

Benchmark sur la simulation des macroségrégations lors de la solidification d'un alliage : première synthèse

Hervé COMBEAU^{1*}, Michel BELLET², Yves FAUTRELLE³, Dominique GOBIN⁴, Mohamed RADY⁵, Eric ARQUIS⁵, Olga BUDENKOVA³, Bernard DUSSOUBS¹, Yves Du TERRAIL³, Arvind KUMAR¹, Charles-André GANDIN², Benoît GOYEAU⁶, Salem MOSBAH¹, Miha ZALOZNIK¹

¹ Institut Jean Lamour - CNRS – Nancy-Université – UPV-Metz, 54042 Nancy cedex, France

² CEMEF - CNRS – Mines-ParisTech, 06904 Sophia Antipolis cedex, France

³ SIMAP - CNRS – INPG – Université Joseph Fourier, 38402 St Martin d'Hères cedex, France

⁴ FAST - CNRS – Université Pierre et Marie Curie, 91405 Orsay cedex, France

⁵ TREFLE - CNRS – Université de Bordeaux – Arts et Métiers ParisTech – ENSCPB, 33607 Pessac cedex, France

⁶ EM2C - CNRS – Ecole Centrale Paris, 92295 Châtenay-Malabry, France

* (auteur correspondant : herve.combeau@mines.inpl-nancy.fr)

Résumé - Les macroségrégations sont des hétérogénéités de composition se développant à l'échelle d'un produit pendant l'étape de solidification. Leur prédiction présente un certain nombre de difficultés d'ordre numérique. Dans le cadre d'un projet ANR blanc SMACS, un benchmark a été organisé. Cette communication a pour objectif de présenter les premiers résultats de comparaison pour un des deux cas retenus pour la partie solidification de ce benchmark.

Nomenclature

$\langle h \rangle$	enthalpie massique moyenne, $J. kg^{-1}$	k_0	coefficient de partage du soluté
T	température, K	<i>Symboles grecs</i>	
C_p	chaleur spécifique, $J.kg^{-1}.K^{-1}$	β_T	coefficient d'expansion thermique, K^{-1}
V	vitesse moyenne débitante de la phase liquide, $m.s^{-1}$	β_C	coefficient d'expansion solutal, ($\% massique$) ⁻¹
k	conductivité thermique, $W.m^{-1}.K^{-1}$	μ	viscosité dynamique, $Pa.s$
g_α	fraction volumique de la phase $\alpha=1$ ou s	ρ	masse volumique, $kg. m^{-3}$
g	accélération de la pesanteur, $m.s^{-2}$	<i>Indices et exposants</i>	
K	perméabilité, m^2	l	phase liquide
$\langle C \rangle$	titre massique moyen en soluté	s	phase solide
C_l	titre massique moyen en soluté de la phase liquide		

1. Introduction

Dans la filière d'élaboration de produits métallurgiques, l'étape de solidification entraîne la formation d'hétérogénéités de composition (macroségrégations) et de structure à l'échelle du produit. La réduction de ces défauts est un enjeu important pour l'industrie car ils altèrent la qualité des propriétés finales des produits. La simulation numérique est un outil précieux pour progresser dans cette voie. Cependant, les codes de calcul ne sont pas encore totalement prédictifs. Plusieurs raisons sont liées à cela. Les macroségrégations sont engendrées par des mouvements relatifs des phases solide et liquide. Les mouvements de convection naturelle

thermique ou solutale sont difficiles à simuler avec une bonne précision pour les métaux liquides du fait de la faible valeur du nombre de Prandtl ($\sim 0,01$) d'une part et des grandes valeurs du nombre de Lewis d'autre part ($\sim 10^4$). Certaines grandeurs comme la loi de perméabilité présentes dans ces modèles sont encore mal connues.

Le projet SMACS du Programme blanc de l'ANR a démarré en 2007 sur le thème de la prédiction des macroségrégations. Le but de ce projet est d'une part de comparer les prévisions des codes de calcul sur des cas de référence en convection naturelle et en solidification. D'autre part, il s'agit de simuler des expériences réalisées au SIMAP dans le cadre du projet, afin de caractériser l'aspect prédictif des modèles existants.

