Refroidissement en lingotière d'un alliage réactif.

Bénédicte BAQUÉ^{1,2*}, Jean-Pierre BELLOT^{1,2}, Alain JARDY^{1,2}

¹Institut Jean Lamour - UMR CNRS 7198 - Université de Lorraine Parc de Saurupt - CS 50840, 54011 Nancy Cedex ²Labex DAMAS - Université de Lorraine Ile du Saulcy, 57045 Metz Cedex 01 *(auteur correspondant : benedicte.baque@ijl.nancy-universite.fr)

Résumé - Deux méthodes de refroidissement en lingotière cylindrique (en acier non refroidie et en cuivre refroidie à l'eau) d'un alliage réactif sont simulées numériquement et comparées. Le modèle utilisé résout les équations couplées de transfert de chaleur et de quantité de mouvement en régime transitoire, en supposant un écoulement turbulent du bain liquide. Le type de moule utilisé influence peu le refroidissement du lingot. La principale différence réside dans le comportement thermique des lingotières : à cause de sa faible épaisseur, le flux de chaleur total extrait du moule en cuivre par le circuit de refroidissement correspond à celui provenant du lingot.

Nomenclature

Ср	chaleur spécifique, $J.kg^{-1}.K^{-1}$	Symb	oles grecs
¢.	fraction massique	β	coeff. de dilatation thermique, K^{1}
g	accélération de la pesanteur, $m.s^{-2}$, E	émissivité
ĥ	coeff. d'échange thermique, $W.m^{-1}.K^{-1}$	З	vitesse de dissipation de $k, m^2.s^{-3}$
H	hauteur totale du lingot, m	λ	conductivité thermique, $W.m^{-1}.K^{-1}$
k	énergie cinétique turbulente, $m^2 s^{-2}$	μ	viscosité dynamique, $kg.m^{-1}.s^{-1}$
Κ	perméabilité, m^2	ρ	masse volumique, $kg.m^{-3}$
L_F	chaleur latente de solidification, $J.kg^{-1}$	σ	const. de Stefan-Boltzmann, W.m ⁻² .K ⁻⁴
7	pression, Pa	Indic	es et exposants
Pr	nombre de Prandtl	0	référence
r	rayon, <i>m</i>	amb	ambiant
Ra	nombre de Rayleigh	inf	inférieur
ţ	temps, s	l	liquide
Г	température, K	lat	latéral
V	vitesse de l'écoulement, $m.s^{-1}$	liq	liquidus
2	profondeur, <i>m</i>	ray	rayonnement
		sol	solidus

t turbulent

1. Introduction

Pour la production de lingots d'alliages métalliques, l'étape de refroidissement conditionne l'hétérogénéité chimique (micro et macro ségrégations) et la structure de solidification. Elle joue donc un rôle essentiel sur les propriétés de l'alliage brut de solidification. L'objectif de ce travail est de comparer par simulation numérique deux méthodes de refroidissement d'un alliage réactif sous vide, d'une part dans une lingotière en acier non refroidie et d'autre part dans une lingotière en cuivre refroidie à l'eau.

Contrairement au cas d'un métal pur, la solidification d'un alliage se produit sur un intervalle de températures. Par conséquent, la température et la fraction liquide varient en cours de solidification et selon la localisation dans le lingot. Le système biphasé liquide-solide constitue une zone dite pâteuse, dans laquelle l'alliage liquide et l'alliage solidifié coexistent.

Les différents transports dans l'ensemble du lingot peuvent être calculés à l'aide d'un système d'équations unique [1].

La modélisation du refroidissement d'un alliage dans une lingotière cylindrique est basée sur le code de mécanique des fluides SOLAR (SOlidification d'un Lingot refondu à l'ARc), développé à partir de 1995 à l'Ecole des Mines de Nancy [2] et enrichi par des travaux de thèses successifs [3]. Les équations couplées de transfert de chaleur et de quantité de mouvement sont résolues en régime transitoire, en supposant un écoulement turbulent du bain liquide. Le domaine de calcul axisymétrique est discrétisé par la méthode des volumes finis. Ce modèle mathématique a été validé par comparaison des résultats numériques avec des données expérimentales, principalement dans le cas de refusions de lingots constitués de matériaux réactifs et réfractaires, comme les alliages de titane et de zirconium [4,5], mais aussi pour des aciers et des superalliages [6].

