{\text{Zone pâteuse}} = 19,5 \text{ au regard des grandeurs données en Annexe 1.} \quad (\text{E.26})$$

De cette valeur, nous obtenons une densité caractéristique, en considérant un  $\Delta T$  de 12 °C :

$$\frac{\Delta \rho}{\rho_0} = \beta_T \Delta T \left( 1 + \frac{\beta_C \Delta C}{\beta_T \Delta T} \right) = \beta_T \Delta T (1 + N) = 0,023 \quad (\text{E.27})$$

Cette valeur nous permet de déterminer les nombres de Rayleigh et le nombre de Grashof.

Nombre de Prandtl $Pr$	0,008
Nombre de Lewis $Le$	17660
Nombre de Schmidt $Sc$	136
Nombre de Rayleigh thermique $Ra_T$	$3,6.10^6$
Nombre de Rayleigh solutal $Ra_S$	$6,4.10^{10}$
Nombre de Grashof solutal $Gr_S$	$4,7.10^8$

La distance de référence correspond à la longueur du lingot, c'est à dire cinq centimètres (système entièrement pâteux).

### E.4.3 : Simulations bidimensionnelles de l'expérience.

#### E.4.3.a : Deux degrés par minute de refroidissement.

Désignation :	Benchmark 2D 40x40 2°.
Maillage :	40 x 40.
Pas de temps :	0,03 seconde.
Schéma temporel :	1 <sup>er</sup> ordre.
Correction de pression	PRESTO.
Couplage Pression-Vitesse :	SIMPLE C.
Schémas spatiaux :	2 <sup>ème</sup> ordre décentré amont.
Durée de simulation :	30 minutes.
Perméabilité :	Isotrope continue.
Conditions particulières :	T initiale de 250 °C..

Cette simulation a été réalisée avec un maillage 40 x 40. Elle correspond à un refroidissement de deux degrés par minute. La température est initialement uniforme à 250 °C. La concentration est initialement fixée à 10 % moyennant une légère perturbation. Les vitesses initiales sont nulles. Les résultats présentés correspondent à 1350 et 1650 secondes de simulation.

L'espacement interdendritique primaire considéré est de 300  $\mu\text{m}$  dans l'ensemble des calculs qui ont été menés dans cette partie. L'essentiel des propriétés physiques, ainsi que le diagramme de phases du mélange étain-bismuth, est disponible en annexe A. La boucle de convection qui se met en place avant le début de la solidification conduit à une carte de température stratifiée. La vitesse maximale (1,38  $\text{cm.s}^{-1}$ ) de cette boucle nous donne un nombre de Reynolds de l'ordre de 2500.

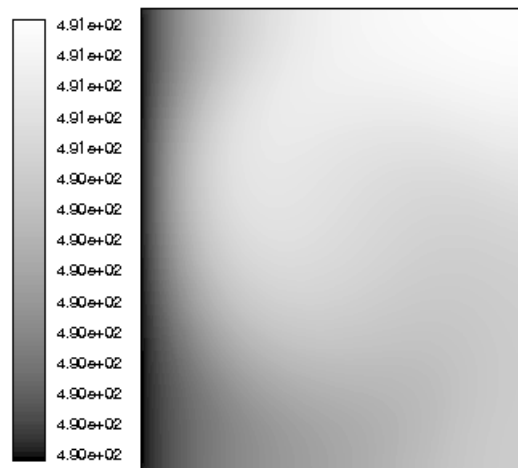


Figure E-42 : Champ de température lors du lingot entièrement liquide.

Vitesse de refroidissement de deux degrés par minute. Temps de simulation de 400 s.

$$[T_{\min} = 490 \text{ K } (217 \text{ °C}) ; T_{\max} = 490,7 \text{ K } (217,7 \text{ °C})]$$

Au fur et à mesure que la solidification avance, les isothermes deviennent des droites verticales dans la zone pâteuse.

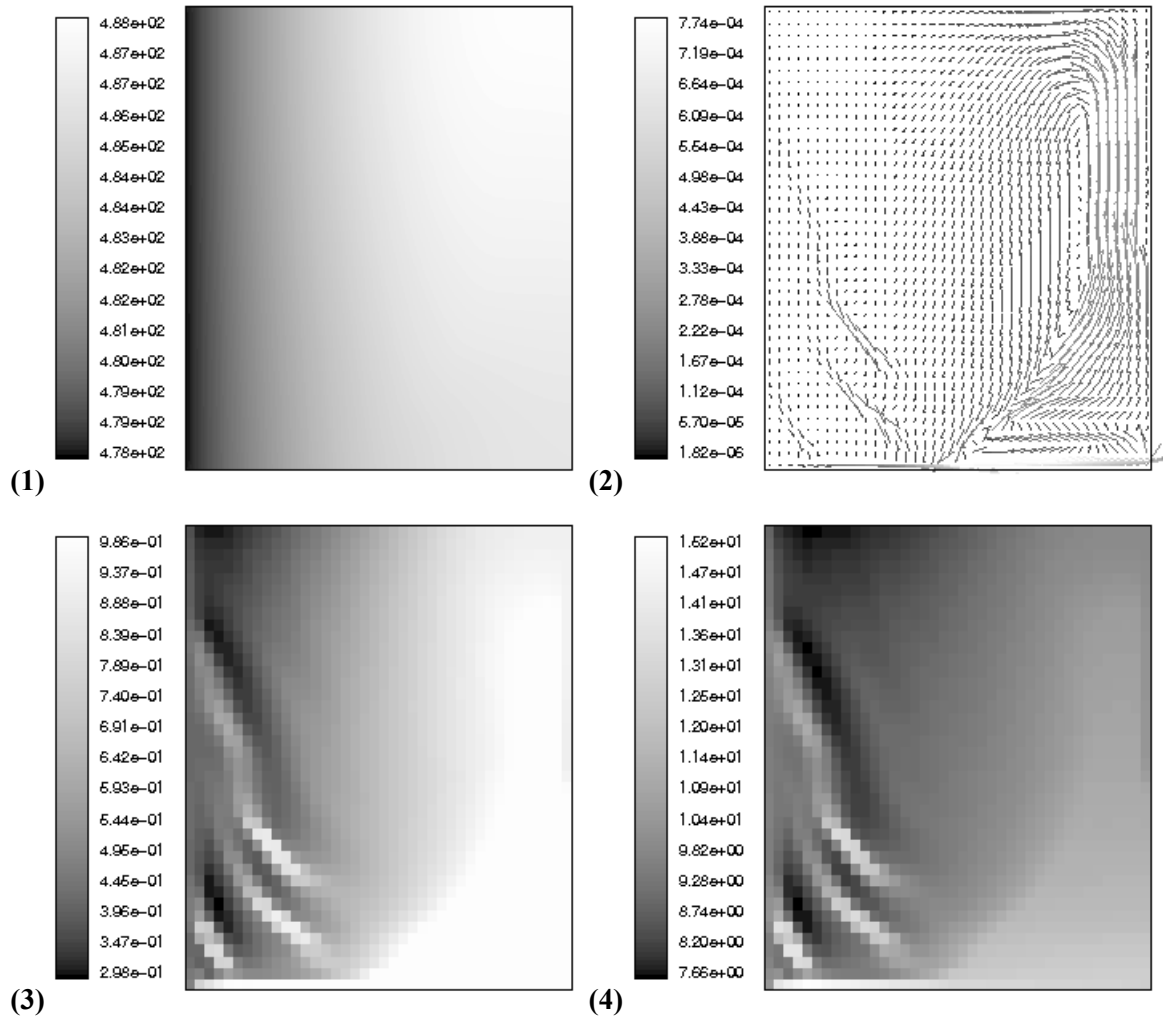


Figure E-43 : Résultats numériques à  $t = 1350$  s de simulation.

Vitesse de refroidissement de deux degrés par minute.

(1) Carte de température [ $T_{min} = 478,24$  K ( $205,24$  °C) ;  $T_{max} = 488,16$  K ( $215,15$  °C)] ;

(2) Champ de vitesse [ $V_{max} = 790$   $\mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ ] ;

(3) Carte de fraction liquide [ $f_{l\ min} = 0,298$  ;  $f_{l\ max} = 1$ ] ;

(4) Carte de concentration moyenne [ $C_{m\ min} = 7,66$  % ;  $C_{m\ max} = 15,36$  %].

Les isothermes en zone pâteuse sont quasiment des droites verticales. En zone liquide, elles sont déformées par les boucles de convection thermosolutale. On peut visualiser, dans la figure E-43-(2), l'écoulement à travers les canaux jusqu'au liseré ségrégué dans la partie inférieure du lingot. La zone liquide est l'objet d'une intense activité convective. La partie la plus avancée de la zone pâteuse est traversée par l'écoulement qui draine le soluté vers la partie inférieure du lingot.



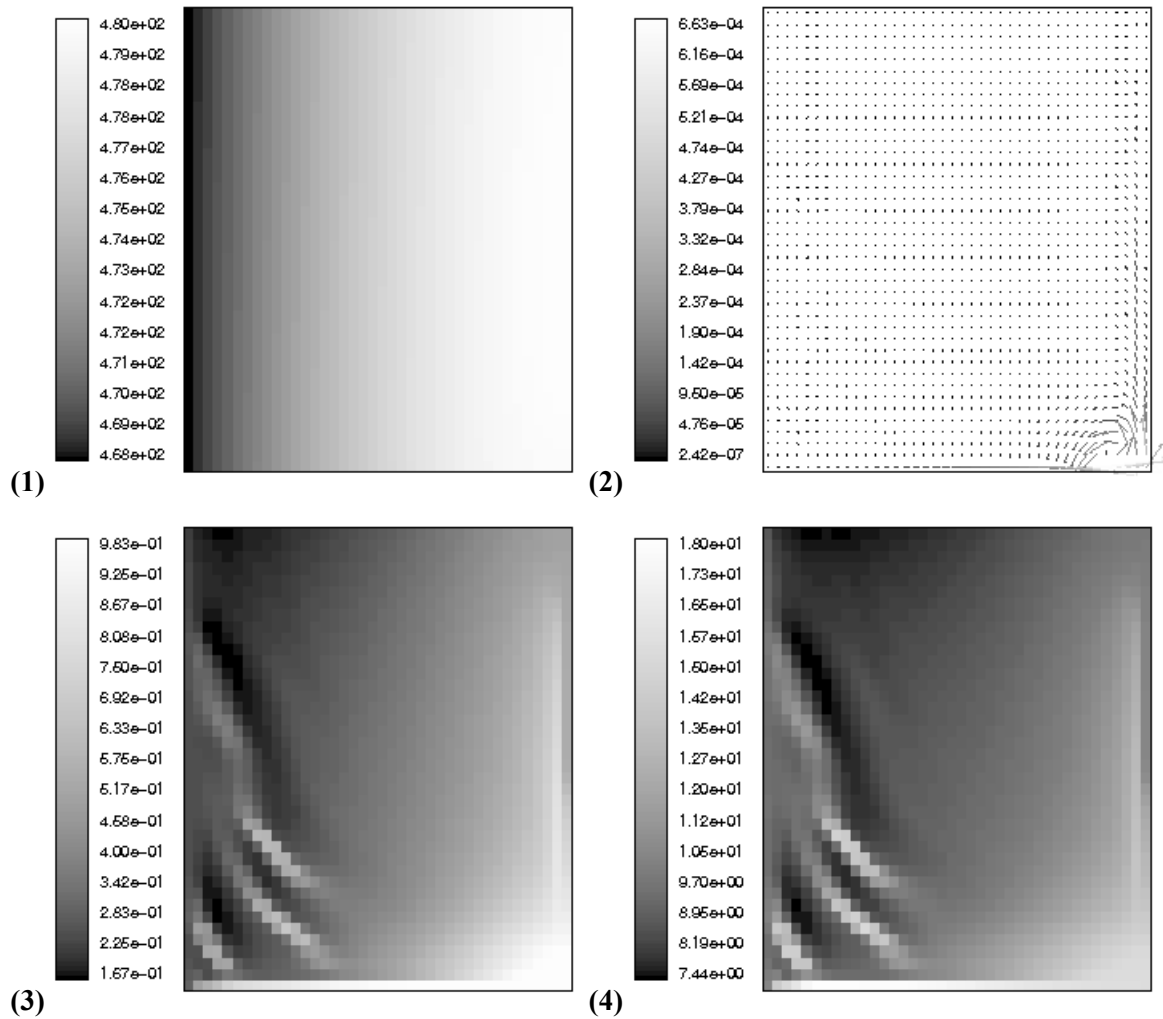


Figure E-44 : Résultats numériques à  $t = 1650$  s de simulation.

Vitesse de refroidissement de deux degrés par minute.

- (1) Carte de température [ $T_{min} = 468,24$  K ( $195,24$  °C) ;  $T_{max} = 480,39$  K ( $207,39$  °C)] ;
- (2) Champ de vitesse [ $V_{max} = 679$   $\mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ ] ;
- (3) Carte de fraction liquide [ $f_{l\ min} = 0,166$  ;  $f_{l\ max} = 1$ ] ;
- (4) Carte de concentration moyenne [ $C_{m\ min} = 7,44$  % ;  $C_{m\ max} = 18,23$  %].

Les cartes de grandeurs physiques descriptives du benchmark numérique ayant été exposées, il est intéressant de comparer les évolutions de températures au cours du temps. A cette fin, le relevé des températures durant le calcul a été effectué aux mêmes positions que les thermocouples de mesure du benchmark expérimental. Ces relevés sont présentés figure E-46. On peut d'ores et déjà remarquer, au niveau des thermocouples de la première colonne, que le régime de température est plus diffusif numériquement qu'expérimentalement. Cela est, entre autres, une conséquence de l'hypothèse faite selon laquelle les propriétés (dont la conductivité thermique) sont les mêmes en phase liquide et en phase solide. En pratique, l'alliage présente une conductivité de  $30$   $\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$  dans une phase et de

$60 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$  dans l'autre phase (soit tout de même un facteur deux). Dans les calculs, la conductivité utilisée est celle du solide, i.e.  $60 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ . Il est donc des ruptures de pentes expérimentales qui ne sont pas visibles numériquement.

L'isotherme correspondant à la température de liquidus de l'alliage est atteinte approximativement aux mêmes temps dans les résultats expérimentaux et les résultats numériques (compte tenu d'un choc thermique initial légèrement plus important dans le dispositif expérimental qu'en simulation et du retard de solidification expérimental qui corrigé devrait amener à avoir une condition initiale en température de  $252 \text{ }^\circ\text{C}$  au lieu de  $250 \text{ }^\circ\text{C}$ ). A cela rajoutons l'apparition d'une résistance thermique, apparemment fort importante, qui ralentit la solidification au niveau de l'expérience. Si les évolutions de température sont similaires, quatre différences notables sont visibles :

- La solidification (expérimentale) débute plus tardivement en température : deux degrés de moins que la température de liquidus alors que numériquement, la solidification commence quasiment à la température de liquidus à la concentration considérée. Les corrections à effectuer corrigeront ce point.
- Les données expérimentales des thermocouples de la colonne la plus proche de la paroi de refroidissement présentent un rebond plus ou moins prononcé suivant leur position sur la verticale. Ce rebond est pleinement imputable à l'apparition d'une résistance thermique entre le lingot en cours de solidification et la paroi d'échange thermique. Cette résistance modifie et perturbe considérablement le flux extrait.
- Lors de la progression de la zone pâteuse (période où les mesures sont le plus étalées en température), la simulation numérique montre un refroidissement plus rapide (invariablement deux degrés par minutes pour les températures les moins élevées et donc les plus proches de la paroi de l'échangeur thermique). Cela confirme grandement l'aspect bien trop diffusif du régime thermique simulé et l'importance de la résistance thermique sur la vitesse de solidification expérimentale. Les décalages semblent assez conséquents.
- A des temps d'acquisition où l'on peut considérer le lingot comme entièrement pâteux (hormis le liquide interdendritique), les températures mesurées expérimentalement font apparaître un gradient de température plus important à un instant donné  $t$  que les mesures numériques qui ne s'étalent que sur une faible gamme de température. Un décalage se crée entre les mesures expérimentales et les mesures numériques, toujours imputable à cette résistance thermique sous-évaluée lors de la conception des expérimentations.