La présente communication a pour but de présenter une partie des résultats obtenus dans le projet SMACS. Les résultats rapportés sont relatifs à la partie 'benchmark' du projet et plus particulièrement à une comparaison de simulations réalisées par chaque partenaire du projet (SIMAP, IJL, CEMEF, TREFLE/FAST/EM2C) sur un cas de référence de solidification d'un alliage Pb-18%Sn.

2. Présentation d'un des deux cas tests du benchmark en solidification

Il s'agit de simuler la solidification d'un alliage Pb-18%Sn dans une cavité rectangulaire de 0,1 m de large et 0,06 m de haut. Les parois supérieure et inférieure sont supposées adiabatiques, tandis que les deux parois verticales sont refroidies. Une condition de type Fourier identique pour les deux côtés est imposée. Pour l'écoulement, une condition de non glissement est imposée sur tous les bords du domaine. Du fait de la symétrie de la géométrie et des conditions aux limites et en supposant de plus la symétrie de la solution, seule une moitié du domaine a été considérée. A l'instant initial, l'alliage est supposé au repos (vitesse nulle) à la température de liquidus correspondant à sa composition nominale soit $285,5\text{ }^\circ\text{C}$ dans ce cas. La géométrie du domaine, les conditions aux limites ainsi que la localisation des sorties sont indiquées sur la figure 1.

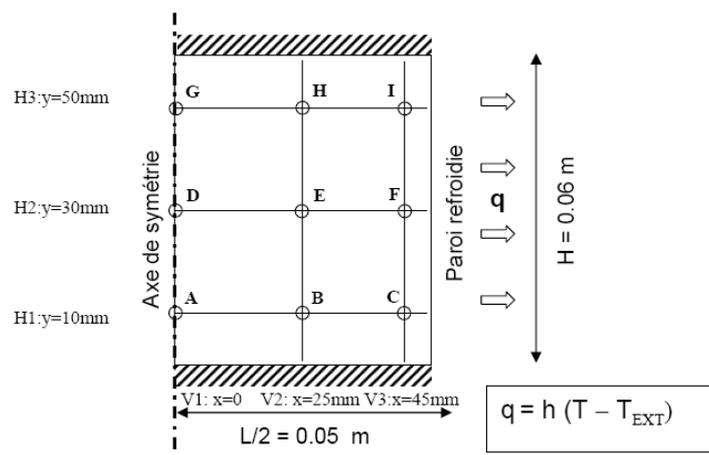


Figure 1 : Schéma du domaine correspondant au cas test de solidification, (conditions aux limites et positions des profils et des points pour les sorties).

Le modèle décrivant la solidification a été fixé, chaque partenaire s'est assuré de résoudre le même système d'équations. Les équations traduisant la conservation de l'énergie, de la masse totale, de la quantité de mouvement et de la masse de soluté ont été établies à partir de la méthode de prise de moyenne volumique. En reprenant l'ordre d'énumération précédent ces équations s'écrivent sous la forme :

$$\rho \frac{\partial \langle h \rangle}{\partial t} + \rho c_p \nabla T \cdot \mathbf{V} - \nabla \cdot (k \nabla T) = 0 \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = 0 \quad (2)$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + \frac{\rho}{g_l} (\nabla \mathbf{V}) \mathbf{V} = \nabla \cdot (\mu_l \nabla \mathbf{V}) - g_l \nabla p - \frac{\mu_l g_l}{K} \mathbf{V} + g_l \rho (1 - \beta_T (T - T_0) - \beta_c (C_l - C_0)) \mathbf{g} \quad (3)$$

$$\frac{\partial \langle C \rangle}{\partial t} + \nabla C_l \cdot \mathbf{V} = 0 \quad (4)$$

Le modèle de microségrégation retenu correspond à l'équilibre thermodynamique complet entre les phases liquide et solide (bras de levier) :

$$\langle C \rangle = g_l C_l + g_s C_s = (g_l + (1 - g_l) k_0) \cdot C_l \quad (5)$$

$$T = T_p + m_l C_l \quad (6)$$

L'ensemble des détails de ce cas avec toutes les données thermo-physiques et la définition des sorties peut être téléchargé sur le site : <http://www.ijl.nancy-universite.fr/benchmark-solidification/> et se trouve également dans la référence [1].