2. Modélisation

2.1. Equations résolues

L'alliage liquide est considéré comme un fluide newtonien, dont le comportement peut être décrit par les équations moyennées de Navier-Stokes (RANS). Au cours de son refroidissement, les transferts de chaleur et de matière dans le liquide s'effectuent par conduction et convection. Dans la partie solidifiée du lingot de même que dans la lingotière, seul le phénomène de diffusion thermique est responsable du transport. En régime turbulent, l'équation de *transport de la chaleur* dans le lingot s'écrit :

$$\rho \left(Cp + L_F \frac{\partial f_I}{\partial T} \right) \frac{\partial T}{\partial t} + \rho Cp \left(\vec{V} \cdot \vec{\nabla} T \right) = \vec{\nabla} \cdot \left((\lambda + \lambda_t) \vec{\nabla} T \right)$$
(1)

La dissipation de la chaleur latente de solidification L_F est supposée uniforme sur l'intervalle de solidification car le modèle fait l'hypothèse simple d'une variation linéaire de la fraction liquide f_l en fonction de la température :

$$f_{l} = \frac{T - T_{sol}}{T_{lia} - T_{sol}} \tag{2}$$

La fraction liquide f_l est égale à 1 lorsque la température est supérieure à T_{liq} et à 0 lorsque T est inférieure à T_{sol} . La vitesse en tout point de la zone solidifiée est nulle. Dans la zone pâteuse, la vitesse moyenne instantanée V est reliée à la vitesse V_l de la phase liquide par :

$$\vec{V} = f_l \vec{V}_l \tag{3}$$

L'hypothèse de l'équilibre thermodynamique local associée au modèle de transferts couplés lors de la solidification [1] stipule que les températures du solide et du liquide sont égales au sein d'un volume élémentaire représentatif de la zone pâteuse. La masse volumique ρ et la chaleur spécifique Cp sont supposées constantes et identiques dans les phases solide et liquide. La conductivité thermique λ de l'alliage dépend quant à elle de la température.

La conservation de la matière dans le lingot s'écrit :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{V} = 0 \tag{4}$$

L'équation de *transport de la quantité de mouvement* dans le lingot est la suivante :

$$\rho \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \rho \left(\vec{V} \cdot \vec{\nabla} \right) \vec{V} = \vec{\nabla} \cdot \left((\mu + \mu_t) \vec{\nabla} \cdot \vec{V} \right) - \vec{\nabla} p + \rho \vec{g} - \frac{\mu}{K} \vec{V}$$
(5)

Dans l'alliage liquide, la perméabilité K tend vers l'infini. Au niveau du front de solidification, la zone pâteuse entre les phases solide et liquide de l'alliage est traitée comme un milieu poreux [1,7]. La perméabilité est estimée grâce à la relation de Kozeny-Carman :

$$K = K_0 \frac{f_l^3}{(1 - f_l)^2}$$
(6)

La perméabilité K diminue avec la fraction liquide f_l . L'équation de Navier-Stokes approche alors la loi de Darcy, qui relie la vitesse du liquide dans la zone pâteuse au gradient de pression. La perméabilité tend vers 0 lorsque la température se rapproche du solidus, annulant ainsi la vitesse de l'écoulement.

