

Simulation numérique et validation expérimentale des effets
des caractéristiques de la masselotte (Hot Top) sur la
macrosségrégation dans les lingots de grande taille en acier à
haute résistance

par

NEDA GHODRATI

THÈSE PAR ARTICLES PRÉSENTÉE À L'ÉCOLE DE TECHNOLOGIE
SUPÉRIEURE COMME EXIGENCE PARTIELLE À L'OBTENTION DU
DOCTORAT EN PHILOSOPHIE
Ph.D.

MONTRÉAL, LE 5 SEPTEMBER 2024

ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE
UNIVERSITÉ DU QUÉBEC



Neda Ghodrati, 2024



Cette licence [Creative Commons](#) signifie qu'il est permis de diffuser, d'imprimer ou de sauvegarder sur un autre support une partie ou la totalité de cette œuvre à condition de mentionner l'auteur, que ces utilisations soient faites à des fins non commerciales et que le contenu de l'œuvre n'ait pas été modifié.

PRÉSENTATION DU JURY

CETTE THÈSE A ÉTÉ ÉVALUÉ

PAR UN JURY COMPOSÉ DE :

M. Mohammad Jahazi, directeur de projet de thèse
Département de génie mécanique à l'École de technologie supérieure

M. Conrad Boton, président du jury
Département de génie de la construction à l'École de technologie supérieure

M. Henri Champliaud, membre du jury
Département de génie mécanique à l'École de technologie supérieure

M. Javad Gholipour Baradari, examinateur externe
Conseil national de recherches Canada

CETTE THÈSE A FAIT L'OBJET D'UNE SOUTENANCE DEVANT JURY ET PUBLIC

LE 26 AOÛT 2024

À L'ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE

REMERCIEMENTS

Tout d'abord, je tiens à exprimer ma plus profonde gratitude à mon directeur de thèse, le Professeur Mohammad Jahazi. Ses conseils inestimables et son encadrement, ainsi que son encouragement et son soutien sans faille, ont été incroyablement motivants pour moi, surtout pendant les moments difficiles de mon parcours doctoral. Sa patience et son attitude positive ont rendu ce projet extrêmement agréable et enrichissant en termes d'apprentissage. La dévotion totale du Professeur Jahazi à sa carrière scientifique, son humour, sa gentillesse et son souci sincère pour les autres ont été un exemple remarquable pour mes futures entreprises. Je suis particulièrement reconnaissante pour ses conseils et son soutien tout au long de mes années d'études, qui ont eu un impact profond sur ma croissance académique et personnelle. Son mentorat a été une source d'inspiration et je suis profondément reconnaissante de son influence sur mon parcours de vie.

Je tiens également à exprimer ma gratitude aux membres du jury, le Professeur Henri Champliaud, le Professeur Javad Gholipour Baradari, et la Professeure Conrad Boton. Je leur suis sincèrement reconnaissante pour leurs précieux conseils lors de l'examen oral du DGA 1033. Leurs idées et leurs retours ont été extrêmement utiles pour orienter ma recherche et améliorer ma compréhension du sujet. J'adresse un remerciement spécial au Professeur Henri Champliaud pour ses conseils, son assistance et ses commentaires sur les aspects MEF de mon projet. Son expertise et son soutien m'ont été d'une valeur inestimable.

Je suis reconnaissante du soutien financier accordé par le Conseil de Recherches en Sciences Naturelles et en Génie du Canada (CRSNG), sous la forme d'une Subvention de Recherche et Développement (SRD) collaborative portant le numéro 536444-18. Ce soutien a été essentiel pour faciliter le progrès et le succès des projets de recherche.