Quatre codes de calcul ont été mis en œuvre. Trois codes de calcul sont en volumes finis (V.F.) (FLUENT 6.2 (SIMAP), THETIS (TREFLE/FAST/EM2C) [2], SOLID (IJL) [3]) et un code en éléments finis (E.F.) (R2SOL (CEMEF) [4]) (voir tableau 1). Pour le SIMAP et le TREFLE, l'équation de conservation de l'énergie (1) est résolue avec la température comme inconnue principale. Pour l'IJL et le CEMEF, l'équation (1) est résolue avec l'enthalpie moyenne massique comme inconnue principale [3]. Pour l'IJL, le CEMEF et le TREFLE, l'équation de conservation de la masse de soluté (4) est résolue avec la composition moyenne comme inconnue principale en suivant le schéma proposé par V. Voller [5] pour résoudre le couplage entre les équations (1,4,5,6). Dans le cas du SIMAP, cette équation est séparée en deux parties, une pour la phase liquide et une pour la phase solide. Un schéma d'ordre 2 ou plus a été mis en œuvre pour la discrétisation des termes convectifs dans les cas du TREFLE (TVD) et le SIMAP (QUICK), l'IJL a utilisé un schéma d'ordre 1 UPWIND et le CEMEF un schéma SUPG avec stabilisation par un terme diffusif supplémentaire pour l'équation (4).

	Code de calcul	Maillage (taille moy. de maille (m))	Pas de temps (s)
IJL	SOLID V.F. (upwind)	98x118 (5,1 x 10 ⁻⁴)	5 x 10 ⁻³
SIMAP	FLUENT V.F. (QUICK)	200x240 (2,5 x 10 ⁻⁴)	5 x 10 ⁻³
CEMEF	R2SOL E.F. (SUPG)	5763 nœuds (7,14 x 10 ⁻⁴)	5 x 10 ⁻³
TREFLE	THETIS V.F. (TVD)	268x324 (1,9 x 10 ⁻⁴)	1 x 10 ⁻³

Tableau 1 : Principales caractéristiques des codes de calcul, taille de maillage et pas de temps utilisés pour les résultats présentés dans cette communication.

Dans le tableau 1, les caractéristiques des maillages et les pas de temps utilisés pour les résultats présentés dans cette communication sont reportés. Une étude de sensibilité au maillage et au pas de temps a été menée par chaque partenaire. Il ressort pour les quatre codes de calcul une même sensibilité de la composition moyenne maximale en fin de solidification

à la finesse du maillage. Cette grandeur tend vers la composition maximale possible : la composition du liquide à l'eutectique, avec un ordre de convergence inférieur à 1.

3. Description du déroulement de la solidification

Les résultats obtenus par le SIMAP sont présentés dans cette section pour décrire le déroulement de la solidification. Le temps total de solidification est de l'ordre de 600 secondes. A partir des champs de température, de fraction liquide et de vitesse au temps 120 secondes rapportés sur la figure 2, on observe des isothermes quasi-verticales dans la région où la fraction liquide est inférieure à 0,8, et une stratification thermique dans la partie centrale où la fraction liquide est plus grande. Une boucle principale de convection du liquide est visible avec un sens de rotation antihoraire. Le liquide s'enrichissant progressivement en étain pendant la solidification, sa densité diminue. Cet effet est dominant par rapport à l'effet thermique, ce qui explique le sens de rotation obtenu. Dans les zones de plus faible fraction liquide, on note la présence de canaux au sein desquels la fraction liquide est localement plus importante. Ces canaux par leur plus grande perméabilité constituent un passage privilégié pour le fluide. On note que le champ de température n'est pas perturbé par la présence de ces canaux. Leur formation est liée au couplage fort entre les phénomènes de transfert de chaleur, de masse et de quantité de mouvement.