La masse volumique ρ est supposée constante dans la phase liquide, excepté pour le terme de gravité, pour lequel les faibles variations de ρ crées par les gradients de température sont prises en compte (hypothèse de Boussinesq). En effet, dans le cas du refroidissement d'un lingot, le mouvement du liquide est dû principalement aux forces de convection naturelle d'origine thermique. La masse volumique moyenne s'écrit sous la forme suivante :

$$\rho = \rho_0 \left(1 - \beta (T - T_0) \right) \tag{7}$$

Les équations de transport précédentes sont associées au *modèle de turbulence* k- ε [8], pour lequel la viscosité turbulente μ_t est calculée de la manière suivante :

$$\mu_{t} = \rho C_{\mu} \frac{k^{2}}{\varepsilon}$$
(8)

L'énergie cinétique turbulente k et sa vitesse de dissipation ε obéissent à des équations de transport classiques :

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho \vec{V} \cdot \vec{\nabla} k = \vec{\nabla} \cdot \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \vec{\nabla} \cdot k \right) + P_k - \rho \varepsilon + G_k$$
(9)

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho \vec{V} \cdot \vec{\nabla} \varepsilon = \vec{\nabla} \cdot \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\varepsilon}} \right) \vec{\nabla} \cdot \varepsilon \right) + \frac{\varepsilon}{k} \left(C_1 P_k - C_2 \rho \varepsilon - C_3 G_k \right)$$
(10)

Le terme de création d'énergie cinétique turbulente P_k est généré par les gradients locaux de vitesse (phénomènes de cisaillement dans l'écoulement moyen), alors que le terme de création/dissipation de la turbulence G_k est engendré par la fluctuation des forces de convection naturelle [3]. En coordonnées cylindriques :

$$P_{k} = \mu_{t} \left[\left(\frac{\partial V_{r}}{\partial z} + \frac{\partial V_{z}}{\partial r} \right)^{2} + 2 \left[\left(\frac{\partial V_{r}}{\partial r} \right)^{2} + \left(\frac{\partial V_{r}}{r} \right)^{2} + \left(\frac{\partial V_{z}}{\partial z} \right)^{2} \right]$$
(11)

$$G_{k} = -\frac{\mu_{t}}{\Pr_{t}} g\beta \frac{\partial T}{\partial z}$$
(12)

Les valeurs utilisées pour les constantes du modèle k- ε sont répertoriées dans le tableau 1. La définition du nombre de Prandtl turbulent Pr_t permet de calculer la conductivité thermique turbulente λ_t .

C_{μ}	C_1	C_2	C_3	σ_k	$\sigma_arepsilon$	Pr_t
0,09	1,44	1,92	$\frac{1}{C_1} \tanh \left \frac{V_z}{V_r} \right $	1,0	1,3	$\frac{Cp\mu_t}{\lambda_t} = 0,9$

Tableau 1 : Constantes de fermeture du modèle de turbulence k-ε [8,9,3]

2.2. Conditions aux limites

En ce qui concerne le lingot, la vitesse normale de l'écoulement, la contrainte tangentielle de frottement et les gradients normaux des scalaires k et ε sont nuls à la surface libre, alors que les vitesses et l'énergie turbulente k s'annulent au niveau des parois.

Les conditions aux limites thermiques du système complet sont schématisées sur les figures 1 et 2. Elles sont dépendantes du refroidissement sous vide de la lingotière. Le diamètre du lingot est de l'ordre du mètre. L'épaisseur de la lingotière en cuivre est environ dix fois inférieure à celle du moule en acier.



Figure 1 : Conditions aux limites thermiques pour la lingotière en acier non refroidie

Figure 2 : *Conditions aux limites thermiques* pour la lingotière en cuivre refroidie par eau

La surface libre au sommet du lingot rayonne d'une part vers la surface cylindrique interne de la lingotière et d'autre part vers une surface fictive d'émissivité nulle. Ainsi, les flux de chaleur radiatifs échangés sont calculés grâce à la méthode des radiosités. L'émissivité du lingot varie en fonction de l'état liquide ou solide de l'alliage.

