

# Prédiction des macroségrégations dans les lingots d'acier : influence du mouvement et de la croissance des grains équiaxes

Hervé COMBEAU<sup>1\*</sup>, Miha ZALOŽNIK<sup>1</sup>, Stéphane HANS<sup>2</sup>, Pierre Emmanuel RICHY<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire de Science et Génie des Matériaux et de Métallurgie, UMR 7584, Ecole des Mines de Nancy, Parc de Saurupt – 54042 Nancy Cedex

\* (auteur correspondant : [herve.combeau@mines.inpl-nancy.fr](mailto:herve.combeau@mines.inpl-nancy.fr))

<sup>2</sup>Aubert & Duval, BP 1 – 63770 Les Ancizes

**Résumé** - Bien qu'un nombre significatif de travaux ait déjà été consacré à la prédiction des macroségrégations dans les lingots d'acier, la majorité d'entre eux considéraient la phase solide immobile. Il a été montré qu'avec cette hypothèse, il n'est pas possible de prédire les macroségrégations centrales des produits. En effet, le mouvement des grains équiaxes est généralement suspecté d'être à l'origine de ces macroségrégations. Un modèle multiphasique a été développé pour décrire l'évolution de la morphologie des cristaux équiaxes, leur mouvement et celui du liquide interdendritique. Ce modèle a été appliqué sur un lingot de 3,3 tonnes. Les cartes de macroségrégations sont présentées et comparées aux résultats expérimentaux. L'analyse des résultats a permis de mettre en évidence le rôle du mouvement des grains équiaxes sur la formation des macroségrégations au centre du produit.

## Nomenclature

$w$	concentration massique	$g_l$	fraction volumique du liquide
$w_0$	concentration massique nominale	$g_l^{bloque}$	fraction volumique du liquide de blocage
$DAS$	espacement interdendritique secondaire		

## 1. Introduction

Un des enjeux majeurs de l'industrie sidérurgique est l'élaboration de produits métallurgiques contenant un minimum de défauts et les plus homogènes possibles en termes de composition chimique. Le mode de coulée et l'étape de solidification conduisent à des hétérogénéités chimiques se développant à différentes échelles, notamment, à l'échelle du produit se développent les macroségrégations dues aux mouvements relatifs entre les phases liquide et solide.

Si un nombre important de travaux a déjà été consacré à la prédiction des macroségrégations dans les lingots d'acier [1,2], la majorité d'entre eux considéraient la phase solide immobile. Il a été montré qu'avec cette hypothèse, il n'est pas possible de prédire les macroségrégations dans la région centrale des lingots. En effet, dans cette zone, le mouvement des grains équiaxes est généralement suspecté d'être à l'origine de ces macroségrégations. Des modèles multiphasiques ont déjà été proposés dans la littérature pour la modélisation du mouvement des grains équiaxes durant la solidification [3]. Cependant, ce type de modèle a été encore peu appliqué aux lingots d'acier [4].

Un modèle multiphasique a été développé. Ce modèle est capable de décrire l'évolution de la morphologie des cristaux équiaxes et de prendre en compte leur mouvement. La circulation du liquide interdendritique lorsque les grains sont immobilisés est également prise en compte. Dans cet article, les résultats d'une campagne de caractérisation en terme de macroségrégation

et de structure de grain pour un lingot de 3,3 tonnes, coulé par la société Aubert&Duval est tout d'abord rapporté. Après avoir donné ensuite brièvement le principe du modèle, ses prédictions sont confrontées aux mesures.

## 2. Présentation du lingot de référence et des résultats de caractérisation

Un lingot de forge de 3,3 tonnes (cf. Figure 1) a été coulé en source par Aubert&Duval aux aciéries des Ancizes. Ce lingot a fait l'objet d'investigations assez complètes ce qui en fait un cas de référence très intéressant pour les calculs. La composition nominale en éléments d'alliage est indiquée dans le Tableau 1. La température de liquidus correspondant à cet alliage est de 1503°C. L'acier a été coulé avec une surchauffe de 30°C. Le temps total de solidification du lingot est de l'ordre de 1h30 minutes.