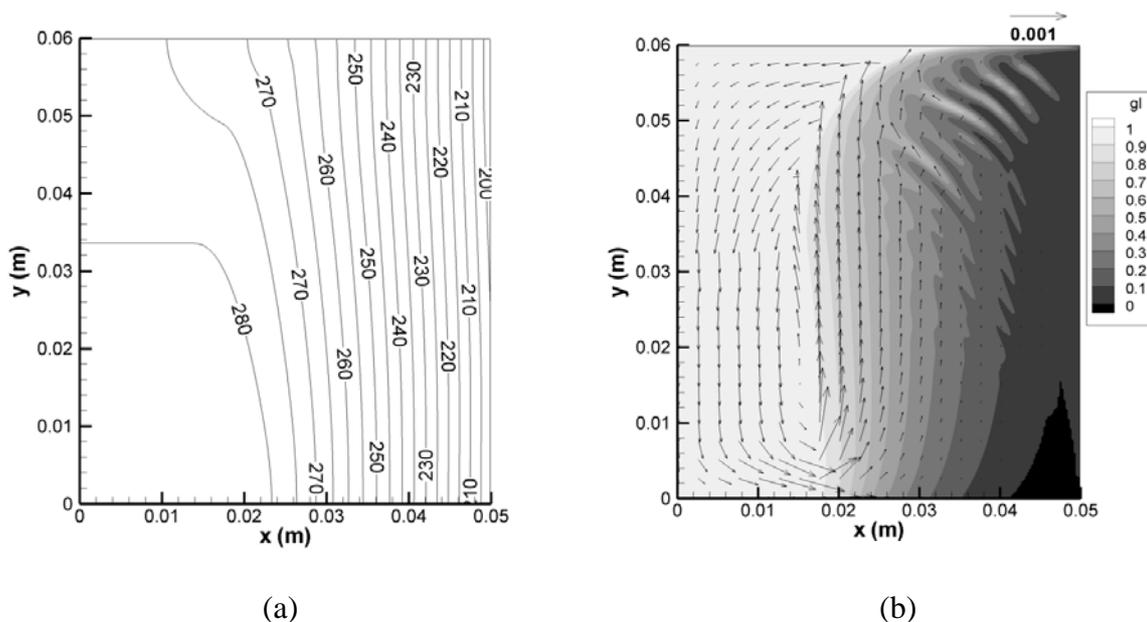


Figure 2 : (a) champ de température, (b) champs de vitesse (vecteurs, l'échelle est indiquée par la flèche en haut à droite en $m s^{-1}$) et de fraction liquide (échelle des gris) au temps 120 s

4. Comparaison et analyse des résultats obtenus par l'ensemble des partenaires

La carte finale de composition moyenne relative en étain obtenue par le SIMAP est présentée figure 3.a. La région du coin supérieur gauche de la demi cavité se solidifiant en dernier est ségrégée positivement, tandis que la partie inférieure est ségrégée négativement. Une ségrégation positive apparaît également dans les canaux associée avec une ségrégation négative à leur périphérie. Sur la figure 3.b, les profils horizontaux H1 et H2 (voir la localisation figure 1) de composition moyenne finale en étain obtenus par l'ensemble des partenaires sont présentés. Pour le profil suivant H1, les résultats des quatre codes de calcul

sont identiques. Suivant H2, il en est de même pour la macroségrégation, mais on note des fluctuations par rapport à la valeur moyenne locale dans la zone de formation des canaux.