Des conditions interfaciales de Fourier sont utilisées pour modéliser le transfert de chaleur entre le lingot et les parois du moule :

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial z}\Big|_{\inf} = h_{\inf} \left(T - T_{moule} \right)$$
(13)

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial r}\Big|_{lat} = h_{lat} \left(T - T_{moule} \right)$$
(14)

La valeur du coefficient de transfert h_{inf} à la base du lingot dépend de l'importance de la surface de contact avec la lingotière. Pendant le refroidissement, le lingot se contracte et un espace se forme latéralement avec le moule. Le coefficient d'échange h_{lat} représente initialement la résistance de contact entre le lingot et le moule. Il est ensuite corrigé pour prendre en compte la contribution du rayonnement entre les deux surfaces cylindriques (linéarisation de l'expression du flux thermique [10]). Lorsque le lingot est totalement décollé de la paroi du moule, le transfert de chaleur devient uniquement radiatif.

En ce qui concerne la lingotière, le haut du moule rayonne vers le milieu environnant. Dans le cas du moule en acier non refroidi, la surface cylindrique externe fait de même. Les flux thermiques extraits par rayonnement sont linéarisés en introduisant un coefficient d'échange du type h_{ray} :

$$h_{ray} = \frac{\sigma \varepsilon_{moule} \left(T_{moule}^4 - T_{amb}^4 \right)}{\left(T_{moule} - T_{amb} \right)}$$
(15)

Enfin, dans le cas de la lingotière en cuivre refroidie, l'action du circuit d'eau est modélisée par un coefficient de transfert thermique h_{eau} , associé à une température de l'eau T_{eau} à la paroi externe du moule, qui varient tous les deux en fonction de l'évolution thermique du système complet. La température d'entrée de l'eau dans le circuit T_{eau} entrée est considérée comme constante au niveau de la base du moule.

2.3. Conditions initiales

Dans le cadre de cette étude, le refroidissement d'un l'alliage de titane est simulé. Il s'agit du TA6V, qui contient 6% d'aluminium et 4% de vanadium. A l'état initial, l'alliage métallique réactif totalement liquide ($f_l = 1$) coulé sous vide dans la lingotière est supposé au repos (vitesse nulle). Sa température est considérée comme uniforme et égale à 1800°C, supérieure au point de fusion T_{liq} . Le moule et le milieu environnant sont tous les deux à température ambiante T_{amb} .

2.4. Résolution numérique

Les équations de transport sont discrétisées par la méthode des volumes finis, qui consiste à écrire un bilan global sur chacune des cellules d'un maillage axisymétrique. Sont utilisés un schéma en temps totalement implicite, un schéma de différenciation hybride pour les termes de transport convectifs et une loi locale de variation linéaire pour les termes de transport diffusifs. Les équations de Navier-Stokes sont discrétisées par l'algorithme SIMPLE [11]. Les équations algébriques ainsi obtenues sont ensuite résolues par une méthode de gradients conjugués préconditionnés.

3. Résultats

La solidification du lingot comporte deux étapes. Au cours de la première phase, dite « dynamique », le bain liquide est mis en mouvement. La seconde phase, « thermique », permet de stabiliser l'écoulement, notamment grâce à la diminution des gradients thermiques radiaux. Le type de moule utilisé influence peu le refroidissement du lingot.

Le fort gradient thermique entre le bain liquide et le milieu extérieur engendre un début de solidification dès les premiers instants du refroidissement. L'évolution de la fraction liquide f_l

au sein du lingot dépend ensuite fortement de celle de la température de l'alliage. Comme le montre la figure 6, la solidification de l'alliage liquide est initiée à partir des trois surfaces du lingot. Au cours de la première heure du refroidissement, le lingot peut donc être considéré comme une cavité fermée, dans laquelle le bain liquide est soumis à des gradients thermiques, moteurs du mouvement. Comme ces derniers ont tendance à s'atténuer avec le refroidissement du lingot, l'épaisseur de la zone pâteuse augmente au fur et à mesure de la simulation. D'après les simulations, le lingot ne contient plus d'alliage liquide au-delà de 70 minutes (en tout point, $f_l < 1$) et la totalité de l'alliage est passé à l'état solide au bout de 2 heures ($f_l = 0$).