La confrontation des résultats numériques et expérimentaux montre bien l'influence (bien trop grande et perturbatrice) du contact entre la paroi de refroidissement et le lingot. Une comparaison des

flux extraits expérimentaux et numériques, figure E-45, met en évidence cette problématique quant au refroidissement.

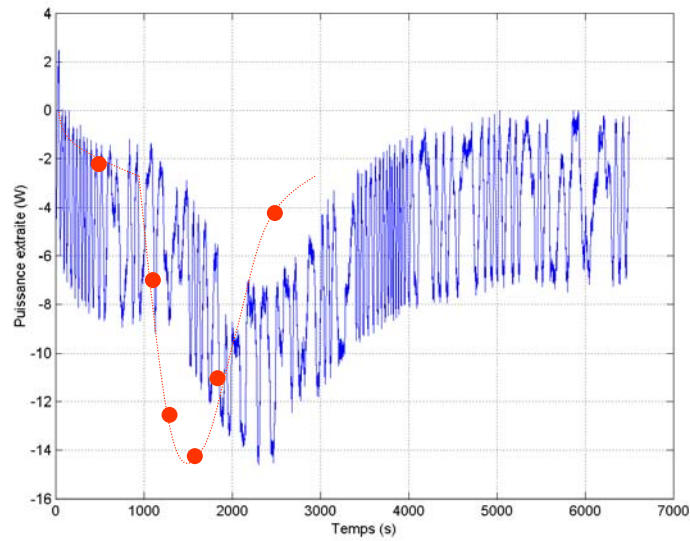


Figure E-45 : Flux extrait. Numérique (rouge) ; expérimental (bleu). Refroidissement de  $2\text{ }^{\circ}\text{.mn}^{-1}$ .

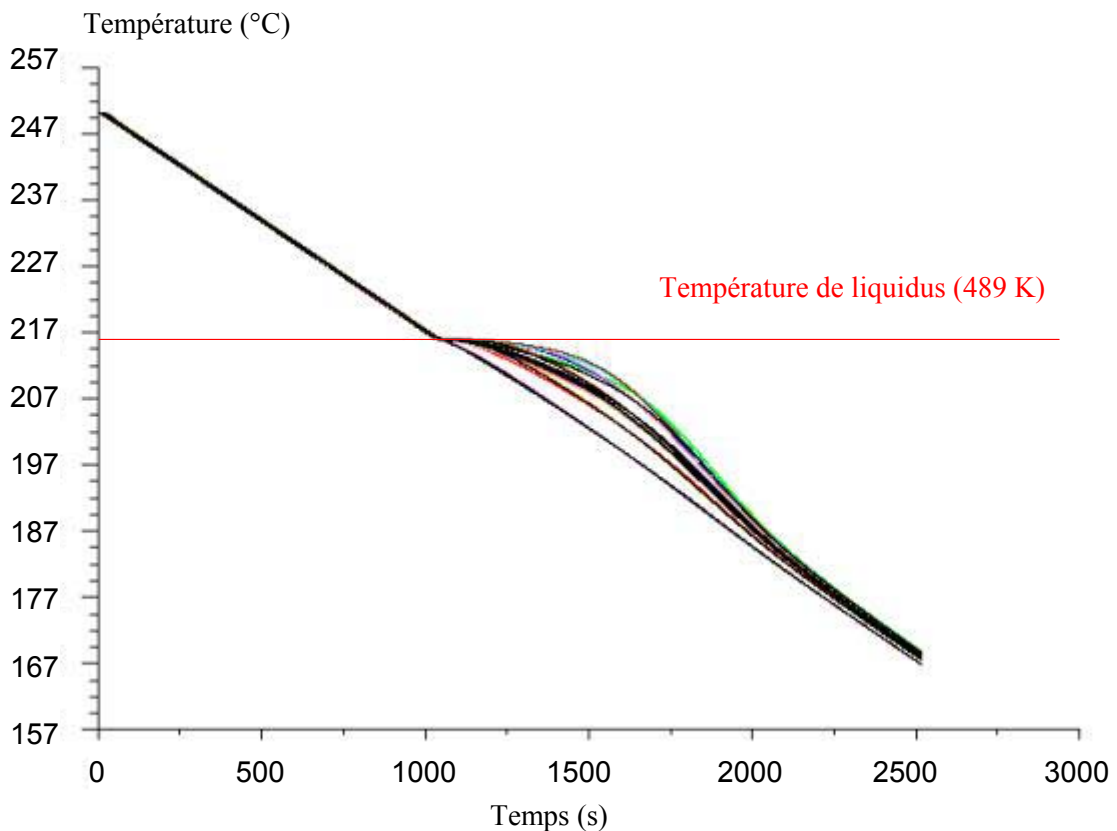


Figure E-46 : Evolution temporelle des températures, résultats numériques.

Vitesse de refroidissement de deux degrés par minute.

On peut également remarquer que les plateaux de solidification sont bien plus courts numériquement qu'expérimentalement. Si les conditions de refroidissement, différentes entre l'expérimental et le numérique, l'expliquent en grande partie, on peut se demander si la chaleur latente prise en compte expérimentalement est supérieure à celle prise en compte numériquement. Cette donnée pourrait apporter une explication complémentaire. Les gradients dans le bain entièrement liquide sont également plus importants expérimentalement que numériquement. Ces écarts sont à relativiser de part les corrections à apporter mais aussi par l'utilisation, dans la simulation, des mêmes propriétés thermiques uniques (en l'occurrence celles du solide, plus importantes, ce qui est maladroit nous le concédons). Ceci est en grande partie responsable de l'aspect trop diffusif (du point de vue thermique) des résultats.

On peut aisément et légitimement supposer que ces remarques (et les explications afférentes) seront les mêmes lors de l'étude des simulations numériques effectuées avec une condition théorique de refroidissement de cinq degrés par minute.

Les profils de concentration en bismuth obtenus grâce aux simulations numériques sont présentés figure E-47. Ils peuvent être comparés aux profils expérimentaux correspondants présentés au cours du paragraphe E.2.3.b. Les profils numériques, quant à eux, correspondent à la moyenne en concentration en bismuth des lignes (ou colonnes) passant par le centre des échantillons dosés (en volume). Le procédé de prise de moyenne n'est donc pas le même (moyenne sur une ligne d'une part, moyenne sur une « bande volumique » d'autre part). Les conditions théoriques de refroidissement sont en revanche les mêmes (deux degrés par minute). Les données numériques correspondent à une durée de simulation de vingt-deux minutes. Le code numérique ne modélisant pas des solidifications complètes (problème de l'eutectique), on peut constater un très bon accord entre les mesures expérimentales et les résultats numériques pour les profils verticaux de concentration, une partie de l'écart pouvant être expliquée par la différence de méthode de mesure. Les profils sont légèrement plus dissemblables en ce qui concerne les profils horizontaux, notamment dans la zone à forte ségrégation. Le décalage au niveau des premières valeurs s'explique aisément par la méthode de moyennage. Les cartes de concentration préalablement présentées montrent une ségrégation majeure sur la partie basse du lingot (concentration moyenne de 15 % wt). Etablir une mesure sur une ligne et non pas sur une surface entraîne la non-prise en compte totale de cette ségrégation. Cette remarque étant faite, les profils de concentration sont, en l'état actuel du code de simulation, très satisfaisants.

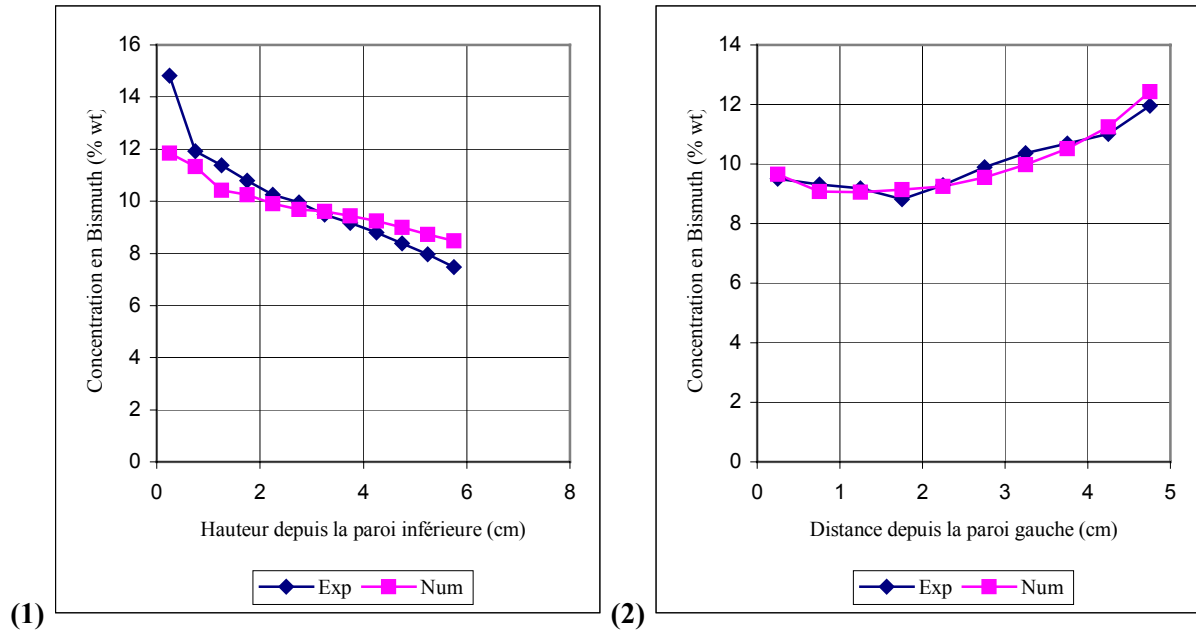


Figure E-47 : Profils de concentrations en valeurs moyennes (% wt).

(1) Profil vertical ; (2) Profil horizontal.

## E.4.3.b : Cinq degrés par minute de refroidissement.

Désignation :	Benchmark 2D 40x40 5K.
Maillage :	40 x 40.
Pas de temps :	0,05 seconde.
Schéma temporel :	1 <sup>er</sup> ordre.
Correction de pression	PRESTO.
Couplage Pression-Vitesse :	SIMPLE C.
Schémas spatiaux :	2 <sup>ème</sup> ordre décentré amont.
Durée de simulation :	20 minutes.
Perméabilité :	Isotrope continue.
Conditions particulières :	T initiale de 250 °C..

Cette simulation a été réalisée avec un maillage  $40 \times 40$ . Elle correspond à un refroidissement de  $5 \text{ } ^\circ\text{.mn}^{-1}$ . La température est initialement uniforme à  $250 \text{ } ^\circ\text{C}$ , la concentration est initialement fixée à  $10 \text{ } \%$  moyennant une légère perturbation inhomogène. Les vitesses initiales sont nulles.

A  $t = 0$ , le refroidissement commence, créant un gradient horizontal de température. Ce gradient crée une boucle de convection naturelle. La boucle de convection qui se met en place avant le début de la solidification conduit à une carte de température stratifiée. La vitesse maximale ( $1,8 \text{ cm.s}^{-1}$ ) de cette boucle nous donne un nombre de Reynolds de 3290. Le gradient de température étant légèrement plus élevé, la vitesse maximale de la boucle de convection en est consécutivement un peu plus grande. Les résultats de la simulation sont présentés à des temps de  $600 \text{ s}$  et  $1200 \text{ s}$  (cf. figure E-48 et figure E-49). Au fur et à mesure que la solidification avance, les isothermes deviennent des droites verticales dans la zone pâteuse.

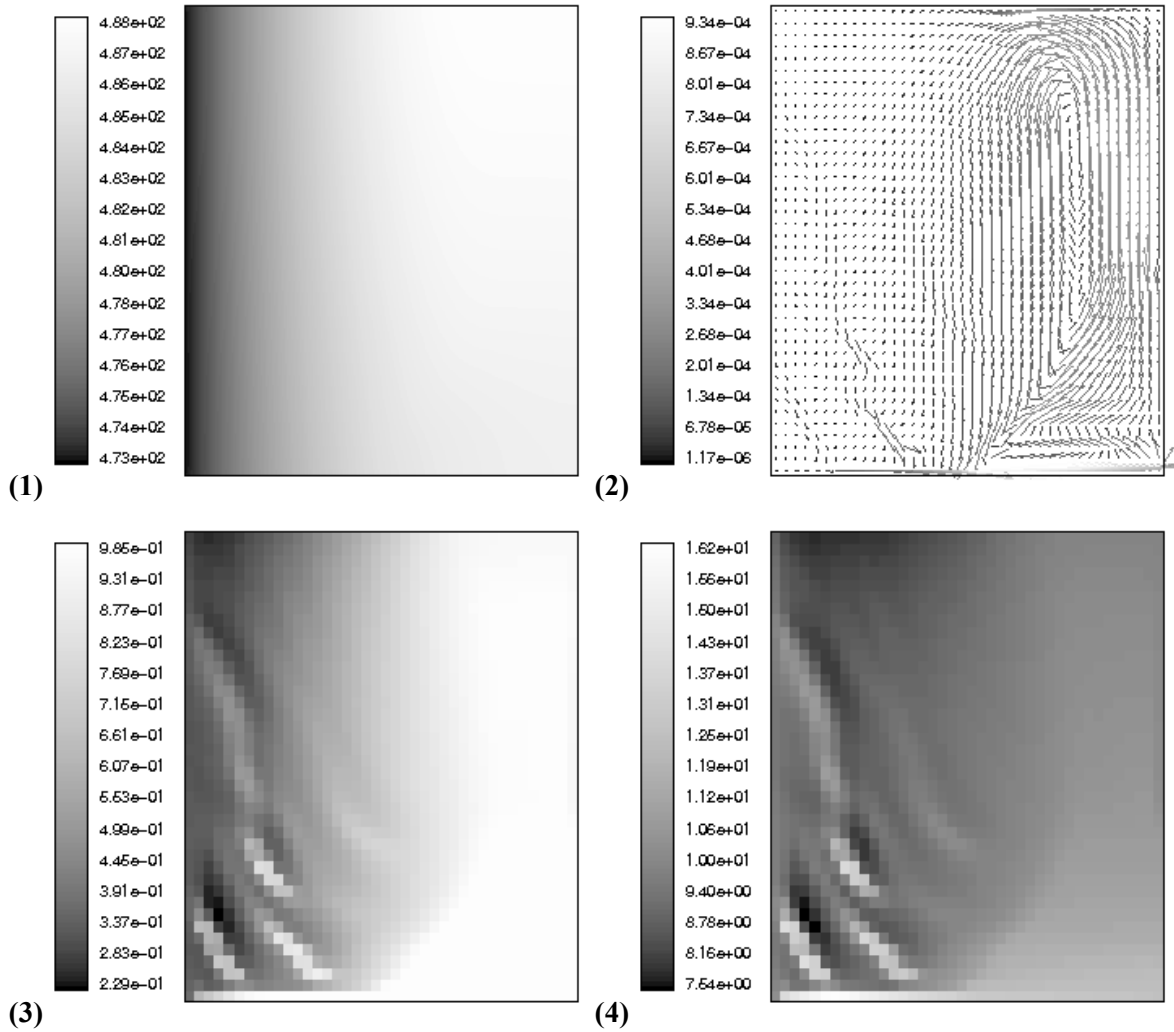


Figure E-48 : Résultats numériques à  $t = 600$  s de simulation. Vitesse de refroidissement :  $5 \text{ } ^\circ\text{mn}^{-1}$ .

(1) Carte de température [T<sub>min</sub> = 473,4 K (200,4 °C) ; T<sub>max</sub> = 488,64 K (215,64)] ;

(2) Champ de vitesse [V<sub>max</sub> = 0,953 mm.s<sup>-1</sup>] ;

(3) Carte de fraction liquide [f<sub>l min</sub> = 0,23 ; f<sub>l max</sub> = 1] ;

(4) Carte de concentration moyenne [C<sub>m min</sub> = 7,54 % ; C<sub>m max</sub> = 16,36 %].