Je suis profondément reconnaissante envers Finkl Steel, l'entreprise sponsor de ce projet industriel pratique, pour leur soutien inestimable tout au long du projet. Leur assistance lors des expérimentations, notamment dans la coulée des lingots, y compris les mesures de profil de température sur la surface extérieure du moule, ainsi que la découpe des échantillons, le meulage, la macro-attaque, l'inspection par ressuage et la préservation des échantillons, a été indispensable. Leur expertise dans la caractérisation des profils chimiques et macrostructuraux des sections spécifiées a considérablement amélioré les résultats du projet. Je tiens à exprimer mes sincères remerciements aux ingénieurs de Finkl Steel, notamment à M. Jean-Benoit Morin, Dr. Abdelhalim Loucif, M. Patrice Ménard et Mme. Paloma Isabel Gallego, pour leur aide exceptionnelle. Leurs efforts pour trouver des coulées et des échantillons, ainsi que pour coordonner toutes les arrangements et la documentation nécessaires, ont été essentiels pour le succès du projet. Leur dévouement et leur expertise ont vraiment fait la différence, et je leur suis infiniment reconnaissant pour leurs contributions.

Je tiens à exprimer ma sincère appréciation aux membres du groupe CM2P. Leurs précieux conseils, leur collaboration, leur inspiration et leur amitié ont été essentiels tout au long de mon parcours doctoral. Je suis particulièrement reconnaissante au Dr. Alireza Khodabandeh pour ses commentaires inestimables, ses conseils et pour m'avoir formé à l'utilisation des machines

Dilatomètre et LFA pendant mon doctorat. Mes remerciements les plus sincères vont également au Dr. Mounir Baiteche pour son aide dans la phase initiale du traçage de la géométrie de la configuration du lingot de coulée et ses conseils en MEF. De plus, j'adresse ma plus profonde gratitude au Dr. Mahammad Saadati pour son encadrement et sa formation dans les opérations des machines SEM, LEXT, EBSD et Spectromax. Leur soutien et leur expertise ont largement contribué à ma croissance et au succès de mes projets de recherche. Je tiens également à remercier M. Radu Romanica pour m'avoir formé à l'utilisation de l'équipement de laboratoire que j'ai utilisé pendant mon doctorat.

J'adresse ma plus sincère gratitude à mon père et à mes frères pour leur amour indéfectible, leur soutien, leur gentillesse et leur motivation continue tout au long de cette entreprise académique. Par-dessus tout, je suis profondément reconnaissante envers mon père, ma lumière guide, pour son amour constant, sa foi inébranlable en moi et sa présence constante dans ma vie. J'exprime également ma plus profonde appréciation à ma défunte mère ; bien qu'elle ne soit plus parmi nous, son esprit éternel continue de m'inspirer et de me soutenir.

*À ma chère défunte mère
et à mon cher père*

Simulation numérique et validation expérimentale des effets des caractéristiques de la masselotte (hot top) sur la macroségrégation dans les lingots de grande taille en acier à haute résistance

Neda GHODRATI

RÉSUMÉ

Cette recherche examine l'impact des caractéristiques de la masselotte (hot top) sur les défauts à l'échelle macroscopique, en se concentrant spécifiquement sur la sévérité et la formation de la macroségrégation dans un lingot de 12 tonnes d'acier à haute résistance et à moyen carbone. La macroségrégation pose des défis importants en raison de sa résistance à l'élimination lors des étapes de traitement ultérieures, entraînant des non-homogénéités et le rejet potentiel du produit, en particulier dans le cas des grands lingots. Les mesures critiques impliquent l'identification et le contrôle des sources de macroségrégation telles que les compositions d'alliage, les paramètres de coulée, la technique et la configuration de l'installation du lingot de coulée.

La masselotte, située dans la partie supérieure du moule, comprend des panneaux réfractaires (sideboard) sur les parois latérales et un composé ou un panneau de recouvrement au sommet du lingot, jouant un rôle crucial dans la configuration de l'installation du lingot de coulée. Ses fonctions incluent la facilitation de l'alimentation continue pendant la coulée, la régulation du flux thermique au sommet du lingot pendant la solidification, et la fourniture d'une région pour l'accumulation des ségrégats et des inclusions non métalliques. Traditionnellement, la masselotte est coupée pour aplatisir la surface supérieure du lingot et éliminer les impuretés. Ce processus consiste à découper l'excédent de matériau de la masselotte pour obtenir une surface lisse et propre sur le lingot, éliminant ainsi la ségrégation et les impuretés de la partie supérieure du lingot.