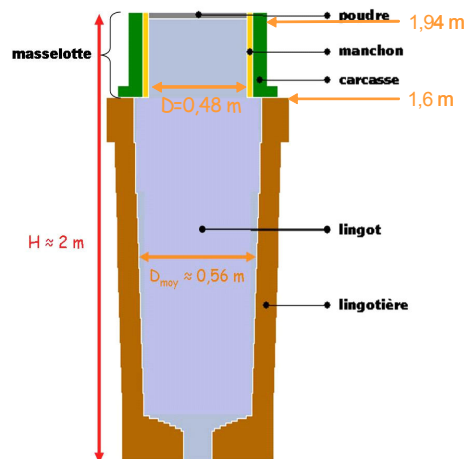


Figure 1 : Représentation des éléments du lingot de 3,3 t et dimensions.

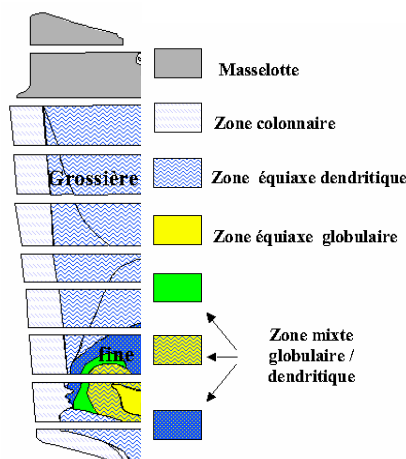


Figure 2 : Macrostructures

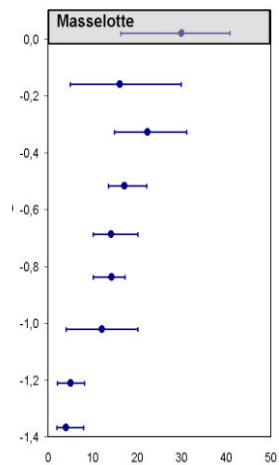


Figure 3 : absci., taille des grains (mm) ; ord. position sur l'axe (m).

Eléments d'alliage	C	Si	Mn	Ni	Cr	Mo	V
[% massique]	0.36	0.33	0.37	3.80	1.70	0.30	0.06

Tableau 1 : Composition nominale en éléments d'alliage.

Des analyses ont été menées sur une coupe axiale du lingot depuis le pied jusqu'à la masselotte comprise. Ces analyses concernaient une étude macrographique révélant des structures dendritiques de taille variable, plutôt fines en pied et de plus en plus grossières en remontant vers la tête et la masselotte (cf. Figure 2). La taille des grains (cf. Figure 3) a été mesurée par la méthode des intercepts. Elle évolue en croissant depuis le pied du lingot vers la tête. Des mesures de distances entre bras secondaires de dendrites (*DAS*) ont également été réalisées. Cette distance varie de 100 µm en pied de lingot à 800 µm en tête de lingot. Par ailleurs, des analyses de composition en éléments d'alliages (carbone et soufre) ont été effectuées. La carte de taux de ségrégation en carbone et le profil axial de la même grandeur sont présentés respectivement sur les Figures 6 et 7. Sur la carte de la Figure 6 on note une macroségrégation négative en pied de lingot. La tête du lingot est la zone du lingot la plus fortement ségrégée positivement (cf. Figure 7).

## 3. Description du modèle

Un modèle numérique 2D en volumes finis, appelé Cône2D, a été développé au LSG2M [5]. Ce modèle permet de simuler à partir d'une approche du type transferts en milieux multiphasiques les phénomènes de transport qui prennent place pendant la solidification d'un

alliage. Cette approche est basée sur une méthode de prise de moyenne spatiale des équations de transport de chaleur de masse et de quantité de mouvement sur les phases liquide et solide. Il s'agit d'un modèle du type Euler-Euler, c'est à dire que les grains ne sont pas suivis dans leur mouvement comme dans un modèle du type Euler-Lagrange, on cherche à décrire localement le comportement d'une population de grain par celui d'un grain 'moyen'. Il s'agit de prendre en compte : l'apparition de nouveaux grains (germination, fragmentation), la croissance (refusion) des grains, leur mouvement et aussi leur arrêt. Un grain est défini par une enveloppe qui englobe un squelette solide et un liquide intragranulaire (cf. Figure 4).