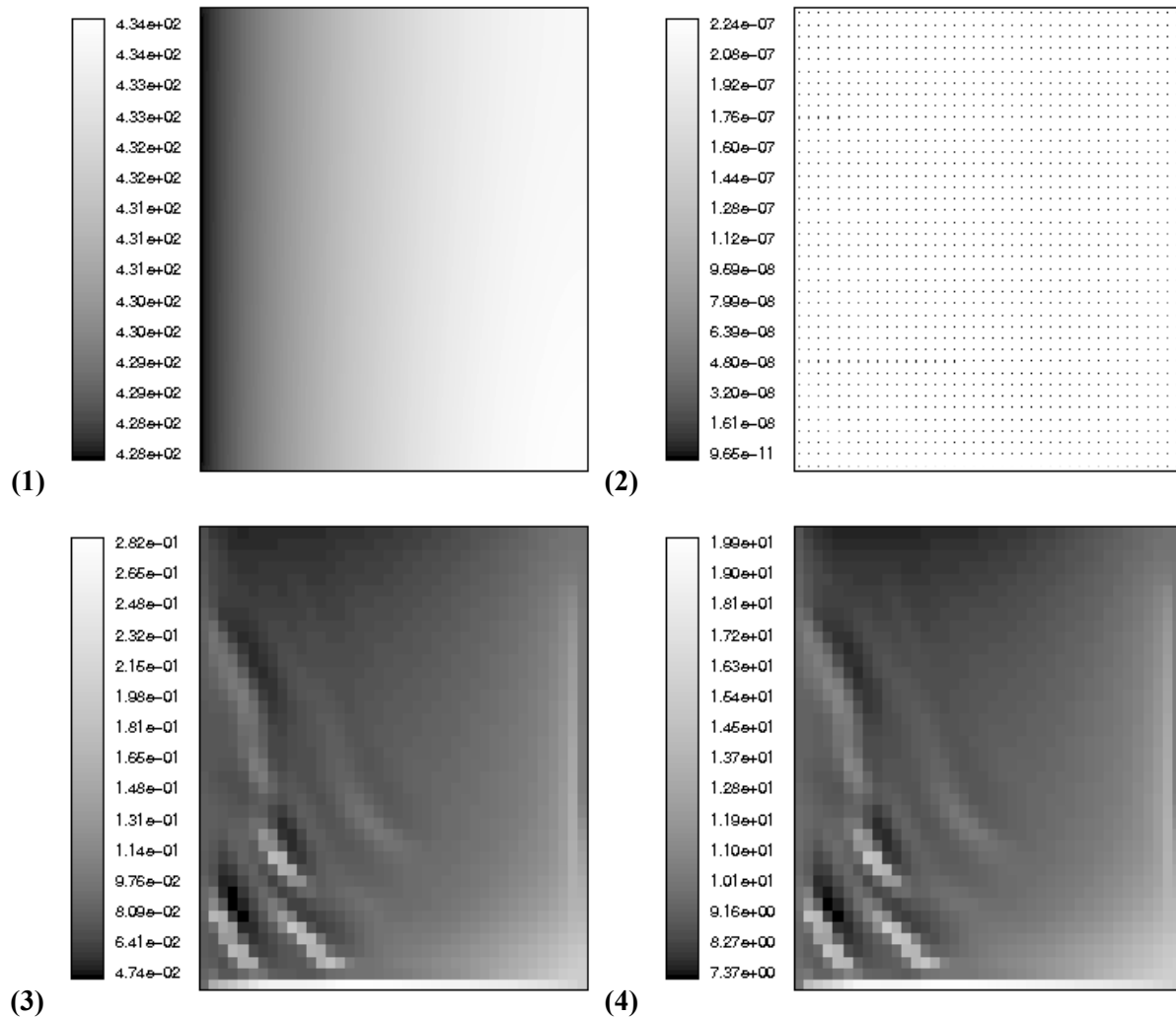


Figure E-49 : Résultats numériques à  $t = 1200$  s de simulation. Vitesse de refroidissement :  $5 \text{ }^\circ\text{C}\cdot\text{mn}^{-1}$ .

(1) Carte de température [ $T_{\min} = 423 \text{ K (150 }^\circ\text{C)}$  ;  $T_{\max} = 428,3 \text{ K (155,3 }^\circ\text{C)}$ ];

(2) Champ de vitesse [ $V_{\max} = 0,14 \text{ } \mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ ];

(3) Carte de fraction liquide [ $f_{l \min} = 0,043$  ;  $f_{l \max} = 0,26$ ];

(4) Carte de concentration moyenne [ $C_{m \min} = 7,37 \%$  ;  $C_{m \max} = 20,19 \%$ ].

Si l'on compare les mesures de température expérimentales et numériques, on peut constater que l'accord est meilleur avec un refroidissement de cinq degrés par minute qu'avec un refroidissement de deux degrés par minute même si le décalage reste tout de même important (un peu plus de dix degrés à  $1000$  secondes). La problématique du léger rebond au début de la solidification reste la même. Les conclusions quant à l'étalement des mesures restent également les mêmes. Le plateau de solidification est ici aussi bien plus court numériquement qu'expérimentalement. Les résultats avec cette vitesse de refroidissement confirment les remarques préalablement établies essentiellement en ce qui concerne la résistance thermique entre l'échantillon et la paroi de solidification.

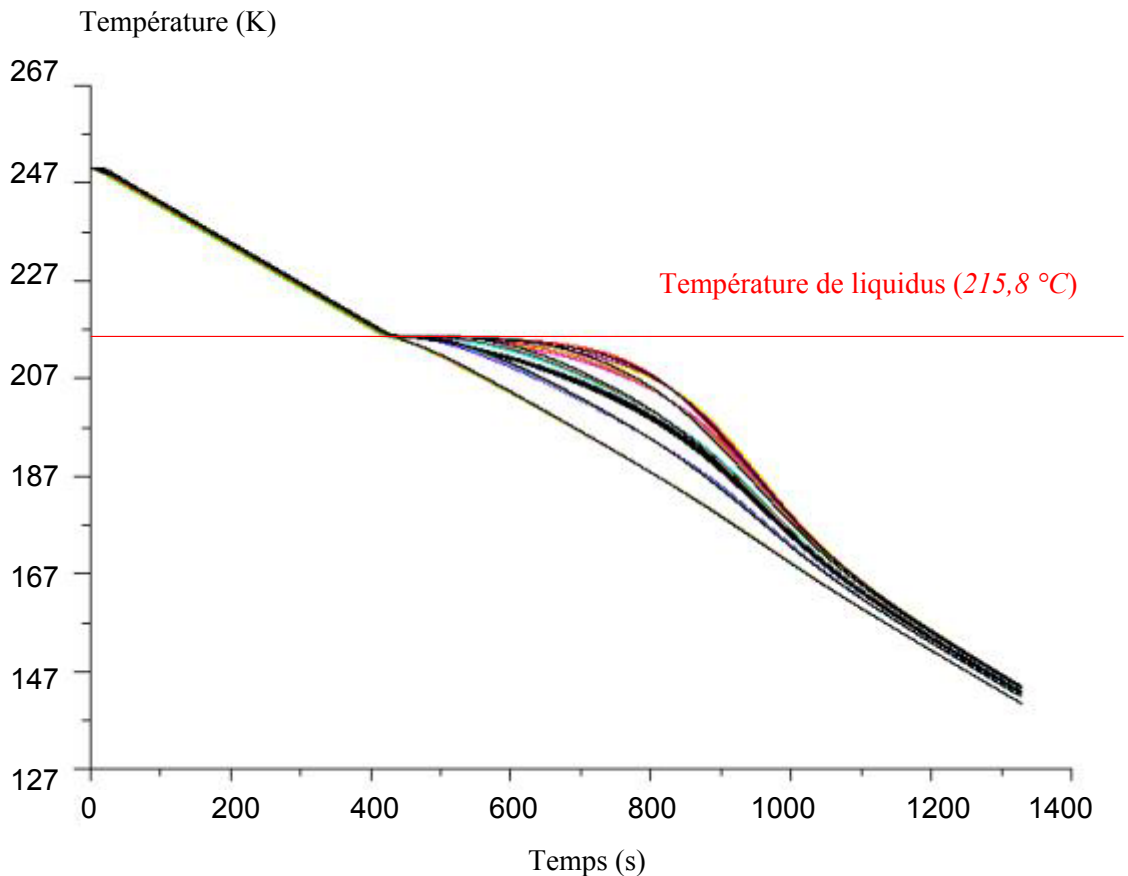


Figure E-50 : Evolution temporelle des températures calculées. Vitesse de refroidissement :  $5 \text{ } ^\circ\text{mn}^{-1}$ .

Les comparaisons de concentration qui suivent sont faites à **titre indicatif** car elles ne correspondent pas aux mêmes conditions de refroidissement. Toutefois on peut remarquer que les différences ne sont guère plus importantes que lors des comparaisons précédentes (vitesse de refroidissement de deux degrés par minute). Si l'on se réfère aux cartes de concentration préalablement présentées, on peut remarquer qu'elles sont qualitativement similaires quelle que soit la vitesse de solidification envisagée. On peut considérer que des vitesses de refroidissement de deux degrés ou de cinq degrés par minute, même si elles présentent une différence d'un facteur deux et demi, correspondent à la même catégorie de solidification (solidifications lentes par opposition à des solidifications rapides). Le procédé de prise de moyenne n'y est peut être pas pour rien. Ceci montre, malheureusement, que des comparaisons entre mesures expérimentales et données de simulations numériques pour des conditions différentes peuvent tout de même coïncider si l'on considère des grandeurs moyennées qui atténuent les éventuelles différences. On peut se poser des questions sur certaines comparaisons faites avec l'expérience d'Hebditch et Hunt, par exemple.

**Attention, figure suivante, les courbes expérimentales correspondent à une vitesse de refroidissement de deux degrés par minute et les courbes numériques à cinq degrés par minute.**



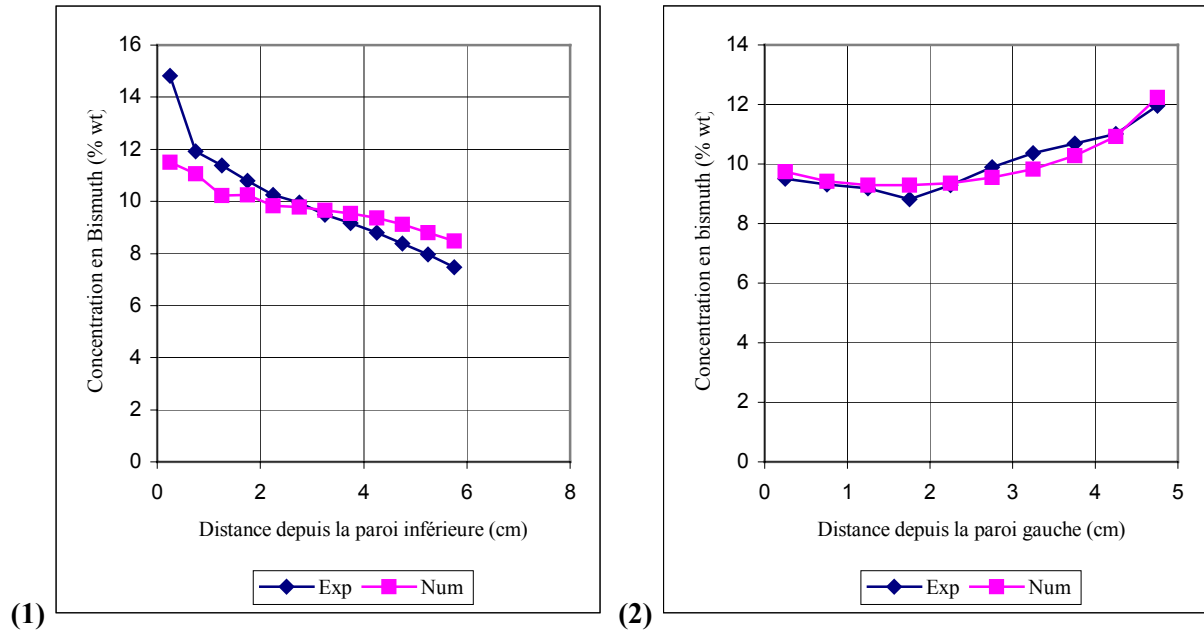


Figure E-51 : Profils de concentration moyenne (% wt).

(1) Profil vertical (moyennes le long de lignes) ; (2) Profil horizontal (moyennes le long de colonnes).

#### E.4.4 : Simulation tridimensionnelle de l'expérience.

A cette fin, nous avons effectué des simulations de l'expérience dans une configuration tridimensionnelle, ceci afin d'évaluer les différences entre une modélisation bidimensionnelle et une modélisation 3D. Le très long temps de calcul de ces cas tridimensionnels n'a pas permis d'aller plus avant dans la comparaison 2D/3D. Quelques résultats sont présentés dans les paragraphes suivants.

Désignation :	Benchmark 3D 2K.
Maillage :	40 x 40 x 10.
Pas de temps :	0,03 seconde.
Schéma temporel :	1 <sup>er</sup> ordre.
Correction de pression	PRESTO.
Couplage Pression-Vitesse :	SIMPLE C.
Schémas spatiaux :	2 <sup>ème</sup> ordre décentré amont.
Durée de simulation :	~ 31 minutes.
Perméabilité :	Isotrope continue.
Conditions particulières :	T initiale de 250 K.

Des simulations avec des vitesses de refroidissement de deux et cinq degrés par minute ont été réalisées. Les résultats étant qualitativement similaires, seuls les résultats pour un refroidissement de deux degrés par minute seront présentés. Bien entendu, dans l'autre cas, les gradients de température sont plus élevés et la solidification est plus rapide.

Il est à noter que le temps de calcul pour ces cas, malgré un nombre de maille assez moyen (16.000) s'établit tout de même à une douzaine de jours, temps CPU !

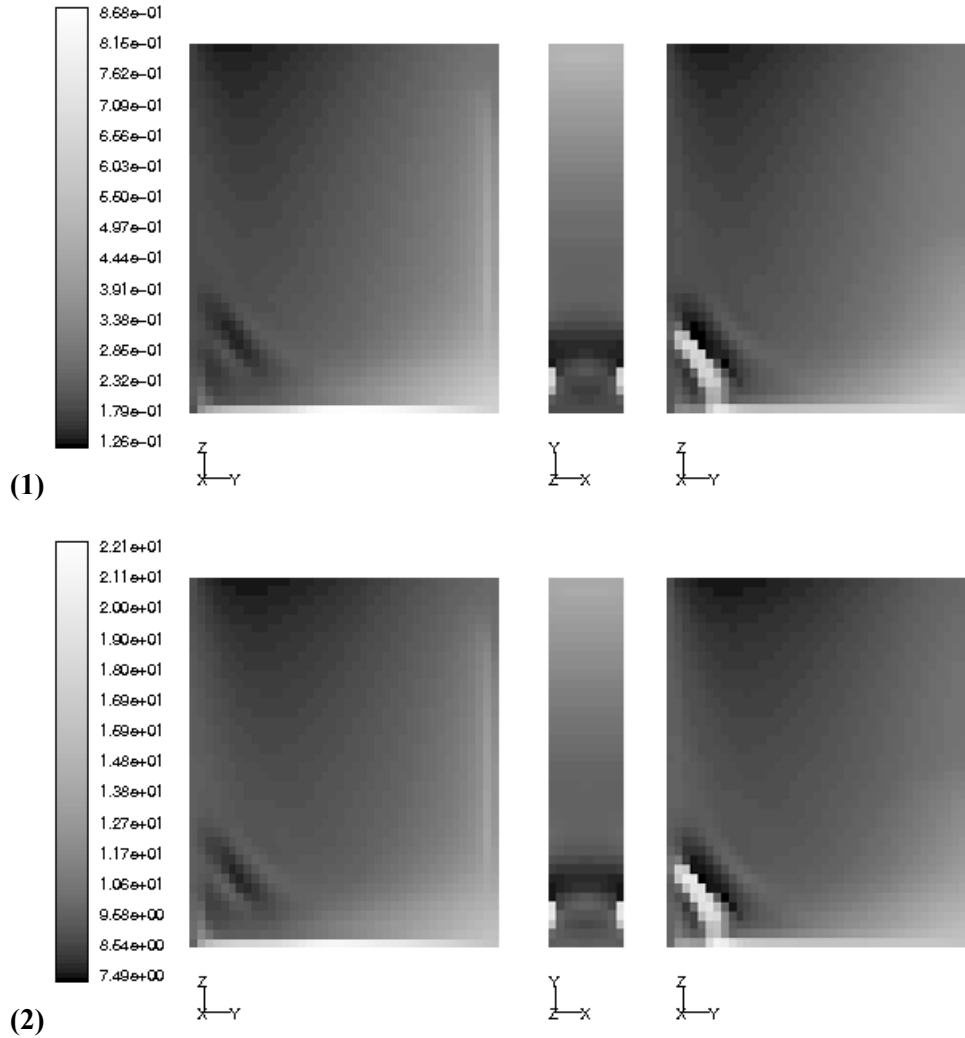


Figure E-52 : Résultats numériques à  $t = 1850$  s de simulation.