Afin de mieux comprendre l'impact de la géométrie de la masselotte sur l'étendue et la sévérité de la macroségrégation, le processus de coulée et de solidification a été simulé et validé expérimentalement. Le code commercial de modélisation par éléments finis (MEF) tridimensionnel THERCAST® a été utilisé pour les simulations. Tous les phénomènes thermomécaniques associés au remplissage du moule, au refroidissement à l'intérieur et à l'extérieur du moule, et à la solidification basée sur un modèle volumique moyen à deux phases ont été simulés dans la présente étude.

Le modèle a pris en compte les interactions entre le transport du soluté et de la chaleur, couplées à des flux induits par la convection thermo-solutale et la contraction de solidification. Les conditions aux limites de la modélisation ont été établies en fonction des pratiques industrielles, intégrant des considérations telles que la friction locale, l'échange thermique entre l'acier et les composants du moule, et les échanges mutuels entre les composants du moule au sein du système de coulée. Les paramètres dépendant de la température de tous les matériaux pertinents ont été déterminés par des approches combinées impliquant des programmes de thermodynamique computationnelle, le logiciel de matériaux JMatPro®

version 11.0, des rapports de la littérature, la base de données de matériaux du logiciel THERCAST®, des sources industrielles et des calculs théoriques.

La configuration de coulée pour un lingot de 12 MT, y compris la configuration industrielle originale de la masselotte, a été simulée, et la validité du logiciel et du modèle a été confirmée par un travail expérimental complet sur des lingots de taille industrielle réelle. La planification expérimentale a été minutieusement conçue en fonction des résultats clés de prédiction et des paramètres de coulée. Pour ce faire, un ensemble complet de tests a été réalisé. Des mesures de composition chimique ont été effectuées sur l'ensemble de la demi-section longitudinale du lingot afin d'évaluer le taux de ségrégation de tous les éléments. Une macro-attaque a été appliquée à l'autre demi-section longitudinale pour révéler le motif de macroségrégation, tandis qu'une inspection par ressuage (DPI : Dye Penetrant Inspection) a été réalisée sur la moitié de la section longitudinale pour détecter la microporosité. De plus, la surveillance de la température de la surface du moule et les mesures de la cavité de retrait ont été stratégiquement effectuées.

L'enquête sur la configuration de la masselotte a couvert divers aspects, y compris la géométrie, les conditions thermiques et leurs combinaisons, en utilisant le modèle validé pour une analyse approfondie. L'étude s'est concentrée sur plusieurs variables au sein de la configuration de la masselotte, notamment la hauteur de la masselotte, la hauteur des panneaux latéraux, la conductivité thermique des panneaux latéraux et le préchauffage de la masselotte, à travers huit scénarios différents de configuration de la masselotte. Ces variables ont modifié des facteurs tels que le ratio de masse du moule, le ratio de finesse du moule et le régime thermique de la masselotte, influençant ainsi les cinétiques de solidification.

Les modifications apportées à la configuration de la masselotte ont exercé une influence significative sur divers aspects du processus de coulée, y compris le champ de vitesse du métal liquide, la taille et la forme des vortex, le taux de refroidissement, la température liquidus, la distribution de la température, le flux de chaleur, le temps de solidification, la position de la transition de colonnaire à équiaxe, et le profil de solidification. Ces facteurs ont collectivement impacté la sévérité de la macroségrégation à la fois dans la masselotte et dans le corps du lingot. De plus, la microporosité et la cavité de retrait, deux autres défauts critiques de la coulée, ont été étudiées parallèlement à la macroségrégation afin de proposer un critère de temps de solidification comme guide pour la configuration de la masselotte. Un design modifié a été proposé pour minimiser la macroségrégation, la microporosité et la formation de cavités.

Cette étude fournit des informations approfondies sur les mécanismes sous-jacents responsables de l'apparition de la macroségrégation dans le processus de coulée des lingots. En élucidant l'impact de la masselotte sur les cinétiques de solidification, cette recherche améliore la compréhension de la conception du processus de coulée pour des lingots spécifiques. Ces résultats ont le potentiel d'améliorer la qualité de la production de grands lingots et d'accroître la productivité des aciers à haute valeur ajoutée ou d'autres alliages sujets à la macroségrégation. De plus, l'optimisation de l'utilisation du matériau de la masselotte et la maximisation de l'efficacité des matériaux peuvent être réalisées grâce à la production de masselottes et de corps de lingots de haute qualité.