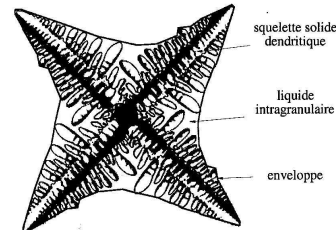


Figure 4 : Système représentatif d'un cristal équiaxe et de son enveloppe.

Lorsque, la fraction de solide interne (définie comme le rapport entre le volume de solide compris dans le grain au volume de l'enveloppe) tend vers 1, le grain est "plein", il est dit globulaire ; au contraire, lorsque la fraction de solide interne tend vers 0, le grain est qualifié de dendritique. L'évolution de l'enveloppe d'un grain est décrite par un modèle de croissance de pointes dendritiques lorsque le grain est dendritique. Un modèle d'évolution de phases solide et liquide présentes à l'intérieur de l'enveloppe complète le modèle d'évolution (croissance/refusion) d'un grain. Il est ainsi possible de décrire l'évolution de la morphologie des cristaux équiaxes. Leur mouvement est pris en compte à partir d'un bilan de quantité de mouvement sur la phase solide. Localement les phases solide et liquide possèdent des vitesses différentes. En particulier la phase solide ayant une densité plus forte, les grains auront tendance à sédimenter si leur taille est importante et à être entraînés par le liquide dans le cas contraire. Une condition d'arrêt pour le mouvement des grains est défini à partir d'une valeur seuil de la fraction de liquide extragranulaire (définie comme le rapport entre le volume de liquide à l'extérieur des enveloppes des grains et le volume de prise de moyenne). Lorsque, localement cette fraction liquide devient inférieure à une valeur seuil ( $g_l^{bloque}$ ), les grains sont considérés comme fixes. La valeur de  $g_l^{bloque}$  adoptée dans le calcul présenté ci-dessous est de 0,6. La circulation du liquide interdendritique lorsque les grains sont immobilisés est aussi décrite à partir d'un terme de type Darcy comme dans le modèle où la phase solide est supposée fixe. Cône2D prédit une densité finale de grain, leur morphologie (dendritique/globulaire) via la fraction interne de solide au moment de l'immobilisation des grains, leur taille ainsi que la composition moyenne locale en éléments d'alliage.

#### 4. Résultats numériques et comparaison avec l'expérience

La solidification du lingot de 3t3 a été simulée avec Cône2D. Un alliage binaire Fe-C a été considéré pour le calcul. Le maillage du calcul qui est rapporté est composé de 3720 mailles. Des calculs avec des mailles plus fines n'ont pas montré de différences significatives. Les principales données sont reportées dans [6]. Une loi de germination en volume a été employée : en tout point du domaine, lorsque la température locale devient inférieure à la température locale de liquidus,  $10^9$  germes/m<sup>3</sup> sont activés instantanément. Les germes ont un rayon initial de 1µm. En un point, la germination ne peut être activée qu'une seule fois au plus. Par ailleurs, pour prendre en compte une zone colonnaire, les grains sont supposés fixes

dés qu'ils sont activés dans une bande de 6 cm en partant de la périphérie du lingot. Cette bande s'étend depuis le pied du lingot jusqu'au joint de masselotte.

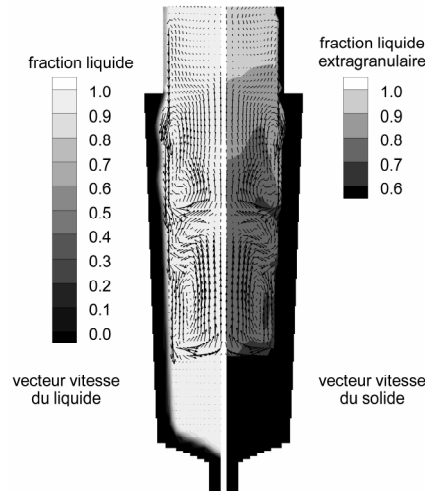


Figure 5 : Carte de fraction volumique de la phase liquide et de vitesse de la phase liquide (à gauche), de fraction de liquide extragranulaire et de vitesse de la phase solide (à droite) au temps  $t = 600$  s.