Vitesse de refroidissement de deux degrés par minute.

(1) Cartes de fraction liquide ; (2) Cartes de concentration moyenne.

La figure E-52 présente respectivement des cartes de grandeurs physiques dans le plan médian, une coupe horizontale à un centimètre de la face inférieure et au niveau de la face extérieure. L'ensemble des résultats est parfaitement symétrique de part et d'autre du plan médian vertical. Le nombre de canaux est nettement inférieur au nombre de canaux dans les cas bidimensionnels. Dans les cas tridimensionnels, les canaux ne sont plus qu'au nombre de deux. Qui plus est, ceux-ci sont localisés contre les parois et forment un angle de  $45^\circ$  avec la verticale. En revanche, on peut remarquer, comme dans les cas 2D que les canaux sont entourés de zones appauvries en soluté, ce qui confirme les affirmations précédentes qui font état d'une zone de drainage autour des canaux ségrévés. Ces zones appauvries sont présentes dans l'épaisseur tout entière. Cela laisse supposer que le soluté est drainé de l'intérieur du lingot vers les faces extérieures. L'absence de canaux au cœur de l'échantillon est contraire aux résultats présentés lors du paragraphe E.3.3. Les écarts de concentration sont du même ordre de grandeur que ceux obtenus au paragraphe E.2.3 (sachant qu'ils sont moyennés

sur des volumes différents). Un liseré ségrégé est visible sur la partie basse du lingot. Ce liseré est enrichi en soluté par les deux canaux qui l'alimentent (cf. figure E-52). Un triangle enrichi en soluté est également visible dans le quart inférieur droit. On peut remarquer que les concentrations moyennes vont de 7,4 % à 22,1 %. Si la valeur minimale est similaire à celle du cas 2D, la valeur maximale est tout de même plus grande d'une valeur de 2 % par rapport aux calculs bidimensionnels. L'utilisation d'une perméabilité isotrope dans les trois directions doit être la principale explication car elle accentue le drainage.

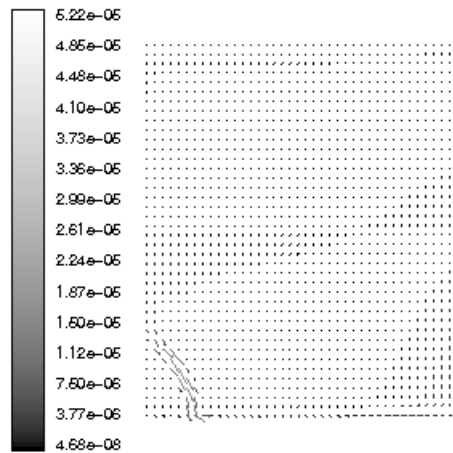


Figure E-53 : Résultats numériques à  $t = 1850$  s de simulation.

Vitesse de refroidissement de deux degrés par minute.  $V_{max} = 0,522 \text{ mm.s}^{-1}$ .

L'ordre de grandeur des vitesses maximales est strictement identique à celui des cas bidimensionnels. Les courbes de température sont, quant à elles, identiques en trois comme en deux dimensions. La seule différence notable est la différence d'aspect qualitatif des cartes de concentration et de fraction liquide.

Remarque sur le nombre de canaux : Une précision est à apporter quant au nombre de canaux et leur positionnement si l'on établit un parallèle entre les simulations tridimensionnelles ici présentées et celles concernant un barreau cylindrique dans la partie C de cet exposé. Dans le cas des barreaux cylindriques modélisés, la densité de maille était de  $6400 \text{ mailles.cm}^{-3}$ . La densité n'est ici que de  $533 \text{ mailles.cm}^{-3}$ . Ce qui représente tout de même 12 fois moins. On pourrait légitimement se demander si un maillage plus fin n'entraînerait pas la présence de plus de canaux ségrégés par la réduction de l'effet de filtrage numérique. Le temps de calcul (déjà fort long) s'en trouverait très allongé.

En l'état actuel, les simulations tridimensionnelles n'apportent pas d'informations supplémentaires par rapport à celles effectuées en 2D. Il serait intéressant d'en effectuer de nouvelles avec un maillage bien plus fin, surtout afin de préciser le positionnement des canaux ségrégés.

## E.5 : Conclusion partielle.

Cette conclusion est nécessairement limitée car des corrections sur les mesures thermiques restent à apporter. Les autres résultats permettent tout de même de dresser d'importantes conclusions. La validité du système expérimental et sa conformité au cahier des charges ont été confortées. L'ensemble des éléments nécessaires au dépouillement, à la correction et à la compréhension des résultats a été posé et présenté. Si les analyses de concentration et les radiographies présentées ne posent guère de problème, il reste une campagne de corrections à mener sur l'ensemble des mesures thermiques. Les résultats bruts seulement (non corrigés) ont été présentés afin de dégager des tendances préliminaires. Les quelques mesures de fusion ont montré l'existence d'une légère rétractation à l'état solide qui entraîne la présence d'une légère résistance thermique entre la paroi de fusion et le lingot à l'état solide. Cette dernière empêche d'effectuer des mesures propres de fusion. Le dispositif n'a pas été conçu à cette fin. Les solidifications d'étain ont montré l'influence des grandeurs physiques à utiliser (dépendance en température de la capacité calorifique par exemple). Pour les solidifications d'alliage, trois points importants sont déjà à souligner. Le premier concerne un léger rebond de température au début de la solidification qui est visible pour les thermocouples les plus proches de la paroi d'extraction. Sa présence est directement imputable à l'apparition d'une résistance thermique conséquente entre la paroi de refroidissement et le lingot en cours de solidification. L'existence de cette résistance modifie considérablement les conditions de refroidissement et perturbe mesures de flux et de température. Les plateaux de solidification sont bien visibles et permettront le calage des courbes de température. Le troisième point concerne le « rebond eutectique ». Celui-ci, compte tenu des corrections de température à apporter et de la barrière de germination à franchir pour solidifier la seconde phase solide, correspond à la solidification du liquide interdendritique. Les radiographies effectuées montrent une zone de forte densité en canaux ségrévés. Les analyses quantitatives faites montrent également une ségrégation majeure sur la partie basse du lingot et dans la partie terminale (macro-ségrégation normale). Les cartes de macrostructure et de fraction eutectique réalisées vont dans le même sens tout en contredisant l'hypothèse de bidimensionnalité préalablement posée. Les simulations numériques effectuées donnent en deux dimensions des cartes de concentration qualitatives similaires. Elles le sont également si l'on compare les grandeurs moyennes (attention, comparaison à faire avec prudence). La comparaison qualitative n'est pas satisfaisante en 3D. Reste à savoir si cela est dû à un effet de maillage ou non. L'étude des mesures thermiques corrigées devrait permettre de dégager des conclusions définitives.



# Conclusion et perspectives

Ce travail fait suite à celui mené par Médina [61] au sein du laboratoire EPM. Si le point de départ est en partie similaire, les développements faits ne le sont pas. Les équations du modèle Felicelli-Heinrich-Poirier correspondent à celles choisies pour développer le code numérique ici présenté. Ces dernières ont été réécrites afin de les adapter à un logiciel commercial, i.e. FLUENT v6.0, de modélisation de mécanique des fluides et transferts thermiques. Les équations déjà prises en charge par le logiciel ont été adaptées et réécrites afin de répondre à nos demandes. Les équations absentes telles que l'équation de transport de soluté ont été créées ex nihilo dans le logiciel et implantées. Cette dernière équation présente l'originalité, par rapport au modèle initial, d'être écrite uniquement en fonction de la concentration liquide. La concentration moyenne est extrapolée depuis les grandeurs calculées. Cette écriture est celle qui présente, dans les calculs effectués, la plus grande stabilité, la meilleure convergence et des résultats physiques cohérents. En conséquence, un module fonctionnel de solidification des alliages métalliques binaires est désormais utilisable dans le logiciel FLUENT. Ce module présente deux limites essentielles : premièrement, le modèle est entièrement colonnaire et ne prend compte à aucun moment de la solidification équiaxe ; Deuxièmement, la solidification eutectique et les équations la régissant n'ont pas été implantées. Ces limites étant posées, le module implanté a été partiellement validé par comparaison avec d'autres codes numériques et par calcul d'ordres de grandeur. Cette validation a été réalisée dans une configuration bidimensionnelle où le moteur de l'écoulement est la convection thermosolutale, décrite par l'approximation de Boussinesq dans le terme de pesanteur de l'équation de conservation de quantité de mouvement. Cette configuration correspond à celle étudiée par Medina [61], c'est à dire à un petit rectangle de dimensions cinq millimètres par un centimètre. Les résultats sont similaires dans leur ensemble. Les canaux ségrégués se situent préférentiellement au niveau des parois. Ceux-ci ne semblent pas être un artefact numérique car leurs positions et leurs tailles restent inchangées lorsque l'on modifie le pas de temps, que l'on raffine le maillage, que l'on change la perméabilité... Il est à noter que, dans ces cas

bidimensionnels, la légère inhomogénéité de concentration initiale introduite n'influe nullement sur les résultats, quelle que soit la grandeur physique considérée.

Dans un deuxième temps, une étude de l'influence de la convection forcée, engendrée par brassage électromagnétique, a été effectuée sur la même configuration bidimensionnelle. Différentes configurations de brassage ont été mises en avant afin de corréliser forme de l'écoulement et position des ségrégations (écoulements à deux vortex, écoulement à un vortex...). Il en ressort que le champ magnétique qui contrôle l'écoulement est également un pilote de ségrégations. S'il ne les corrige pas (au contraire, il pourrait avoir tendance à les aggraver légèrement), il permet de définir avec une précision appréciable quel sera l'emplacement des canaux ce qui est déjà un avantage considérable. La non-prise en compte de l'effet Joule créé par les inducteurs a été confirmé. Ce point reste toutefois à surveiller pour des brassages électromagnétiques plus importants et donc des inducteurs créant plus de chaleur par effet Joule, chaleur qui pourrait entraîner des refontes locales.

L'aspect tridimensionnel du code a été étudié dans le cas de barreaux cylindriques de un centimètre de diamètre pour deux de hauteur. Cet aspect tridimensionnel et sa facilité de mise en œuvre constituent le point fort du code et du logiciel FLUENT présentés tout au long de cet exposé. L'étude faite porte sur l'influence de la convection naturelle ainsi que sur celle d'un brassage électromagnétique rotatif. En convection naturelle, il est possible d'observer des cheminées verticales réparties aléatoirement. Une préférence de positionnement de ces canaux sur les parois latérales est très visible. Il est à noter, et cela semble être un phénomène peu étudié jusqu'à présent, qu'il y a non-reproductibilité du positionnement de ces canaux si l'initialisation aléatoire en concentration n'est pas la même. Ceci est une grande différence avec les cas bidimensionnels. On peut observer également que certains canaux, lorsqu'ils sont trop proches les uns des autres, ont tendance à disparaître comme s'il existait une distance minimale entre canaux pour que ceux-ci soient viables. Cette distance minimale pourrait correspondre à la délimitation d'une zone de drainage de soluté afin d'alimenter les canaux ségrégués. En effet, entre des calculs à l'initialisation en concentration différente, on peut remarquer que l'espacement moyen entre les canaux ne varie pas. Il serait intéressant de mener une étude statistique sur des diamètres de cylindres différents afin d'essayer d'établir une éventuelle loi de dépendance entre rayon du cylindre et espacement entre canaux, nombre de canaux... La superposition d'un brassage rotatif conduit à la disparition de ces cheminées pour créer une ségrégation centrale majeure dans le cylindre. L'intensité des forces électromagnétiques est vingt fois inférieure à celle utilisée dans les études bidimensionnelles qui ont précédé. Toutefois, elle conduit à un écoulement dont l'intensité des vitesses est similaire (de l'ordre du centimètre par seconde). Un pompage d'Eckman apparaît à proximité du front de solidification créant une re-circulation depuis les zones de hautes pressions (i.e. à proximité des parois latérales) vers les zones de basses pressions (i.e. au centre du cylindre). Cette re-circulation draine le soluté de l'extérieur vers l'intérieur du cylindre

donnant naissance à un canal ségrégué central. L'avantage est de savoir exactement où le canal se trouve, c'est à dire au centre de manière systématique, par rapport à un cas en convection naturelle où le positionnement des canaux ségrégués n'est pas déterminable. Il serait intéressant d'étudier l'influence d'un champ glissant dans un barreau cylindrique ainsi que celle de l'intensité d'un brassage rotatif, ceci afin de mener une étude sur le phénomène de zone blanche, bien connu des métallurgistes de l'acier travaillant sur la coulée continue sous champ magnétique. Le code et le logiciel semblent être l'outil idéal pour ce genre d'étude de par la souplesse de modification des forces magnétiques éventuelles. En revanche, on peut lui reprocher un temps de calcul relativement long (plusieurs jours utilisateur au minimum).

Une autre problématique a toutefois été soulevée : les étapes de validation par calcul d'ordres de grandeur ou par comparaison avec les résultats d'autres codes numériques, si elles sont intéressantes, restent limitées ou partielles devant le grand nombre de paramètres entrant en jeu. La nécessité d'expériences de validation apparaît afin de confronter simulation et réalité. Or la littérature concernant des expériences sur des alliages métalliques (et non pas des solutions aqueuses ou autres) est très restreinte. A cette fin, une expérience de validation a été élaborée afin de combler ce manque. Celle-ci présente l'originalité de compenser les pertes thermiques par rayonnement plutôt que de travailler avec un creuset isolant qui perturberait les mesures de par sa capacité calorifique et son volume. Elle permet l'obtention de cartes de température, de thermogrammes, de puissances extraites ainsi que de cartes de concentration, de macrostructures, de fraction eutectique par analyse post-mortem. Toutefois, l'inertie de la « boîte de Kirchhoff », compensatrice du rayonnement provenant du creuset contenant le lingot à solidifier, empêche de réaliser des solidifications rapides. En effet, cette dernière ne peut évacuer son excédent de chaleur que par rayonnement avec le creuset et l'enceinte générale ce qui dans un cas perturberait dramatiquement notre expérience et dans l'autre n'est pas assez rapide et efficace. Il serait intéressant, si une suite est donnée, de constituer une boîte froide qui permettrait d'évacuer cet excédent de chaleur lorsque nécessaire. Le système s'apparenterait alors à des boîtes gigognes : lingot, creuset, boîte compensatrice du rayonnement, boîte froide, enceinte. Un deuxième point noir est à soulever : celui-ci concerne les thermocouples sans soudures froides qui devaient permettre de mesurer avec précision des fluctuations de type Rayleigh-Bénart. Leur amorçage s'est révélé être un échec alors qu'il s'était réalisé avec succès lors des expériences préliminaires de conception. Ce principe de thermocouple serait à retravailler et à étudier par la suite car il présente l'avantage d'avoir des temps de réponse quasi-immédiats. Il n'a malheureusement pas été possible ici de perfectionner et utiliser de manière concluante ce procédé. Un soin particulier a été mené au niveau de la connectique afin d'éviter des courants parasites créés par effet Seebeck. Ce contrôle se fait par l'intermédiaire de « boîtes froides » thermostatées.