Le lingot se rétracte dès la première minute de refroidissement, principalement à partir du fond dans le cas de la lingotière en acier, mais également à partir du sommet avec la lingotière en cuivre refroidie. Dans les deux cas, le contact est totalement rompu dès la troisième minute de refroidissement. A partir de cet instant, le transfert de chaleur entre la surface cylindrique externe du lingot et la paroi interne de la lingotière est uniquement radiatif. C'est principalement par cette interface avec le moule qu'est réalisé le refroidissement du lingot.

Comme le montre le graphe de la figure 3, l'intensité du flux de chaleur extrait latéralement du lingot diminue au fur et à mesure du refroidissement, alors que la chaleur reçue par la lingotière conduit dans un premier temps à augmenter la température du moule. Ainsi, d'après les résultats de simulation, la lingotière en acier non refroidie atteint une température maximale de 717°C à t = 107 min, alors que le circuit de refroidissement permet au moule en cuivre de maintenir une température inférieure à 200°C, qui atteint son maximum à t = 20 min, avant de décroître.



Figure 3 : Evolution du flux thermique latéral total à l'interface entre le lingot et le moule (avec agrandissement d'une zone du graphe)

Figure 4 : *Evolution du flux thermique latéral total à la surface cylindrique externe du moule*

C'est la principale différence de comportement observée entre les deux méthodes de refroidissement. En effet, à cause de sa faible épaisseur, le moule en cuivre accumule peu de chaleur, si bien que l'intensité du flux thermique qu'il émet latéralement vers le circuit de refroidissement, tracée sur la figure 4, correspond à celle reçue à l'interface avec le lingot (cf. figure 3). Au contraire, dans le cas de la lingotière en acier non refroidie, l'intensité du flux de chaleur émis à travers la surface cylindrique externe croît pendant les 8,5 premières heures de refroidissement, avant d'amorcer une diminution.

En ce qui concerne la phase « dynamique » du refroidissement du lingot, des vitesses maximales relativement élevées sont calculées au cours des premiers instants, puisqu'elles sont de l'ordre de 0,14 m/s autour de t = 40 s.

D'un point de vue global, le nombre de Rayleigh est le rapport de la poussée d'Archimède et des forces visqueuses. Pour une conduite cylindrique de rayon r, il peut être calculé de la manière suivante [12] :

$$Ra_{(z,t)} = \frac{g \cdot \beta \cdot \rho^2 \cdot Cp}{\mu \cdot \lambda} \left(T_{(o,z,t)} - T_{(r,z,t)} \right) (2r)^3$$
(16)

Or dans le cas du lingot, le « rayon équivalent » diminue au fur et à mesure que l'alliage liquide refroidit et se solidifie à partir de toutes les surfaces externes. Le rayon r correspond à la position d'une paroi fictive qui sépare l'alliage totalement liquide de la zone pâteuse. De plus, le bain liquide n'étant pas une conduite infinie mais une cavité, une fois le critère de Rayleigh déterminé pour chaque section du bain, une moyenne sur toute la hauteur peut être réalisée. Son évolution est présentée en figure 5.

Au début du refroidissement, le nombre de Rayleigh est supérieur à 10^9 : l'écoulement est turbulent. Le mouvement du fluide entame un régime de transition un peu avant 3 minutes. La valeur de *Ra* devient inférieure à 10^6 autour de 6 minutes : l'écoulement est pratiquement laminaire.



Figure 5 : Evolution du nombre de Rayleigh moyen et type d'écoulement associé

Figure 6 : Carte du rapport μ_t/μ et vecteurs vitesse à t = 5 min pour un lingot refroidi avec un moule en acier, la zone pâteuse est délimitée par les iso-contours $f_l = 0,1$ et $f_l = 0,9$

Un exemple de distribution de l'intensité de turbulence μ_t/μ de l'écoulement du bain liquide, calculée à l'instant t = 5 min dans le cas d'un moule en acier non refroidi, est donné sur la figure 6. Les zones de turbulence et de vitesses maximales (de l'ordre de 0,004 m/s) se superposent alors, dans la partie haute du lingot. Le tracé des vecteurs vitesse montre qu'un comportement classique de l'écoulement s'est mis en place, avec des cellules de convection naturelle : le liquide remonte au centre du lingot, s'écoule vers la périphérie au sommet et redescend le long de la paroi (ou plus généralement, le long du front de solidification latéral).