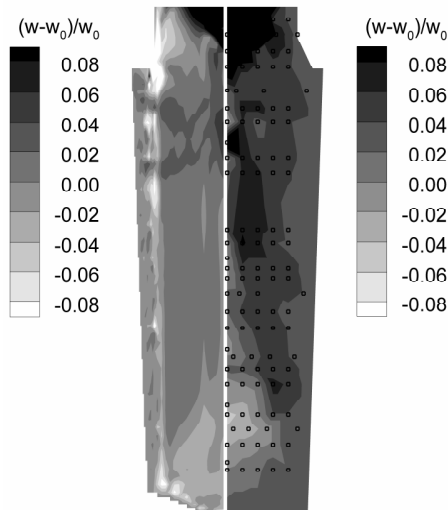


Figure 6 : Cartes de taux de ségrégation en carbone  $((w-w_0)/w_0)$ . Simulation avec prise en compte du mouvement des grains (à gauche), données expérimentales (à droite)

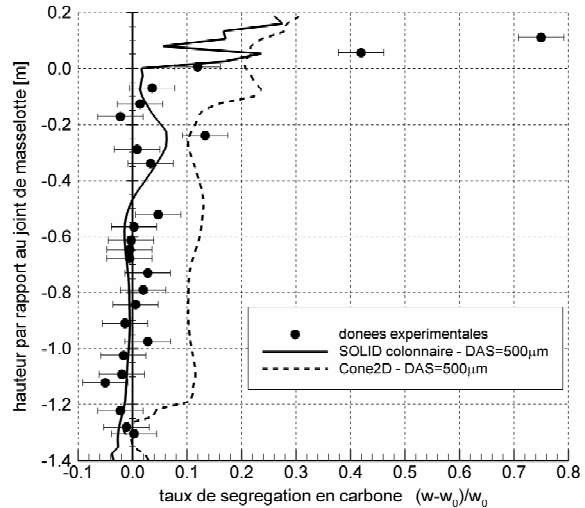


Figure 7 : Profils de taux de ségrégation en carbone le long de l'axe (taux de ségrégation  $\Delta w/w_0$ )

La Figure 5 représente au temps 600 s, dans la partie gauche du lingot, la fraction liquide globale ainsi que les vecteurs vitesse du liquide. À droite, on peut voir la fraction liquide extragranulaire (liquide en-dehors de l'enveloppe des grains) et les vecteurs vitesse de la phase solide. La valeur maximale du module de vitesse de la phase liquide est pour cet instant égale à  $0,023 \text{ ms}^{-1}$ , celle de la phase solide est de  $0,025 \text{ ms}^{-1}$ . La vitesse un peu plus forte de la phase solide peut être attribuée à la sédimentation des grains. On retrouve bien que lorsque la fraction liquide extragranulaire est inférieure à la fraction liquide de blocage ( $g_l^{bloquée}$ ), le mouvement du solide est stoppé (vitesse de la phase solide nulle dans la partie droite de la Figure 5). Alors que dans cette même zone, le liquide circule (vitesses du liquide faibles mais non nulles dans la partie gauche de la Figure 5). Cette figure illustre toute la complexité de ce modèle multiphasique.

Les cartes de taux de ségrégation en carbone mesurées et calculées sont présentées sur la Figure 6. Le modèle prévoit bien une zone de ségrégation négative en pied de lingot et positive en tête. Sur la Figure 7, les profils axiaux de taux de ségrégation en carbone sont

rapportés pour les valeurs : mesurées, calculées avec (Cône2D) et sans prise en compte du mouvement des grains. On remarque que le modèle où la phase solide est fixe conduit à un taux de ségrégation moyen sur l'axe trop important (de l'ordre de 10%). Seul le modèle prenant en compte le mouvement des grains conduit à une prédiction correcte dans cette zone.