Pour finir, plusieurs campagnes de mesures ont été menées. Si les analyses de concentration et les radiographies ne posent aucun problème, il n'en est pas de même pour l'ensemble des mesures de température qui nécessiteraient encore des campagnes de correction suite aux conditions de tolérance sur les thermocouples qui ont été évoquées. Les résultats bruts seulement (non corrigés) ont été présentés dans cet exposé afin de dégager des tendances préliminaires et provisoires. Les conclusions ici présentées sont donc provisoires et soumises à caution jusqu'à être complétées par des études supplémentaires. Les premières concernent l'étain pur (étain 4N). Si plusieurs solidifications ont été étudiées, des mesures sur quelques fusions ont également été réalisées. Ces dernières ont montré l'existence d'une légère rétraction à l'état solide qui entraîne la présence d'une résistance thermique entre la paroi de fusion et le lingot à l'état solide. Cette mince couche de vide (systématique) empêche d'effectuer des mesures de fusion propres (tant que le métal liquide n'épouse pas à nouveau la paroi d'échange thermique) mais ce n'était pas l'objectif du système. Toutefois, cette résistance thermique (qui semble avoir été sous-estimée) se retrouve dans toutes les expériences menées, même celles de solidification dès l'apparition du premier solide. On semble toutefois retrouver une boucle de convection telle qu'attendue lorsque l'échantillon est à l'état liquide (le métal liquide épouse parfaitement la face de fusion). En ce qui concerne les solidifications d'alliage, trois points importants ont déjà été mis en avant. Le premier concerne un léger rebond de température au début de la solidification qui est visible pour les thermocouples les plus proches de la paroi d'extraction. Son explication n'est pas encore totalement éclaircie. Est-elle due à une germination hétérogène sur les pointes de thermocouples qui ne seraient pas totalement affleurantes ? Les cartes de macrostructures démentent cette hypothèse. Elle peut correspondre également au début de rejet de chaleur latente qui déstabilise le système avant que les PID ramènent la régulation à son équilibre. Les faibles vitesses de solidification jouent contre cette hypothèse. Il semblerait que la cause la plus probable soit l'apparition d'une résistance de contact entre l'échantillon et la paroi d'échanges thermiques qui perturbent l'extraction du flux thermique. Les plateaux de solidification sont bien visibles et permettent le calage des courbes de température une fois les corrections effectuées. Le troisième point concerne un rebond de température une douzaine de degré en dessous de la température eutectique. Celui-ci, compte tenu des corrections de mesures à apporter et de la barrière de germination à franchir pour solidifier la seconde phase solide, correspond à la solidification du liquide interdendritique. La seconde phase à solidifier étant du bismuth à plus de 99 %, cela explique l'importance de la barrière de germination à franchir. Les radiographies effectuées montrent une zone de forte densité en canaux ségrévés, zone se situant dans la partie proche de la paroi d'échange thermique. Les analyses couplées à ces radiographies montrent une ségrégation majeure sur la partie basse du lingot (liseré dû à la plus forte densité du bismuth) et la partie terminale (macroségrégation normale). Les simulations numériques effectuées donnent en deux dimensions des cartes de concentration fortement similaires qualitativement mais également quantitativement en moyenne. Une étude plus précise reste à faire. Les cartes de macrostructures obtenues et celles de fraction eutectique vont dans le même sens et

confortent les résultats numériques obtenus. L'accord avec les cartes tridimensionnelles de concentration est bien moindre. La question de savoir si cela est dû à un effet de maillage (trop grossier) n'est pas encore tranchée. Il serait intéressant de mener des calculs avec des propriétés différentes pour le liquide et le solide mais aussi avec un maillage plus fin pour les cas 3D. Quoiqu'il en soit les résultats des cartes de macrostructures semblent mettre en doute l'hypothèse de bidimensionnalité, au moins à ce niveau. L'étude des mesures thermiques corrigées permettra de compléter, dans un futur proche, les résultats déjà présentés. Ceux déjà obtenus permettent de valider une grande partie du code numérique réalisé.



# Bibliographie

- [1] N. Ahmad, H. Combeau, J.L. Desbiolles, T. Talanti, G. Lesoult, J. Rappaz, M. Rappaz, C. Stomp, « Numerical simulation of macroségrégation : a comparison between finite volume method and finite element method and a confrontation with experiments », *Metall. Trans A29*, pp. 617-630, 1998.
- [2] D.J. Allen, J.D. Hunt, *Met. Trans. A*, **10A**, p.1389, 1979.
- [3] C. Beckermann, R. Viskanta, « Double-diffusive convection during dendritic solidification of a binary mixture », *Physico-chemical Hydrodynamics*, **vol. 10**, pp. 195-213, 1988.
- [4] C. Beckermann and R. Viskanta, « Natural convection solid/liquid phase change in porous media », *Int. J. Heat Mass Transfer*, **vol. 31**, pp. 35-36, 1988.
- [5] C. Beckermann, R. Viskanta, « Mathematical modelling of transport phenomena during alloy solidification », *Annual Review of Heat Transfer*, **46 (1)**, pp. 1-27, 1993.
- [6] C. Beckermann, C.Y. Wang. « Incorporating Interfacial Phenomena in Solidification Models ». *Journ. of Mech.*, janvier 1994, pp. 42-47.
- [7] C. Bénard, D. Gobin, F. Martinez, « Melting in rectangular enclosures : Experiments and numerical simulations », *Journal of Heat Transfer*, **vol. 107**, pp. 794-802, november 1985.
- [8] J. Bénard, A. Michel, J. Philibert et J. Talbot, « *Métallurgie générale* », 2<sup>nde</sup> édition, Masson, 1984.
- [9] W. D. Bennon, F. P. Incropera, « A continuum model for momentum, heat and species transport in binary solid-liquid phase change systems. I .model formulation », *Int. Journal Heat and Mass Transfer*, **30**, pp. 2161-71, 1987.
- [10] O. Bertrand, B. Binet, H. Combeau, S. Couturier, Y. Delannoy, D. Gobin, M. Lacroix, P. Le Quéré, M. Médale, J. Mencinger, H. Sadat, G. Vieira, « *Melting driven by natural convection. A comparison exercise : first results* », *Int. J. Therm. SCI.*, **vol. 38**, pp. 5-26, 1999.

- [11] P. Bousquet-Mélou, « Modélisation macroscopique et simulation numérique de la solidification des mélanges binaires », Thèse de Doctorat, Université Pierre et Marie Curie – Paris VI, 2000.
- [12] C. Chen, D. Briggs, and R. Wirtz, « Stability of thermal convection in salinity gradient due to lateral heating », *Int. J. Heat Mass Transfer*, **14**, pp. 57-65, 1971.
- [13] C.F. Chen, F. Chen, « Experimental study of directional solidification of aqueous ammonium chloride solutions », *J. Fluid Mech.*, **vol. 227**, pp. 567-86, 1991.
- [14] A. Ciobanas, « Modélisation numérique de la solidification interdendritique. Influence du brassage électromagnétique sur les macroségrégations », DEA de l'INPG, 2002.
- [15] H. Combeau, G. Lesoult. « Modelling of transport phenomena occurring during alloy solidification ». Post-graduate Course in solidification, pp. 10.24 à 10.38.
- [16] S.M. Copley, A.F. Giamei, S.M. Johnson and M.F. Hornbecker, « The origin of freckles in unidirectionally solidified casting », *Metall. Trans.*, **vol. 1**, pp. 2193-2204, 1970.
- [17] A. Craik, « Wave interactions and fluid flows », Cambridge University Press, Cambridge (UK), 1995.
- [18] Y. Dabo, H. Nguyen Ti, B. Billia, D. Camel, B. Drevet, M. D. Dupouy, J.J. Favier, « Microstructural transitions during initial transients in directional solidification of aluminium-nickel alloys », *Revue de Métallurgie*, **126**, novembre 1999.
- [19] D.A. Drew, « Mathematical modeling of two-phase flow », *Ann. Rev. Fluid Mech.*, **15**, pp. 261-91, 1983.
- [20] J. E. Drummond, M. I. Tahir, « Laminar viscous flow through regular arrays of parallel solid cylinders », *Int. J. Multiphase flow*, **vol. 10**, pp. 515-540, 1984.
- [21] S. El Barakat, « Etude de la macroségrégation dans les alliages binaires par simulation numérique », DESS de l'Université Nancy 1, 2000.
- [22] Y. Fautrelle, P. Lehmann, G. Quillet, M. Medina, F. Durand, Y. du Terrail, « Modelling of the mesosegregations under the influence of forced convection : a statistical phase-averaged approach », *Interactive dynamics of convection and solidification*, Kluwer Academic Publishers, pp. 81-90.
- [23] S. D. Felicelli, « Simulation of Freckles during Vertical Solidification of Binary Alloys », Ph.D. dissertation, University of Arizona, Tucson, 1991.
- [24] S. Felicelli, « Three-dimensional simulations of freckles in multicomponent alloys », *Computational Mechanics, New trends and Applications*, S. Idelsohn, E. Oaete and E. Dvorkin eds., CIMNE, Barcelona, Spain, 1998.

- [25] S.D. Felicelli, « Three-dimensional simulations of freckles in multicomponent alloys », *Computational Mechanics, New Trends and Applications*, S. Idelsohn, E. Onate and E. Dvorkin (Ed), CIMNE, Barcelona, Spain, pp. 1-12, 1998.
- [26] S. D. Felicelli, J. C. Heinrich and D. R. Poirier, « Simulation of freckles during vertical solidifications of binary alloys », *Metallurgical Transactions B*, **vol. 22B**, pp. 847-859, 1991.
- [27] S. D. Felicelli, J. C. Heinrich and D. R. Poirier, « Numerical model for dendritic solidification of binary alloys », *Numerical Heat Transfer, Part B*, **vol. 23**, pp. 461-481, 1993.
- [28] S.D. Felicelli, J.C. Heinrich and D.R. Poirier, « Finite element analysis of directional solidification of multicomponent alloys », *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, **vol. 27**, pp. 207-227, 1998.
- [29] S.D. Felicelli, J.C. Heinrich and D.R. Poirier, « Three-dimensional simulations of freckles in binary alloys », *Journal of Metals*, pp. 21-25, 1998.
- [30] S.D. Felicelli, D.R. Poirier, A.F. Giamei and J.C. Heinrich, « Simulating convection and macrosegregation in superalloys », *Journal of Metals*, pp. 21-25, 1997.
- [31] S.D. Felicelli, D.R. Poirier and J.C. Heinrich, « Macrosegregation patterns in multicomponent Ni-base alloys », *Journal of Crystal Growth*, **n°177**, pp. 145-161, 1997.
- [32] S. D. Felicelli, D.R. Poirier and J.C. Heinrich, « Modeling freckle formation in three dimensions during solidification of multicomponent alloys », *Metall. Trans. B*, **vol. 29B**, pp. 84-855, 1998.
- [33] S.D. Felicelli, P.K. Sung, J.C. Heinrich and D.R. Poirier, « Transport properties and transport phenomena in casting nickel superalloys », *International Journal Thermophysics*, **vol. 19**, pp. 1657-1669, 1998.
- [34] M. C. Flemings, « *Solidification Processing* », McGRAW-HILL Book Company, 1974.
- [35] M.C. Flemings, R. Mehrabian, G.E. Nereo, « Macrosegregation : Part 2 », *Trans. Met. Soc. AIME* 242, pp. 41-49, 1968.
- [36] M.C. Flemings, G.E. Nereo, « Macrosegregation : Part 1 », *Trans. Met. Soc. AIME* 239, pp. 1449-1461, 1967.
- [37] M.C. Flemings, G.E. Nereo, « Macrosegregation : Part 3 », *Trans. Met. Soc. AIME* 242, pp. 50-55, 1968.
- [38] P. Furmanski, « Microscopic-macroscopic modelling of transport phenomena during solidification in heterogeneous systems », *Institute of Heat Engineering, Warsaw University of Technology, Warsaw, Poland*.

- [39] A. Gadgil, D. Gobin, « Analysis of two-dimensional melting in rectangular enclosures in presence of convection », *Journal of Heat Transfer*, **vol. 106**, pp. 20-25, february 1984.
- [40] S. Ganesan, Ph. D. Dissertation, University of Arizona, Tucson, AZ, 1990.
- [41] S. Ganesan, D. R. Poirier. « Conservation of Mass and Momentum for the Flow of Interdendritic Liquid during Solidification ». *Metall. Trans. B*, **vol. 21B**, pp. 173-181, 1990.
- [42] C. Gau et R. Viskanta, « Effect of crystal anisotropy on heat transfer during melting and solidification of a metal », *Transactions of the ASME Journal of Heat Transfer*, **vol. 107**, pp. 706-708, august 1985.
- [43] S. Geoffroy, « Etude expérimentale des transferts et des conditions d'équilibre à l'interface de changement d'état d'un matériau binaire », Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie, 2001.
- [44] A. F. Giamei, B. H. Kear : « On the nature of freckles in nickel base superalloys » *Metall. Trans.* **vol. 1**, pp. 2185-92, 1970.
- [45] W. Gray, « A derivation of the equations for multi-phase transport », *Chemical Engineering Science*, **30**, pp. 229-233, 1975.
- [46] D.J. Hebditch and J.D. Hunt, « Observations of ingot macrosegregation on model systems », *Metallurgical Transactions*, **vol. 5**, pp. 1557-64, july 1974.
- [47] J.C. Heinrich, « A finite element model for double diffusive convection », *Int. J. Num. Meth. Eng.*, **vol. 20**, pp. 447-64, 1984.
- [48] J.C. Heinrich, « Numerical simulation of thermosolutal instability during directional solidification of a binary alloy », *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, **vol. 69**, pp. 65-88, 1988.
- [49] J.C. Heinrich, S. Felicelli, P. Nandapurkar and D.R. Poirier, « Thermosolutal convection during dendritic solidification of alloys. II. Nonlinear convection », *Metall. Trans. B*, **vol. 20B**, pp. 883-91, 1989.
- [50] J.C. Heinrich, S. Felicelli, D.R. Poirier, « Vertical solidification of dendritic binary alloys », *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.* 89, pp. 435-461, 1991.
- [51] J.C. Heinrich, R.S. Marshall, « Viscous Incompressible flow by a penalty function finite element method », *Computer and Fluids*, **vol. 9**, pp. 73-83, 1981.
- [52] J.C. Heinrich, C.C. Yu, « Finite element simulation of Buoyancy-driven flows with emphasis on natural convection in a horizontal circular cylinder », *Comp. Met. Appl. Mech. Eng.* **vol. 69**, pp. 1-27, 1988.
- [53] A. Hellawell, J. R. Sarazin, R.S. Steube, « Channel convection in partly solidified systems », *Phil. Trans. R. Soc. London, A*. 345, pp. 507-544, 1993.

- [54] D.W. Kelly, S.Nakazawa, O. Zienkiewicz, J.C. Heinrich, « A note on upwinding and anisotropic approximations to convective diffusion problems », *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **vol. 15**, pp. 1705-1711, 1980.
- [55] W. Kurz, D.J. Fisher, « Fundamentals of solidification », Trans Tech Publications, Aedermannsdorf, Switzerland, 1989.
- [56] P. Lehmann, G. Lesoult, S. Denis, « Ségrégations héritées de la solidification dans les matériaux de structure : mécanisme de formation et conséquences sur les traitements thermiques et thermomécaniques », Journées du Programme Matériaux, Colloque d'étape, pp. 91-95, 13-15 décembre 2000.
- [57] P. Lehmann, R. Moreau, D. Camel, R. Bolcato, « Modelisation of interdendritic convection in directional solidification by a uniform magnetic field », *Acta Mater*, **vol. 46**, n° 11, pp. 4067-4079, 1998.
- [58] G. Lesoult, « Solidification, cristallisation et microstructures », *Techniques de l'ingénieur*, **M 58**, pp. 1-26.
- [59] C. Marle, « Ecoulements monophasiques en milieu poreux », *Revue de l'Institut Français du Pétrole*, **vol. XXII (10)**, pp. 1471-1509, 1967.
- [60] R.J. Mc Donald, J.D. Hunt, « Fluid motion through the partially solid regions of a casting and its importance in understanding A type of segregation », *Trans. Met. Soc. AIME* **245**, 1993-1997, 1969.
- [61] M. Medina, « Ségrégation en solidification en présence de convection forcée », Thèse de doctorat, INPG – ENSHMG, Grenoble, 2000.
- [62] M Medina, F. Durand, Y. Duterrail, Y. Fautrelle, « Modélisation de la macroségrégation en solidification sous convection naturelle », *Congrès Français de Thermique, SFT 99 'Thermique et Matériaux'*, 1999.
- [63] M. Medina, Y. Duterrail, F. Durand, Y. Fautrelle, « Numerical simulation of the mesosegregation of binary alloys : influence of permeability laws and body forces », *Revue de Métallurgie*, **127**, novembre 1999.
- [64] M.Medina, Y. Duterrail, F. Durand, Y. Fautrelle, « Effect of an AC travelling field on medium scale segregation, some results of a numerical model », *Proceedings of 3rd International Symposium on Electromagnetic Processing of Materials, EPM*, 4-6 April 2000, ed. by I.S.I.J., pp. 451-456, 2000.
- [65] *Metals Handbook*, 8th ed., ASM, Metals Park, OH, **vol. 8**, pp. 330, 1973.
- [66] R.Moreau, « Magnetohydrodynamics », Kluwer, 1990.
- [67] S. Morioka, T. Nakajima, « Modelling of gas and solid particle two phase flow and application to fluidized bed », *Journal de Mécanique Théorique et Appliquée*, **vol. 6**, pp. 77-88, 1987.