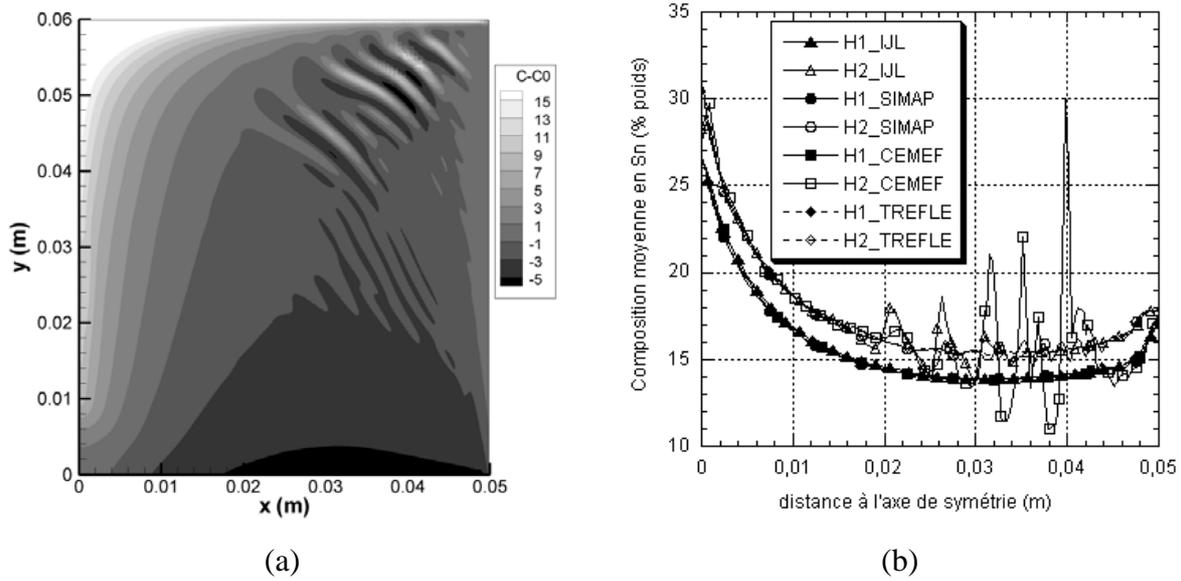


Figure 4 : En fin de solidification : (a) Carte de composition moyenne relative (diminuée de la composition initiale) en Sn (% masique), (b) Profils de composition moyenne en Sn (% massique) le long des horizontales H1 et H2.

Ainsi, ces résultats confirment ceux de la référence [3] où un premier exercice de comparaison avait été conduit entre deux codes de calcul : en termes de macroségrégation les résultats sont similaires, les principales différences sont observées au niveau des canaux ségrégués. Il est intéressant de remarquer que malgré la nature hyperbolique de l'équation (4), l'ordre de précision pour la discrétisation des termes convectifs ne change pas la prédiction des macroségrégations. Une explication à cela peut résider dans le fait que la température initiale de l'alliage a été prise égale à la température de liquidus et que de fait le domaine est rapidement entièrement pâteux. Dans ce cas, dans tout le domaine, l'équation (4), en utilisant les relations (1) et (6) peut se mettre sous la forme :

$$\frac{\partial \langle C \rangle}{\partial t} = \frac{1}{m_l c_p} \frac{\partial \langle h \rangle}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\frac{k}{m_l \rho \cdot c_p} \nabla T \right) \quad (7)$$

L'équation (7) ne contient plus de terme convectif. Ainsi le caractère hyperbolique de l'équation (4) ne conduira à une sensibilité au schéma que si une zone est entièrement liquide.

Sur la figure 5, les profils horizontaux suivant H2 à mi-hauteur de la cavité (figure 1) de la fraction liquide et de la norme de la vitesse intrinsèque du liquide sont représentés au temps 120 secondes. Les allures des courbes sont similaires pour les quatre simulations. De même, les profils de température non représentés dans cette communication sont superposables. Les différences les plus fortes sont observables au niveau des canaux qui correspondent à des fluctuations locales de fraction liquide sur le profil de la figure 5.a. A cet instant et cette altitude, le SIMAP obtient des canaux à partir de la paroi droite dont l'écartement augmente en s'éloignant de cette paroi. Pour l'IJL, le nombre de canaux à cette altitude est plus faible, ils démarrent plus loin de la paroi, mais la fraction liquide est plus importante dans les canaux. Le CEMEF obtient également des canaux avec une forte amplitude de variation de la fraction liquide. Le TREFLE ne prédit pas de canaux à cette altitude. Il est intéressant de remarquer malgré les différences au niveau de la prédiction des canaux qu'il semble exister des similarités au niveau des distances entre canaux. De même, les fluctuations de la norme

de la vitesse intrinsèque de la phase liquide sont corrélées avec les fluctuations de la fraction liquide. Pour le CEMEF et l'IJL, pour lesquels les fluctuations de fraction liquide sont les plus importantes au niveau des canaux, on note sur la figure 5.b que la vitesse du liquide varie de façon similaire dans la partie des plus fortes fractions liquides, alors qu'elle est pratiquement uniforme pour le SIMAP et le TREFLE. Cette différence peut être en relation avec les canaux.