Les cartes de composition moyenne relative en carbone ont été reportées pour trois instants sur la Figure 8. Ces trois temps sont supérieurs au temps correspondant à l'arrêt du mouvement des grains au moins dans toute la zone du lingot comprise sous le joint de masselotte comme en atteste le champ de vitesse de la phase solide qui est aussi tracé. On peut voir qu'au temps 17 min, la composition moyenne en carbone est plutôt uniforme et proche de la composition initiale dans la partie centrale du lingot. Ce n'est donc pas le mouvement des grains équiaxes qui a pu être responsable de la ségrégation en carbone finale que l'on peut voir au temps 1h38min. Comme nous l'avons déjà fait remarquer, le liquide interdendritique circule dans la zone où les grains ont été immobilisés, on le note à nouveau sur les parties de gauche des lingots où le champ de vitesse de la phase liquide est tracé. C'est la circulation du liquide interdendritique qui est responsable comme pour un modèle où la phase solide est supposée fixe de la macroségrégation dans la zone centrale du lingot. Cependant la mise en place rapide des grains dans la zone équiaxe réduit fortement l'intensité des mouvements du liquide et donc l'intensité des macroségrégations s'en trouve également réduite.

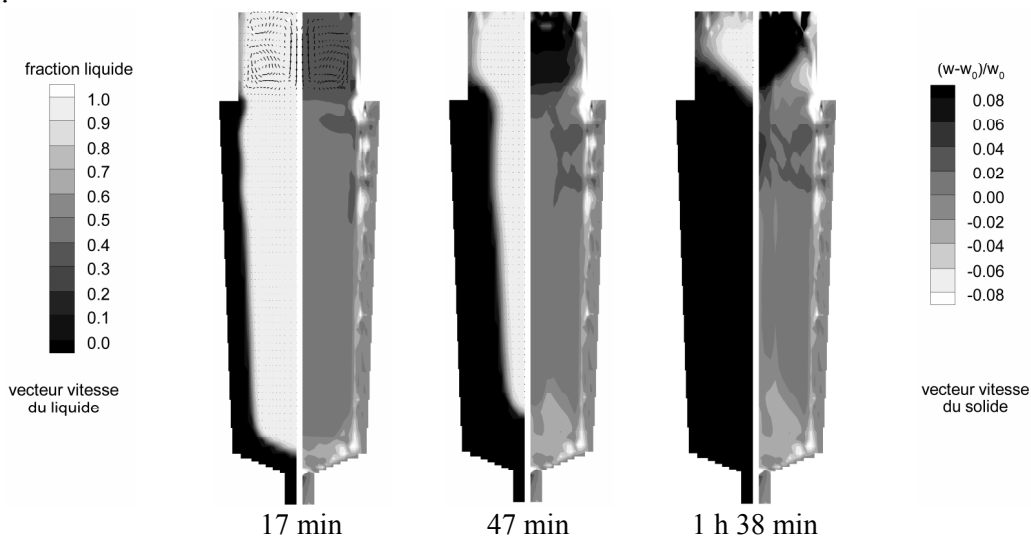


Figure 8 : Mise en évidence de l'évolution de la ségrégation par circulation du liquide interdendritique après la mise en place des grains équiaxes dans le lingot.

Les cartes de fraction interne de solide au moment de l'immobilisation des grains (information sur la morphologie des grains) et de densité de grains en fin de solidification sont reportées sur la Figure 9. On trouve en pied de lingot une zone où les grains sont plutôt de morphologie globulaire, avec une densité double de la densité initiale de grains. Cette zone est limitée en hauteur, elle peut être mise en relation avec la zone mixte globulaire/dendritique qui a été observée et reportée à la Figure 2. Au dessus de cette zone, se trouve une région où la morphologie des grains est assez uniforme, avec une valeur de la fraction interne de solide au moment du blocage des grains de l'ordre de 0,1. Il s'agit donc de grains dendritiques. Cette zone s'étend jusqu'au joint de masselotte. La densité des grains dans cette zone est en moyenne égale à la densité initiale de germes. Elle augmente sous le joint de masselotte, pour décroître ensuite très fortement dans la masselotte. Il est intéressant de remarquer que cette zone de transition correspond avec le début de la zone de macroségrégation positive observée autour de l'axe sur la Figure 7 (sur la carte expérimentale et sur le calcul).