- [68] P. Nandapurkar, D. R. Poirier and J. C. Heinrich, « The momentum equation for dendritic solidification », *Numer. Heat Transfer, Part A*, **vol. 19**, pp. 297-311, 1991.
- [69] H. Nguyen Thi, B. Billia and H. Jamgotchian, « Influence of thermosolutal convection on the solidification front during upwards solidification », *J. Fluids Mech.* **N°204**, pp. 581-597, 1989.
- [70] J. Ni, C. Beckermann. « A two-phase model for mass, momentum, heat and species transport during solidification ». 5<sup>th</sup> AIAA/ASME Thermophysics and Heat Transfer Conference, Seattle, juin 1990.
- [71] J. Ni, C. Beckermann, « A volume-averaged two-phase model for transport phenomena during solidification », *Metallurgical Transactions B.*, **vol. 2**, pp. 349-361, 1991.
- [72] D.R. Poirier, « Permeability for flow of interdendritic liquid in columnar-dendritic alloys », *Metallurgical Transactions B*, **vol. 18B**, pp. 249-256, 1987.
- [73] D.R. Poirier, J.C. Heinrich and S.D. Felicelli, « Simulation of transport phenomena in directionally solidified casting », *Proceeding of the Julian Szekely Memorial Symposium on Materials Processing*, H.Y. Sohn, J.W. Evans and D. Apelian (eds). TMS, Warrendale, PA, pp. 393-410, 1997.
- [74] D. R. Poirier, P. Nandapurkar and S. Ganesan, « The energy and solute conservation equation for dendritic solidification », *Metall. Trans. B*, **vol. 22B**, pp. 889-900, 1991.
- [75] P.J. Prescott, F.P. Incropera, « The effect of turbulence on solidification of a binary metal alloy with electromagnetic stirring », *J. of Heat Transfer*, **vol. 117**, pp. 716-724, 1995.
- [76] P. Prescott, F. Incropera, « Convection heat and mass transfer in alloy solidification », *Advances in Heat Transfer*, **vol. 28**, pp. 231-337, 1996.
- [77] M. Rappaz, M. Bellet, M. Deville. « Modélisation numérique en science et génie des matériaux ». Presses Polytechniques et Universitaires Romandes, 1998, Première édition.
- [78] S. Ridder, S. Kou and R. Mehrabian, « Effect of fluid flow on macrosegregation in axi-symmetric ingots », *Metallurgical Transactions B*, **vol. 12B**, pp. 435-447, 1981.
- [79] S.D. Ridder, R. Mehrabian, S. Kou, « A review of our present understanding of macrosegregation in axi-symmetric ingots » (exp on Ni-Mo and Pb-Sn alloys in ESR geometry), in « Modelling casting and welding processes », D. Apelian Ed., pp. 261-283, 1979.
- [80] A.K. Sample, A. Helawell, « The effect of mold precision in channel and macrosegregation in ammonium chloride-water analog castings », *Metall. Trans. B*, **vol. 13B**, pp. 495-501, 1982.
- [81] A.K. Sample, A. Helawell, « The mechanism of formation and prevention of channel segregation during alloy solidification », *Metall. Trans A*, **vol. 15A**, pp. 2163-2173, 1984.

- [82] A. S. Sangani, A. Acrivos, « Slow flow past periodic arrays of cylinders with application to heat transfer » *Int. J. Multiphase Flows*, **vol. 8**, pp. 193-206, 1982.
- [83] J. R. Sarazin, A. Hellawell, « Channel formation in Pb-Sn, Pb-Sb and Pd-Sn-Pb alloy ingots and comparison with the system », *Metallurgical Transactions A***19**, pp. 1861-1871, 1988.
- [84] A. E. Scheidegger, « The physics of flow through porous media », 3rd ed., University of Toronto Press, Toronto, **141**, 1974.
- [85] M.C. Schneider, C. Beckermann, « A numerical study of the combined effects of microsegregation, mushy zone permeability and flow, caused by volume contraction and thermosolutal convection, on macrosegregation and eutectic formation in binary alloy solidification », *Int. Journ. Heat Mass Transfer*, **vol. 38**, n°18, pp. 3455-3473, 1995.
- [86] H. Shahani, G. Amberg, and H. Fredriksson, *Metall. Trans. A.*, **vol. 23A**, pp. 2301-11, 1992.
- [87] J. Szekely, A. Jassal, « An experimental and analytical study of the solidification of a binary dendritic system », *Metallurgical Transactions B*, **9B**, pp. 389-398, 1978.
- [88] M. Tanaka, Thèse de Doctorat, INPG, 1994
- [89] J. Tanny, « Experimental study on the crystallization of a binary melt at the vertical boundary of an enclosure », *Int. J. Heat Mass Trans.*, **vol. 38**, pp. 1141-1150, 1995.
- [90] C.Y. Wang and C. Beckermann, « A multiphase solute diffusion model for dendritic alloy solidification », *Metall. Trans. A*, **vol. 24A**, pp. 2787-2802, 1993.
- [91] S. Whitaker, « Advances in theory of fluid motion in porous media », *Industrial and Engineering Chemistry*, **n° 61(2)**, pp. 14-28, 1969.
- [92] M. G. Worster, « Solidification of an alloy from a cooled boundary », *J. Fluid. Mech.*, **vol. 167**, pp. 481-505, 1986.
- [93] M.G. Worster, « Convection in mushy layers », *Annu. Rev. Fluid Mech*, **29**, pp. 91-122, 1997.
- [94] D. Xu, Q. Li, and R.D. Pehlke, *AFS Trans.*, **vol. 103**, pp. 2055-65, 1997.
- [95] O.C. Zienkiewicz, J.C. Heinrich, « The finite method and convection problems in fluid mechanics », *Finite Elements in Fluids*, **vol. 3**, chapter 1, Gallagher, Zienkiewicz, Oden, Maorandi-Cecchi and Taylor, Eds, Wiley, New York, 1978.



## Annexe A

# Données numériques et diagrammes de phases

**Données numériques Plomb Etain 10% pour le cas type.**

Propriétés Physiques	Unités	Noms	Valeurs
Coefficient de conduction thermique	$W.(m.K)^{-1}$	LAMBDA	24,65
Chaleur latente de solidification	$J.kg^{-1}$	L	40000
Chaleur Spécifique	$J.(kg.K)^{-1}$	CP	145
Coefficient d'expansion thermique	$K^{-1}$	BETA	$1,2.10^{-4}$
Coefficient d'expansion solutale	$(wt\ pct)^{-1}$	X	$5,15.10^{-3}$
Coefficient de diffusion solutale	$m^2.s^{-1}$	DL	$3.10^{-9}$
Coefficient de diffusion liquide turbulent	$m^2.s^{-1}$	DLT	0
Viscosité cinématique	$m^2.s^{-1}$	VISC	$2,47.10^{-7}$
Coefficient de partage		K	0,31
Masse Volumique	$kg.m^{-3}$	RHO	10000

Paramètres du cas type	Unités	Noms	Valeurs
Gravité		G	-9,81
Gradient initial de température	$K.m^{-1}$	GL	1000
Concentration initiale	$Wt\ pct$	C0	10
Température initiale	$K$	TBOT	577,4
Gradient de température appliqué sur la paroi supérieure	$K.m^{-1}$	GTU	1000
Gradient de température appliqué sur la paroi gauche	$K.m^{-1}$	GTL	0
Gradient de température appliqué sur la paroi droite	$K.m^{-1}$	GTR	0
Température de fusion	$K$	TMELT	600,65
Température eutectique	$K$	TEUT	456,42
Concentration eutectique	$Wt\ pct$	CEUT	61,9
Cooling rate	$K.min^{-1}$	COOLR	1,0
Largeur	$M$	WIDTH	$0,5e-2$
Hauteur	$M$	HEIGHT	$1e-2$
Température de solidus de l'alliage considéré	$K$	TSOLIDUS	525
Température de liquidus de l'alliage considéré	$K$	TLIQUIDUS	577,4
Pente de liquidus	$K.(wt\ pct)^{-1}$	M	-2.326

Remarque : les valeurs des coefficients d'expansion solutale et thermique sont données pour une écriture de l'approximation de Boussinesq de la forme suivante (convention de signe) :

$$\rho = \rho_0 [1 - \beta_T(T - T_0) - \beta_S(C - C_0)]$$

**Diagramme de phases Plomb Etain.**

Le diagramme de phases de l'alliage est donné à titre informatif afin que toutes les données et caractéristiques nécessaires au problème étudié soit facilement accessibles (cf. page suivante).

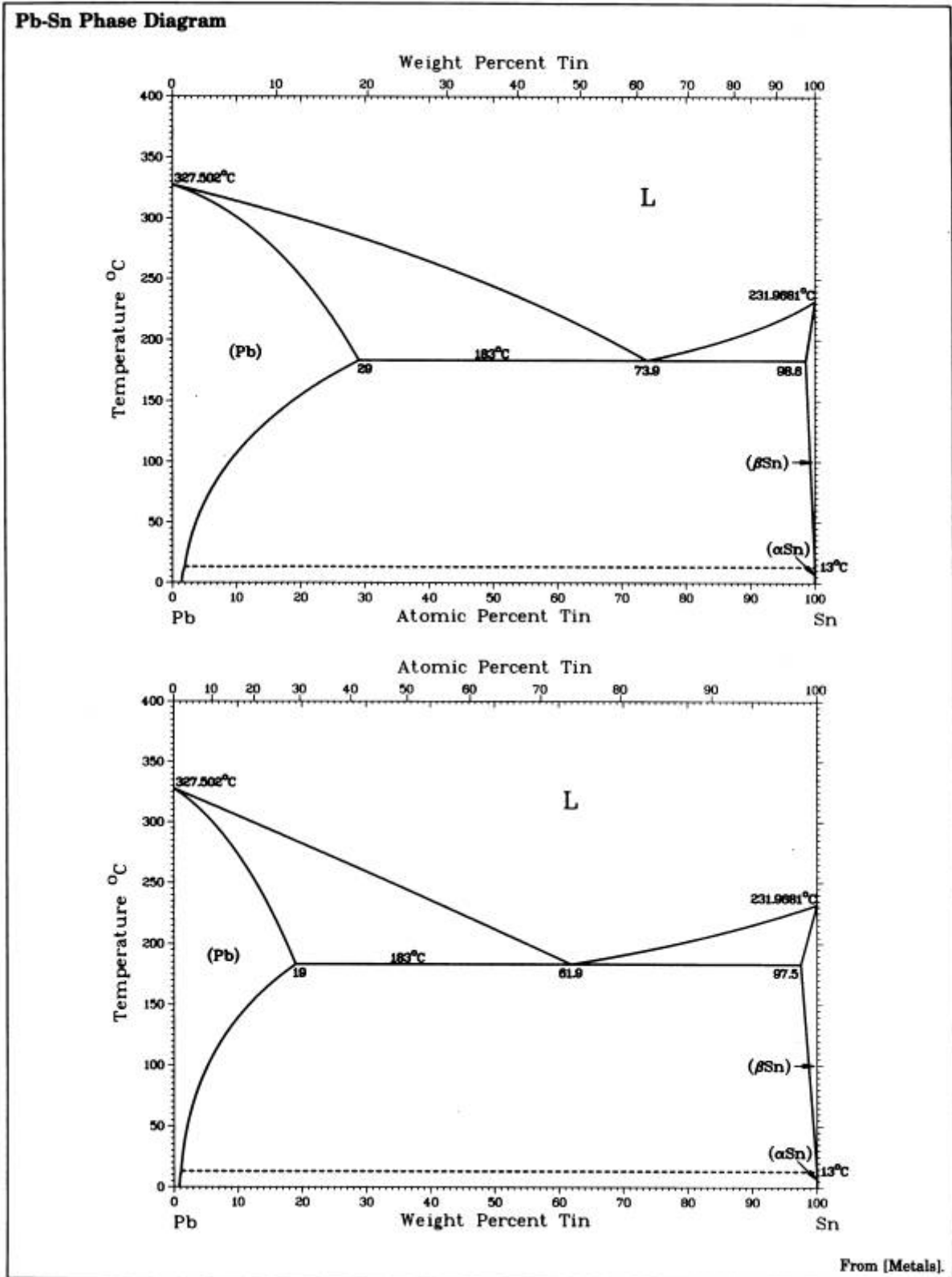


Figure 1 : D'après « Binary Alloy phase diagram ».

**Données numériques pour Etain Bismuth 10% en masse.**

Propriétés Physiques	Unités	Noms	Valeurs
Coefficient de conduction thermique	$W.(m.K)^{-1}$	LAMBDA	60
Chaleur latente de solidification	$J.kg^{-1}$	L	59430
Chaleur Spécifique	$J.(kg.K)^{-1}$	CP	250
Coefficient d'expansion thermique	$K^{-1}$	BETA	$9,5.10^{-3}$
Coefficient d'expansion solutale	$(wt\ pct)^{-1}$	X	$-3.10^{-3}$
Coefficient de diffusion solutale	$m^2.s^{-1}$	DL	$1,8.10^{-9}$
Coefficient de diffusion liquide turbulent	$m^2.s^{-1}$	DLT	0
Viscosité cinématique	$m^2.s^{-1}$	VISC	$2,45.10^{-7}$
Viscosité dynamique	$kg.m^{-1}.s^{-1}$	VISCDYN	$1,85.10^{-3}$
Coefficient de partage		K	0,37
Masse volumique	$kg.m^{-3}$	RHO	7550

Paramètres du cas type	Unités	Noms	Valeurs
Gravité		G	-9,81
Concentration initiale	$Wt\ pct$	C0	10
Température initiale	$K$	TBOT	528
Gradient de température appliqué sur la paroi supérieure	$K.m^{-1}$	GTU	0
Gradient de température appliqué sur la paroi inférieure	$K.m^{-1}$	GTL	0
Gradient de température appliqué sur la paroi droite	$K.m^{-1}$	GTR	0
Température de fusion	$K$	TMELT	505,15
Température eutectique	$K$	TEUT	412,15
Concentration eutectique	$Wt\ pct$	CEUT	57
Cooling rate	$K.min^{-1}$	COOLR	2 ou 5
Largeur	$m$	WIDTH	5e-2
Hauteur	$m$	HEIGHT	6e-2
Epaisseur (cas 3D)	$m$	THICKNESS	1e-2
Température de liquidus de l'alliage considéré	$K$	TLIQUIDUS	488,95
Pente de liquidus	$K.(wt\ pct)^{-1}$	M	-1,62

Remarque : les valeurs des coefficients d'expansion solutale et thermique sont données pour une écriture de l'approximation de Boussinesq de la forme suivante (convention de signe) :

$$\rho = \rho_0 [1 - \beta_T(T - T_0) - \beta_S(C - C_0)]$$

**Diagramme de phases Etain Bismuth.**

Le diagramme de phases de l'alliage est donné à titre informatif afin que toutes les données et caractéristiques nécessaires au problème étudié soit facilement accessibles (cf. page suivante).