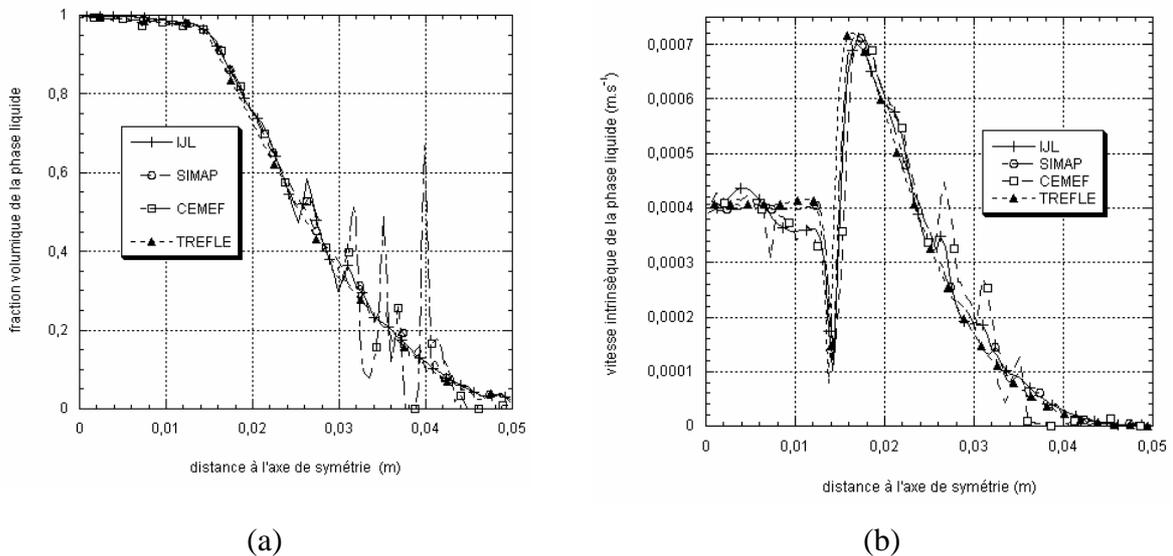


Figure 5 : Profils au temps 120 secondes suivant l'horizontale H2 (voir figure 1), (a) fraction liquide, (b) vitesse intrinsèque de la phase liquide.

5. Conclusion

Cette présentation concerne la première étape de l'exercice de comparaison proposé. Une analyse plus fine des résultats obtenus par les partenaires est en cours pour ce cas-test et pour une autre configuration avec un alliage Sn-10%Pb. En particulier, la présence de canaux ségrégués nécessite de mettre en place une démarche spécifique.

Références

- [1] Thétis, 2009, code de mécanique de fluides, <http://thetis.enscpb.fr/>
- [2] M. Bellet et col., Call for contributions to a numerical benchmark problem for 2D columnar solidification of binary alloys, *International Journal of Thermal Sciences*, 48 (11), 2013-2016.
- [3] N. Ahmad, H. Combeau, J.-L. Desbiolles, T. Jalanti, G. Lesoult, J. Rappaz, M. Rappaz and C. Stomp, Numerical simulation of macrosegregation: a comparison between finite volume method and finite element method predictions and a confrontation with experiments, *Metall. Mater. Trans.*, 29A, 1998, 617-630.
- [4] W. Liu, Finite element modelling of macrosegregation and thermomechanical phenomena in solidification processes, *Thèse de Doctorat*, Mines-ParisTech (2005)
- [5] Voller V.R., Brent A. and Prakash C. (1989), The Modeling of Heat, Mass and Solute Transport in Solidification Systems, *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 32, 1719-1731.

Remerciements

Cette étude a été réalisée dans le cadre du programme de recherche SMACS financé par l'ANR (ANR-07-BLAN-190).