4. Conclusion

Les résultats numériques des simulations de deux méthodes de refroidissement différentes, pour la production de lingots cylindriques constitués d'un alliage réactif, sont comparés. Le modèle utilisé résout les équations couplées de transfert de chaleur et de quantité de mouvement en régime transitoire, en supposant un écoulement turbulent du bain liquide.

Que la solidification du lingot ait lieu dans une lingotière en cuivre refroidie à l'eau ou en acier non refroidie influence peu le comportement thermo-hydrodynamique de l'alliage. Le fort gradient thermique entre le bain liquide et le milieu extérieur initie la solidification à partir de toutes les surfaces externes du lingot dès les premiers instants. La chaleur est extraite du lingot sous l'effet du rayonnement, principalement par l'interface latérale avec le moule.

A cause de sa faible épaisseur, le moule en cuivre atteint rapidement une température maximale et le flux de chaleur total extrait par le circuit de refroidissement correspond à celui provenant du lingot. Au contraire, le moule en acier non refroidi possède une inertie thermique considérable et met donc beaucoup plus de temps à atteindre une température maximale beaucoup plus élevée. Par conséquent, l'intensité du flux de chaleur extrait à travers la surface externe croît pendant plusieurs heures avant de commencer à diminuer.

Références

- [1] W. D. Bennon, F. P. Incropera, An experimental investigation of binary solidification in a vertical channel with thermal and solutal mixed convection, *Journal of Heat Transfer 111-3* (1989), 706-772.
- [2] S. Hans, Modélisation des transferts couplés de chaleur, de soluté et de quantité de mouvement lors de la refusion à l'arc sous vide (VAR) – Application aux alliages de titane, Ph.D thesis, INPL Nancy (1995).
- [3] T. Quatravaux, Evolution de la modélisation du procédé VAR Contribution à la description de la dispersion inclusionnaire dans le puits liquide et à la prévention de défauts de solidification, Ph.D thesis, INPL Nancy (2004).
- [4] S. Hans, A. Jardy, D. Ablitzer, A numerical model for the prediction of transient turbulent fluid flow, heat transfer and solidification during vacuum arc remelting, *Proceedings of the International Symposium on Liquid Metal Processing and Casting* (Santa Fe, New Mexico, 1994), 143-154.
- [5] A. Jardy, A. F. Wilson, D. Lasalmonie, D. Ablitzer, Development of an enhanced mathematical model having reduced computation time to simulate vacuum arc remelting of titanium and zirconium alloys, *Proceedings of the International Symposium on Liquid Metal Processing and Casting* (Santa Fe, New Mexico, 2001), 200-210.
- [6] T. Quatravaux, S. Ryberon, S. Hans, A. Jardy, B. Lusson, P. E. Richy, D. Ablitzer, Transient VAR ingot growth modelling : application to specialty steels, *Journal of Materials Science 39* (2004), 7183-7191.
- [7] V. Voller, A. D. Brent, A. Prakash, The modelling of heat, mass and solute transport in solidification systems, *International Journal of Heat and Mass Transfer 32-9* (1989), 1719-1731.
- [8] B. E. Launder, D. B. Spalding, The numerical computation of turbulent flows, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 3* (1974), 269-289.
- [9] C. R. Kleijn, Turbulent natural convection computations with the FLUENT code, *Proceedings of Éditions Européennes Thermique et Industrie* (Paris, France, 1993), 88-96.
- [10] A. Jardy, *Modélisation des procédés de refusion à électrode consommable*, Ph.D thesis, INPL Nancy (1984).
- [11] S. V. Patankar, *Numerical heat transfer and fluid flow*, Hemisphere Publishing Corporation (1980).
- [12] J. Padet, Convection thermique et massique Principes généraux, *Techniques de l'ingénieur Transferts thermiques* (2005), be8205.