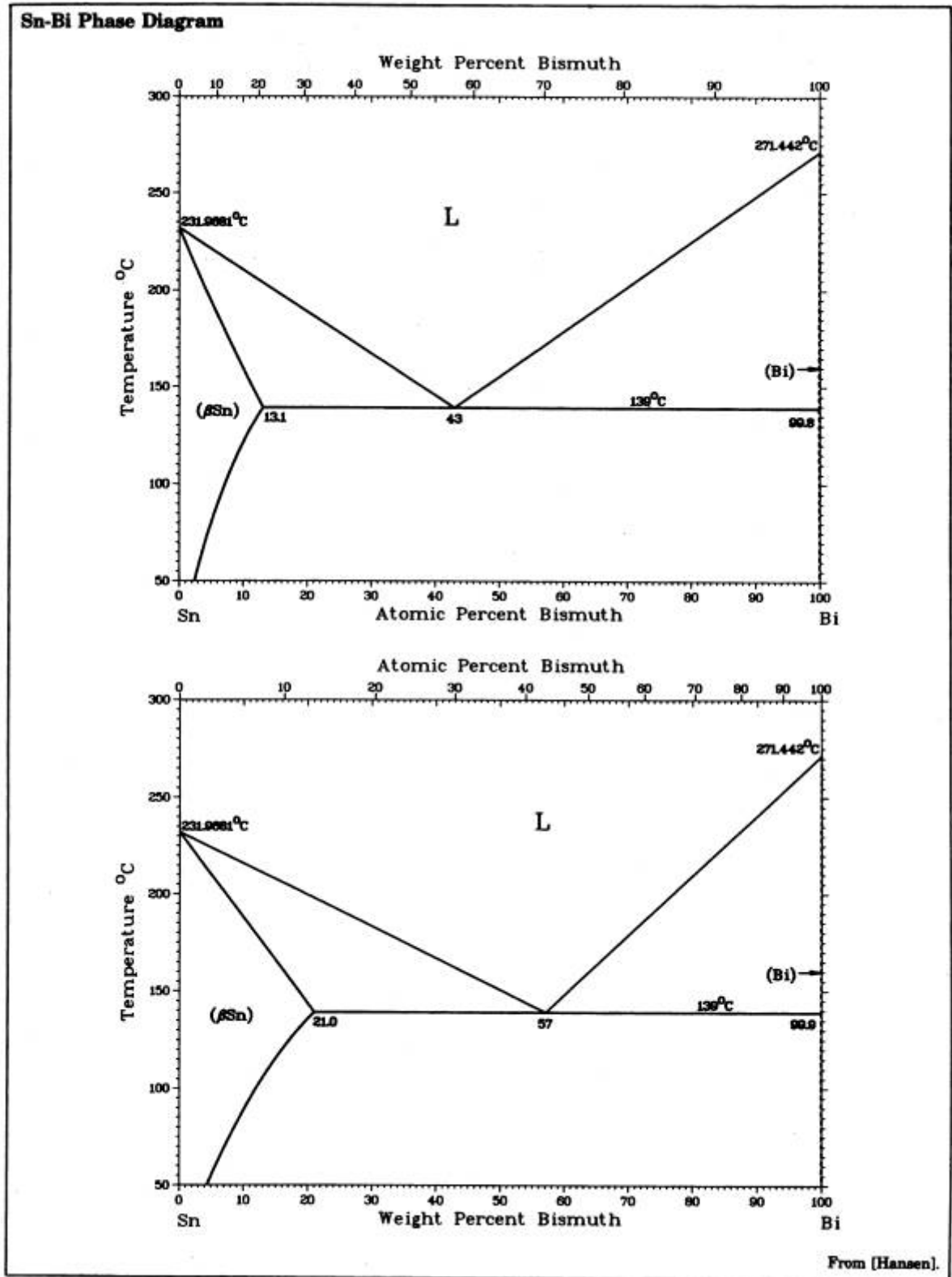


Figure 2 : D'après « Binary Alloy phase diagram ».



**Quelques propriétés du cuivre.**

Masse volumique	$8950 \text{ kg.m}^{-3}$
Conductivité thermique	$386 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$
Diffusivité thermique	$1,1.10^{-4} \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$

Figure 3 : Quelques propriétés physiques du cuivre à 20 °C.

**Quelques propriétés de l'étain.**

Masse volumique à 20 °C.	$7,28 \text{ kg.m}^{-3}$
Masse volumique (à l'état solide à la température de fusion).	$7,16 \text{ kg.m}^{-3}$
Masse volumique (à l'état liquide à la température de fusion).	$6,986 \text{ kg.m}^{-3}$
Température de fusion.	$231,9 \text{ °C}$
Viscosité dynamique (à 240 °C).	$1,91.10^{-3} \text{ kg.(m.s)}^{-1}$
Chaleur spécifique.	$250 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$
Chaleur latente de fusion.	$60 \text{ J.g}^{-1}$
Conductivité thermique (dans la gamme 0-100 °C)	$66,8 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$
Diffusivité thermique	$3,8.10^{-5} \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$
Coefficient d'expansion thermique (dans la gamme 0-100 °C)	$23,5.10^{-6} \text{ K}^{-1}$

Figure 4 : Quelques propriétés physiques de l'étain.

## Annexe B

# Moyennage statistique de phase

## **MODELLING OF THE MESO-SEGREGATIONS UNDER THE INFLUENCE OF FORCED CONVECTION: A STATISTICAL PHASE-AVERAGED APPROACH**

Y. FAUTRELLE, P. LEHMANN, G. QUILLET, M. MEDINA, F. DURAND, Y. DU TERRAIL

INPG/CNRS/EPM-MADYLAM  
ENSHMG, BP 95, 38402 Saint Martin d'Hères Cedex  
Yves.Fautrelle@hmg.inpg.fr

**Keywords:** forced convection, phase-averaging, meso-segregation, equiaxed growth, kinetic theory, granular phase

**Abstract.** We propose a new approach for the equiaxed solidification of metallic alloys. It is based on the coupling between a statistical phase averaging technique applied to the liquid phase as well as a kinetic theory used for the particles. That method allows us to derive general conservation equations for the granular phase which are consistent with the statistical phase averaging in the liquid phase.

### **1. Introduction**

For solute rich alloys of technical interest (for example Ni-base superalloys, high carbon and chromium steels) macro- and meso-scale segregates make a severe limitation in the solidification step. A way for improvements can be searched in the application of electromagnetic techniques for acting on the liquid+solid mixture. Numerical models should bring valuable informations on that step. From a theoretical point of view, they involve coupled heat, momentum, solute transport phenomena in a two-phase medium. The most recent models are based on volume averaging techniques<sup>1-4</sup>. Although fruitful, that approach has various limitations. Firstly, the choice of the representative elementary volume (REV) may be questionable due to the multiplicity of the spatial scales. Indeed, the volume-averaging technique exerts an uncontrolled cut-off of the spatial scales. The latter point may be quite crucial when we deal with the freckle problem. Secondly, the liquid motion outside the mushy zone may be turbulent, especially when electromagnetic stirring is used, e.g., in continuous casting of steel or aluminium. In that case, the spatial averaging procedure may not easily be extended to situations where the liquid flow is turbulent.

We propose a new approach based on the statistical phase-averaging technique. The solidification phenomenon is assumed to be a random process. However, mean quantities, such as the mean flow, the mean temperature etc. are deterministic and may be calculated. Such an approach mainly applies in the case where the domain is large and the flow turbulent (weakly or fully turbulent). In the present paper attention is focused on the liquid region. The equations governing the mean fields

are derived from the instantaneous ones by means of the ensemble phase-averaging technique. The solid equiaxed grain motion is treated by means of a kinetic theory of solid particles.

## 2. The equations

We consider a binary fluid mixture which is solidifying. That volume contains both

- a liquid phase ( $l$ ) with an average density  $\rho_l$  and moving at an instantaneous velocity  $u_{lj}$ ,
- a granular solid phase ( $s$ ) with an average density  $\rho_s$  and moving at a velocity  $\xi_j$ .

The instantaneous solute concentrations are noted  $c_k$  for each  $k$ -phase. In the same way we define the enthalpy  $h_k$  and a single temperature field  $\theta$  for both phases. We shall establish the average equations for the liquid and solid phase.

### 2.1. THE GENERAL AVERAGED EQUATIONS

We use the ensemble phase averaging procedure. Such a method has been largely used in multiphase flows<sup>5</sup>. Let us consider any function  $\psi(\mathbf{x}, t)$  and a phase function  $X_k(\mathbf{x}, t)$  such that  $X_k(\mathbf{x}, t) = 1$  in the  $k$ -phase and 0 elsewhere. We define a ensemble phase averaged quantity  $\Psi(\mathbf{x}, t)$  in the following way :

$$f_k \Psi_k = \langle X_k(\mathbf{x}, t) \psi(\mathbf{x}, t) \rangle, \quad f_k = \langle X_k(\mathbf{x}, t) \rangle \quad (1)$$

$f_k$  being the volume fraction. The instantaneous fields may be split into a mean value  $\Psi$  and a fluctuating one  $\psi'$  such that

$$\psi = \Psi + \psi' \quad \text{with} \quad \langle X_k(\mathbf{x}, t) \psi(\mathbf{x}, t) \rangle = f_k \Psi_k \quad \text{and} \quad \langle X_k(\mathbf{x}, t) \psi'(\mathbf{x}, t) \rangle = 0. \quad (2)$$

In the same way, we define the various mean fields :

$$\text{- mean velocities } U_{ki}, \quad (3.a)$$

$$\text{- mean concentrations : } C_k, \quad (3.b)$$

$$\text{- mean temperature : } T, \quad (3.c)$$

$$\text{- mean enthalpy : } H_k. \quad (3.d)$$

Obviously, the other theorems such that Leibniz rule, Gauss theorem, are applicable to the ensemble averaging method. Finally, the ensemble phase average of the product of two instantaneous quantities  $\phi(\mathbf{x}, t)$  and  $\psi(\mathbf{x}, t)$  yields :

$$\langle X_k \phi \psi \rangle = f_k \Phi_k \Psi_k + \langle X_k \phi' \psi' \rangle \quad (4)$$

The phase function has the following classical properties. If  $v_i$  denote the velocity components of the liquid-solid interface, then we have :

$$\frac{\partial X_k}{\partial t} + v_j \frac{\partial X_k}{\partial x_j} = 0, \quad \text{with} \quad \frac{\partial X_k}{\partial x_j} = -n_{kj} \delta_k, \quad (5)$$

where  $n_{kj}$  is a normal unit vector at the liquid-solid interface. The function  $\delta_k$  which is proportional to a Dirac function is the interfacial area density.

Let us now establish the equations governing the mean values of the various fields. We apply the averaging process to the set of local equations. We then have

### Mass conservation

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_k f_k) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho_k f_k U_{kj}) = \rho_k W_k, \quad (6)$$

$$\text{with } W_k = \langle w_k \delta_k \rangle = - \langle (u_{kj} - v_j) n_{kj} \delta_k \rangle, \quad (7)$$

### Solute conservation

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_k C_k) + \frac{\partial}{\partial x_j} (f_k U_{kj} C_k) = \quad (8)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left( f_k D_k \frac{\partial C_k}{\partial x_j} + \langle X_k D_k \frac{\partial c_k'}{\partial x_j} \rangle \right) - \frac{\partial}{\partial x_j} \langle X_k c_k' u_{kj}' \rangle + J_k,$$

$$\text{with } J_k = \langle j_k \delta_k \rangle = \left\langle \left( w_k c_k + D_k \frac{\partial c_k}{\partial x_j} n_{kj} \right) \delta_k \right\rangle,$$

**Momentum conservation equations for the liquid phase**

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho_l f_l U_{li}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(f_l \rho_l U_{li} U_{lj}) = & \quad (9) \\ - f_l \frac{\partial P_l^*}{\partial x_i} + f_l F_{ti} + \frac{\partial}{\partial x_j}(f_l \Sigma_{lij} + f_l R_{lij}) + Q_{li} \end{aligned}$$

where

$$Q_{li} = \langle \{ \rho_l w_l u_{li} - \sigma_{lij} n_{lj} \} \delta_l \rangle \text{ is the interaction term between the two phases,} \quad (10)$$

$\sigma_{lij}$  is the viscous stress tensor,

$f_l R_{lij} = - \langle X_l \rho_l u'_{li} u'_{lj} \rangle$  is the liquid Reynolds stress,

$P_l^* = P_l + \rho_l g z$  is the total liquid pressure,  $g$  being the gravity,

and  $F_{ti} = \rho_l (\beta T + \chi C_l) g_i + F_i$  is the total body forces.

The term  $Q_{ki}$  denotes the interaction forces between the liquid and the solid phases. It includes :

- the momentum transfers between phases,
- the pressure forces acting on the liquid phase,
- the viscous stresses on the solid walls.

**Energy equation**

$$\begin{aligned} \left( \sum_{k=l,s} f_k \rho_k c_{pk} \right) \frac{\partial T}{\partial t} + \left( \sum_{k=l,s} f_k \rho_k C_{pk} U_{kj} \right) \frac{\partial T}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \sum_{k=l,s} f_k \lambda_k \frac{\partial T}{\partial x_j} + \langle \sum_{k=l,s} X_k \lambda_k \frac{\partial \theta'}{\partial x_j} \rangle \right) \\ - \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \sum_{k=l,s} c_{pk} X_k \rho_k \theta' u'_{kj} \rangle + \sum_{k=l,s} \rho_k W_k \{ C_{pk} (\theta_L - T) - h_{0k} \}, \end{aligned} \quad (11)$$

$\theta'$  and  $\theta_L$  respectively being the temperature fluctuation and the liquidus temperature.

The quantities  $W_k$ ,  $J_k$ , and  $Q_{ki}$  satisfies the following properties :

$$\rho_s W_s + \rho_l W_l = 0, \quad J_l + J_s = 0, \quad Q_{li} + Q_{si} = 0. \quad (12)$$

## 2.2 THE EQUATION GOVERNING THE SOLID PARTICLE MOTION

In the region where the liquid phase is dominant, it is convenient to use an approach based on a kinetic theory of granular media <sup>5,6,7</sup>. We introduce a probability density function  $n(\xi, l, \mathbf{x}, t)$  where  $n dv d\xi$  represents the probable number of particles of volume  $v$  and velocity vector  $\xi$  per unit of volume. From such probability density the statistical average  $\langle \psi \rangle$  of any quantity  $\psi$  will be defined as follows

$$\langle \psi \rangle \equiv \Psi = \int \psi n v d\xi dv / f_s, \quad (13)$$

where the volume fraction  $f_s$  is

$$f_s = \int n v d\xi dv. \quad (14)$$

We may then introduce various mean quantities such as :the total number of particles  $N$  per unit of volume which is obtained for  $\psi=1/v$

$$N = \int n d\xi dv, \quad (15)$$

for  $\psi = \xi_i$  we obtain the particle mean velocity  $U_{si}$  which may be identified with the mean velocity defined already in the statistical phase average procedure (2) and (3)

$$U_{si} = \int \xi_i n v d\xi dv / f_s. \quad (16)$$

It is possible to derive a Boltzmann-type equation governing the function  $n$  in a general manner as

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\xi_i n) = \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left( \left\{ \frac{d\xi_i}{dt} \right\} n \right) + \frac{\partial}{\partial v} \left( \left\{ \frac{dv}{dt} \right\} n \right) + s(n, T), \quad (17)$$

where  $\left\{ \frac{d}{dt} \right\}$  denotes the conditional expectation regarding the rate of change measured along the

particle path of any particle property and  $s$  is a source term which encompasses the germination of grains and the collision-coalescence between particles. Note the equation (17) may also be extended to

include other properties such as its solute concentration or its temperature. The average equation governing any mean quantity  $\langle \psi \rangle$  may then be deduced from (17). Splitting the particle velocity into its mean part and its fluctuation, we have

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho_s f_s \Psi) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho_s f_s U_{si} \Psi) = f_s \left\langle \frac{d\xi_i}{dt} \frac{\partial \psi}{\partial \xi_i} \right\rangle + \rho_s f_s \left\langle \frac{dv}{dt} \left( \frac{\partial \psi}{\partial v} + \frac{\psi}{v} \right) \right\rangle \\ + \rho_s S_\psi(\psi, n, T) - \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho_s f_s \langle u'_{si} \psi \rangle), \end{aligned} \quad (18)$$

The acceleration of any particle is caused by the hydrodynamic and body forces acting on it. This may be written in a simplified way as <sup>7</sup>

$$\rho_s \frac{d\xi_i}{dt} = \rho_s v_{ri} / \tau_D + (\rho_l - \rho_s) g_i - \frac{\partial P_l^*}{\partial x_i}, \quad (19.a)$$

$v_{ri} = u_{li} - \xi_i$  being the local relative velocity between the two phases and  $\tau_D$  a typical drag time which may depend on  $v_{ri}$ . That typical time will be defined later. Concerning the growth rate of a single particle we may write

$$\rho_s \frac{dv}{dt} = Sh_l \frac{D_l}{l} (c_{le} - c_l) \sigma, \quad \text{with} \quad l = \left( \frac{v}{\beta} \right)^{1/3}, \quad (19.b)$$

$Sh_l$  being the Sherwood number associated with the particle mass transfer,  $l$  the particle dimension related to its volume  $v$  via a shape factor  $\beta$  depending on the geometrical form of the grains and  $c_{le}$  is the equilibrium liquid concentration corresponding to the local temperature and  $\sigma$  is the transfer area around the particle. The Sherwood number may depend on  $(c_{le} - c_l)$  as well as the grain Peclet number involving the relative velocity between the two phases, the particle rotation and the tip velocity <sup>3</sup>. In dominant convection problems, the Sherwood number may be estimated by various available theories <sup>9</sup>. For  $\psi = 1$  we find the mass conservation equation (6) governing the solid phase with the definition

$$\rho_s W_s = f_s \left\langle Sh_l \frac{D_l}{l} (c_{le} - c_l) \frac{\sigma}{v} \right\rangle. \quad (20)$$



The motion equation for the granular phase is obtained in the same way setting  $\psi = \xi_i$  in equation (18) as well as (19)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho_s f_s U_{si}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho_s f_s U_{si} U_{sj}) = & -f_s \frac{\partial P_l^*}{\partial x_i} + f_s(\rho_l - \rho_s) g_i + \rho_s f_s \left\langle \frac{v_{ri}}{\tau_D} \right\rangle \\ & + \rho_s S_{ci}(\xi_i, n, T) + \frac{\partial}{\partial x_j}(f_s R_{sij}), \end{aligned} \quad (21)$$

with  $R_{sij} = -\rho_s \langle u'_{si} u'_{sj} \rangle$  denotes the particle Reynolds stress tensor.  $S_{ci}$  encompasses two mechanisms. First it includes the momentum transfer due to the kinetic growth of the particle. That contribution to the momentum generally is negligible as compared with that involving the drag force. Second,  $S_{ci}$  takes into account the collision phenomena between particles. The importance of the latter mechanism will be discussed later.