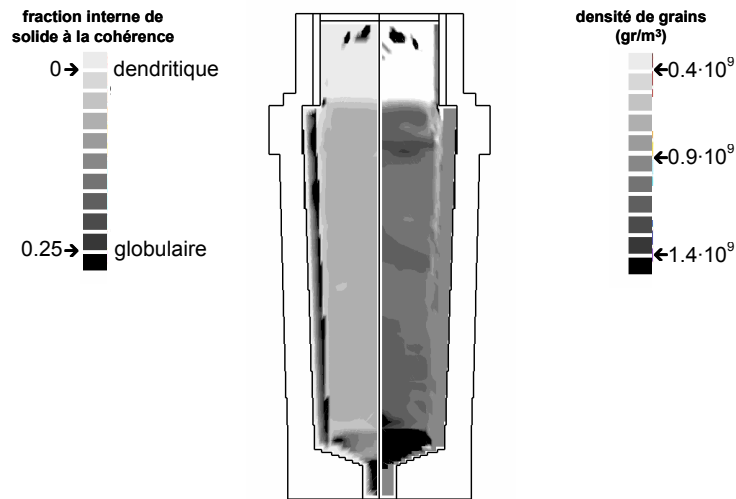


Figure 9 : Carte de la fraction interne de solide au moment de l'immobilisation des grains (à gauche) et de la densité finale de grains (à droite).

## 5. Conclusions

Un modèle de macroségrégation prenant en compte le mouvement des grains équiaxes a été développé. Les essais d'application du modèle au cas du lingot de 3t3 ont montré que les capacités de prédiction du modèle sont intéressantes. En particulier, par rapport aux modèles antérieurs où la phase solide était supposée fixe, il est possible de rendre compte de la macroségrégation observée dans la zone centrale du lingot. L'analyse des résultats de calcul a permis de mettre en évidence que pour ce lingot, la macroségrégation est causée par la circulation du liquide interdendritique, mais que la mise en place tôt pendant la solidification d'une structure équiaxe cohérente jouait un rôle de frein pour le mouvement du liquide.

## Références

- [1] I. Vannier, H. Combeau, G. Lesoult, Numerical model for prediction of final composition of heavy steel ingots, *Materials Science and Engineering A*, A173 (1993), 317.
- [2] C. Beckermann, Modelling of Macrosegregation: Applications and Future Needs, *Int. Materials Reviews*, 47 (2002), 243-261.
- [3] C.Y. Wang, C. Beckermann, Equiaxed Dendritic Solidification with Convection: Part 1. Multi-Scale /-Phase Modeling, *Met. and Mat. Transactions A*, 27A (1996), 2754-2764.
- [4] B. Appolaire, H. Combeau, Modelling of the settling of equiaxed crystals during the solidification of large steel ingots, *International Symposium on Liquid Metal Processing and Casting* (Nancy, France, 21-24 sept. 2003), 233-239.
- [5] B. Rabia, *La formation des structures équiaxes : "mouvement des grains, croissance-refusion, conséquences sur les macroségrégations"*. Thèse de Doctorat de l'Institut National Polytechnique de Lorraine, Ecole des Mines de Nancy (2004).
- [6] H. Combeau, M. Založnik, B. Rabia, S. Charmond, S. Hans, P.E. Richy, Prediction of the macroségrégation in steel ingots: influence of the motion and the growth of the equiaxed grains, *International Symposium on Liquid Metal Processing and Casting* (Nancy, France, 2-5 sept. 2007), 127-132.

## Remerciements

Cette étude a été réalisée dans le cadre du programme de recherche OSC cofinancé par le Ministère de l'Economie, des Finances et de l'Industrie et des partenaires industriels (Arcelor, Ascometal, Aubert&Duval, Industeel, CTIF, Erasteel, PSA, Fonderie de l'Atlantique, S&CC, Transvalor).