The equation governing the total local number of particles per unit of volume  $N$  is obtained from (18) by setting  $\psi = 1/v$ . Its expression is

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_s f_s N) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho_s f_s U_{si} N) = \rho_s S_N - \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho_s f_s \langle u'_{si} / v \rangle) \quad (22)$$

In (22) the source term  $S_N$  encompasses the germination rate of grains which depends on the local temperature.

### 3. The closure problem in the liquid phase

#### 3.1 COUPLING BETWEEN THE LIQUID AND SOLID PHASES

Formally, the coupling term is represented in (9) by the vector  $Q_{li}$  or, equivalently,  $Q_{si}$ . The coupling between the liquid and the solid phases obviously is a very complex phenomenon. The difficulty comes from the fact that the solid fraction may be either small or large. Moreover, the geometrical topology of the solid phase may be very different. It may consist of a dispersed phase in the beginning of the casting. It may also be a skeleton of coalesced dendrites or sedimented particles near the mushy zone. It is noteworthy that the coupling term may be identified with the drag term in the R.H.S. of (21) in a first approximation :

$$Q_{si} \approx \rho_s f_s \left\langle \frac{v_{ri}}{\tau_D} \right\rangle \approx \rho_s f_s \frac{(U_{li} - U_{si})}{\tau_D}. \quad (23)$$

The characteristic drag time is related to the relaxation time needed for the particle to behave like a fluid particle. It depends both on the solid fraction, especially in the sedimentation zone, and the Reynolds number  $Re_p$  of the grain, whose definition is :

$$Re_p = \frac{f_s v_r \bar{l}}{\nu},$$

where  $v_r$  is the "relative" mean velocity modulus and  $\bar{l}$  the average size of the solid particles. The average particle size  $\bar{l}$  may be approximately related to the local solid fraction by

$$\bar{l} = \left( \frac{f_s}{N\beta} \right)^{1/3}. \quad (24)$$

It must be stressed that the value of the grain Reynolds number generally is small. For  $\bar{l} = 100 \mu\text{m}$ ,  $v_r = 10^{-3} \text{ m/s}$  and  $\nu = 0.5 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ , the value of the grain Reynolds number is at most equal to 0.2. That value indicates that the liquid entrainment is predominant, and the drag force is close to a Stokes drag. Let us now introduce the characteristic viscous time  $\tau_p$  for a particle. Its definition is :

$$\tau_p = \alpha \frac{\rho_s}{\rho_l} \frac{\bar{l}^2}{\nu}, \quad (25)$$

where  $\alpha$  is a coefficient, which depends on the geometrical shape of the solid, e.g.,  $\alpha = \frac{1}{18}$  for a spherical particle. An estimate of the relative velocity may be obtained from the sedimentation velocity  $V_s$

$$V_s = \frac{(\rho_s - \rho_l)}{\rho_s} g \tau_p. \quad (26)$$

For steel applications the numerical values of  $\tau_p$  and  $V_s$  respectively are  $10^{-3} \text{ s}$  and  $2.7 \cdot 10^{-4} \text{ m/s}$ . Accordingly, the Stokes number  $St$  has the following order of magnitude

$$St = \frac{V_s \tau_p}{\bar{l}} \approx 2.7 \cdot 10^{-3}.$$

We recall that  $St$  represents the ratio between the response time of the particle motion and the typical fluid characteristic time. The small value of the Stokes number confirms that the entrainment of the particles by the fluid motion is the dominant mechanism. Note that the latter phenomenon also implies that the collision effects may not be very important. We may relate  $\tau_D$  to the viscous time  $\tau_p$  in the following way :

$$\frac{\tau_p}{\tau_D} = \Gamma_D(Re_p, f_s), \quad (27)$$

$\Gamma_D$  being a dimensionless coefficient, which accounts for both the viscous drag as well as the particle interactions in the regions where the particle density becomes important. That coefficient may be estimated for example by the following correlations introduced in fluidized bed problems where the interaction of particles are important , e.g., <sup>7</sup>

$$\Gamma_D = (1 - f_s)^{-2.7} \text{ for } f_s < 0.2 \text{ and } \Gamma_D = 150 \alpha \frac{f_s}{f_l} \text{ for } f_s > 0.2 . \quad (28)$$

For  $f_s > 0.2$  the empirical correlation is consistent with the Carman-Kozeny law relative to the permeability in the mushy zone..

### 3.2 THE REYNOLDS STRESS TENSORS

As for the particle Reynolds stress tensor, it may be simply related to the fluid Reynolds stress tensor

$$R_{sij} \approx \frac{\rho_s}{\rho_l} R_{lij} . \quad (29)$$

That simplification may be justified by the fact that the Stokes number is very small. Then, except for clusters the solid particles behave like fluid particles in a first approximation. Hence, the particle velocity fluctuations are closely correlated to the fluid fluctuations.

### 3.3 THE TURBULENT DIFFUSIVITIES

The quadratic moments involving the velocity fluctuations which appear in the previous equations, express the effects of the turbulent fluctuations on the mean fields. From a physical point of view, they create a sort of an additional diffusivity. Therefore, following Boussinesq' hypothesis we introduce turbulent diffusivities both for the mean motions, the solute concentration and the temperature fields.

As for the momentum equations, we introduce the turbulent viscosity concept, and the fluid Reynolds stress tensor may be related to the deformation rate tensor as follows :

$$f_l R_{lij} \equiv -\rho_l \langle X_l u'_{li} u'_{lj} \rangle = -\frac{2}{3} \rho_l k_l f_l \delta_{ij} + 2f_l \mu_t (E_{lij} - \frac{1}{3} E_{lmn} \delta_{ij}), \quad (30)$$

$k_l$  being the turbulent kinetic energy of the liquid phase. The liquid turbulent viscosity  $\mu_t$  may be calculated for example by means of a classical  $k_l - \varepsilon$  model. The other quadratic moments may be estimated using the classical turbulent diffusivity closure :

$$-\langle X_k c'_k u'_{kj} \rangle = D_t f_k \frac{\partial C_k}{\partial x_j} \quad \text{and} \quad -\rho_k \langle X_k h'_k u'_{kj} \rangle = \lambda_t f_k \frac{\partial T}{\partial x_j}. \quad (31)$$

Introducing the turbulent Schmidt numbers  $\sigma_c$  and  $\sigma_T$  respectively for the thermal and chemical turbulent diffusivities, we express the turbulent diffusivities from the turbulent kinematic viscosity in the following manner :

$$D_t = \frac{\nu_t}{\sigma_c} \quad \text{and} \quad \lambda_t = \frac{\nu_t}{\sigma_T}, \quad (32)$$

$\sigma_c$  and  $\sigma_T$  being empirical constants, whose values are of order of unity.

### 3.4 Growth rate of the particles

The growth rate  $W_k$  is formally given by (7) or (20). Its determination requires the knowledge of the probability density function. Estimates of that term has already been derived by Wang and Beckermann<sup>3</sup>. Since  $W_k$  is related to kinetic growth of the grains, one may introduce a mass transfer coefficient<sup>8</sup> or, equivalently, an overall Sherwood number  $\overline{Sh}$  such that

$$\rho_s W_s = \overline{Sh} D_l \bar{l} N (C_{le} - C_l), \quad (33)$$

the total number of particles  $N$  per unit of volume being governed by (22).

#### 4. Conclusions

We have proposed a statistical approach to handle the solidification process. That approach is globally very similar to the volume averaging process especially in the mush region. The interest of such an approach is however more obvious in the liquid region where equiaxed solidification takes place. When the liquid motion is no longer laminar, the statistical approach may naturally cope with the turbulence of the flow as well as the turbulent motion of the particles. The present paper has presented the general method. The next step is to derive more precise expressions for the overall growth rate as well as the dispersive flux.

#### References

1. Ganesan, S. & Poirier, D. (1990) "Conservation of mass and momentum for the flow of interdendritic liquid during solidification," *Metallurgical Trans. B*, **21B**, 173-181.
2. Wang, C. & Beckermann, C. (1993) "Multiphase solute diffusion model for dendritic alloy solidification," *Metallurgical Trans. A*, **24A**, 2787-2802.
3. Wang, C. & Beckermann, C. (1996) "Equiaxed dendritic solidification with convection : Part I. Multiscale/multiphase modeling," *Metallurgical Trans. A*, **27A**, 2754-2764.
4. Ahmad, N., Combeau, H., Desbiolles, J., Jalanti, T., Lesoult, G. Rappaz, M. & Stomp, C., (1998) "Numerical simulation of macrosegregation : a comparison between finite volume method and finite element method," *Metallurgical and Materials Trans. A*, **29A**, 617-630.
5. Morioka, S. & Nakajima, T. (1987) "Modeling of Gas and Solid Particle Two-Phase Flow and Application to Fluidized Bed," *Journal de Mécanique Théorique et Appliquée*, **6**, 77-88.
6. Ding, J. & Gidaspow, D. (1990) "A bubbling fluidization model using kinetic theory of granular flow", *AIChE Journal*, **36** (4), 523-538.
7. Balzer, G., Boelle, A. & Simonin, O. (1995) "Eulerian gas-solid flow modelling of dense fluidized bed," *Proc. ISEF Fluidization VIII*, 1125-1135.
8. Bousquet-Melou, P. (2000) "Modélisation macroscopique et simulation numérique de la solidification des mélanges binaires," Doctorate thesis, Paris 6 University, December 11<sup>th</sup>.
9. Batchelor, G.K. (1980) "Mass transfer from small particles suspended in turbulent fluid", *J. Fluid Mech.*, **98**, 609-623.

## Annexe C

# Présentation succincte du code SOLID

## Le code SOLID.

Le logiciel SOLID est développé par le Laboratoire de Science et Génie des Matériaux Métalliques (LSG2M) de l'Ecole des Mines de Nancy. Il s'agit d'un code de simulation de solidification d'alliages métalliques. Les grandeurs calculées sont les suivantes :

- $\langle H \rangle$  enthalpie volumétrique moyenne.
- $T$  température.
- $\langle v \rangle$  vitesse superficielle moyenne de la phase liquide.
- $p$  pression.
- $\langle w \rangle$  fraction moyenne de soluté massique.
- $w^l$  fraction de masse liquide de soluté.
- $g_s$  fraction volumétrique liquide.

Ces variables sont similaires à celles calculées par le logiciel FHP à l'exception près de la pression et de l'enthalpie volumétrique moyenne qui sont ici des inconnues principales.

Les équations gérées par ce code sont les suivantes :

- Conservation de la masse,
- Conservation de la quantité de mouvement où la pression est traitée comme inconnue principale,
- Conservation de l'énergie avec une écriture enthalpique,
- Conservation du soluté (sans terme de diffusion chimique),
- Relation  $(T, w^l)$  par équation du liquidus,
- Relation  $(\langle w \rangle, g_l, w^l)$ , sans diffusion dans le solide et avec refusion,
- Relation  $(\langle H \rangle, T, g_l)$  à l'aide de l'équilibre thermodynamique du diagramme de phases.

A défaut d'être totalement identiques à celles du code FHP, elles en restent très proches, et ceci dans la même approximation de grandeur moyennée sur la maille (cf. Ahmad et al. [1]). En revanche, le traitement numérique n'est pas le même. Dans le code SOLID, le traitement se fait par volumes finis, les valeurs étant calculées au centre de la maille, la résolution se faisant par décentrage amont grâce à la méthode « power law ». La discrétisation temporelle est traitée de manière implicite. Au niveau de l'algorithme de SOLID, il y a itération, à l'intérieur d'un même pas de temps, de toutes les équations et ceci jusqu'à convergence.

## Annexe D

# Protocole de radiographie



## Atténuation Etain et Bismuth.

Sélectionner - Attenuel

Auto

ATTENUATION ECRAN - Version 2.1

Ecran: Sn  
Densité: 7.31  
Epaisseur(cm): 1

Energie(keU)	Coeff Absorption(cm2.g-1)	Epaisseur moitié(mm)	Transmission(I/Io)
100	1.6800	0.5644	4.64E-06
110	1.3235	0.7165	6.29E-05
120	1.0645	0.8908	4.17E-04
150	0.6090	1.5570	0.012
160	0.5293	1.7913	0.021
170	0.4640	2.0435	0.034
180	0.4098	2.3136	0.050
200	0.3260	2.9086	0.092
210	0.3001	3.1593	0.111
220	0.2774	3.4184	0.132
230	0.2573	3.6859	0.153
250	0.2234	4.2452	0.195
270	0.1961	4.8365	0.239
280	0.1843	5.1439	0.260
300	0.1640	5.7818	0.302

F1 - Copie Imprimante ENTREE (ou F10) - suite

Sélectionner - Attenuel

Auto

ATTENUATION ECRAN - Version 2.1

Ecran: Bi  
Densité: 9.747  
Epaisseur(cm): 1

Energie(keU)	Coeff Absorption(cm2.g-1)	Epaisseur moitié(mm)	Transmission(I/Io)
100	5.7400	0.1239	5.04E-25
110	4.5215	0.1573	7.25E-20
120	3.6365	0.1956	4.04E-16
150	2.0800	0.3419	1.57E-09
160	1.7766	0.4003	3.02E-08
170	1.5320	0.4642	3.27E-07
180	1.3324	0.5337	2.29E-06
200	1.0300	0.6904	4.36E-05
210	0.9235	0.7700	1.23E-04
220	0.8323	0.8544	3.00E-04
230	0.7536	0.9437	6.46E-04
250	0.6254	1.1371	2.25E-03
270	0.5265	1.3507	5.91E-03
280	0.4854	1.4651	8.82E-03
300	0.4160	1.7095	0.017

F1 - Copie Imprimante ENTREE (ou F10) - suite

## Atténuation SnBi 10 % wt.

Sélectionner - Attenuel

Auto

ATTENUATION ECRAN - Version 2.1

Ecran: Sn Bi  
 Sn(90.00%) Bi(10.00%)  
 Densité: 7.53  
 Epaisseur(cm): 1

Energie(keU)	Coeff Absorption(cm2.g-1)	Epaisseur moitié(mm)	Transmission(I/Io)
100	2.0860	0.4413	1.51E-07
110	1.6433	0.5602	4.23E-06
120	1.3217	0.6965	4.76E-05
150	0.7561	1.2175	3.37E-03
160	0.6541	1.4074	7.26E-03
170	0.5708	1.6126	0.014
180	0.5021	1.8334	0.023
200	0.3964	2.3222	0.051
210	0.3625	2.5395	0.065
220	0.3329	2.7653	0.082
230	0.3069	2.9995	0.099
250	0.2636	3.4926	0.137
270	0.2291	4.0180	0.178
280	0.2144	4.2926	0.199
300	0.1892	4.8653	0.241

F1 - Copie Imprimante ENTREE (ou F10) - suite