Mots-clés: Macroségrégation, Masselotte, Solidification, Lingot d'acier de grande taille, Expérience, Simulation, Efficacité des matériaux

Numerical simulation and experimental validation of the effects of hot top characteristics on macrosegregation in large-size ingots of high-strength steel

Neda GHODRATI

ABSTRACT

This research investigates the impact of hot top characteristics on macroscale defects, specifically focusing on the severity and formation of macrosegregation in a 12MT medium-carbon high-strength steel ingot. Macrosegregation poses significant challenges due to its resistance to elimination in subsequent processing stages, leading to non-homogeneities and potential product rejection, particularly in the case of large ingots. Critical measures involve the identification and control of macrosegregation sources such as alloy compositions, casting parameters, technique, and cast ingot setup configuration.

The hot top, situated at the upper part of the mold, comprises refractory sideboards on the sidewalls and a topping compound or board at the ingot's apex, playing a pivotal role within the cast ingot setup. Its functions include facilitating continuous feeding during casting, regulating heat flow at the ingot's apex during solidification, and providing a region for segregates and non-metallic inclusions to accumulate. Traditionally, hot top is cut to flatten the ingot's top surface and remove impurities. This process involves trimming off excess material from the hot top to achieve a smooth, clean surface on the ingot, thereby removing segregation and impurities from the top of the ingot.

In order to better understand the impact of hot top geometry on the extent and severity of macrosegregation, the casting and solidification process was simulated and experimentally validated. The commercial three-dimensional finite element modeling (FEM) code THERCAST® was used for the simulations. All the thermo-mechanical phenomena associated with mold filling, cooling in and out of the mold, and solidification based on a volume average two-phase model were simulated in the present study.

The model accounted for interactions between solute and heat transport coupled with flow driven by thermo-solutal convection and shrinkage-induced flow. Modeling boundary conditions were established based on industrial practices, incorporating considerations such as local friction, thermal exchange between steel and mold components, and mutual exchange among mold components within the casting system. Temperature-dependent parameters of all relevant materials were determined through combined approaches involving computational thermodynamics programs, materials software JMatPro® version 11.0, literature reports, THERCAST® software material database, industry sources, and theoretical calculations.

The casting setup for a 12 MT ingot, including the original industrial hot top configuration, underwent simulation, and the software and model's validity were confirmed through comprehensive experimental work on real industrial-size ingots. Experimental planning was meticulously devised based on key prediction results and casting parameters. To achieve this, a comprehensive set of tests was conducted. Chemical composition measurements were

performed on the entire half-longitudinal section of the ingot to assess the segregation ratio of all elements. Macro etching was applied to the other half longitudinal section to reveal the macrosegregation pattern, while Dye Penetrant Inspection (DPI) was conducted on the half of the longitudinal section to detect microporosity. Additionally, monitoring of mold surface temperature and shrinkage cavity measurements were strategically carried out.

The investigation into the hot top configuration encompassed various aspects, including geometry, thermal conditions, and their combinations, utilizing the validated model for thorough analysis. The investigation focused on several variables within the hot top configuration, including hot top height, sideboard height, sideboard thermal conductivity, and preheating of the hot top, across eight various scenarios of the hot top configuration. These variables altered factors such as the mold mass ratio, mold slender ratio, and the thermal regime of the hot top, consequently affecting solidification kinetics.

Changes in the hot top configuration exerted significant influence on various aspects of the casting process, including the liquid metal velocity field, size, and shape of vortexes, cooling rate, liquidus temperature, temperature distribution, heat flux, solidification time, columnar to equiaxed transition position, and solidification profile. These factors collectively impacted the severity of macrosegregation within both the hot top and the ingot body. Additionally, microporosity and shrinkage cavity, two other critical casting defects, were investigated alongside macrosegregation to propose a solidification time criterion as a guideline for hot top configuration. A modified design was proposed to minimize macrosegregation, microporosity, and cavity formation.

This study provides deep insights into the underlying mechanisms responsible for macrosegregation occurrence in the ingot casting process. By elucidating the impact of the hot top on solidification kinetics, this research enhances understanding of the casting process design for specific ingots. These findings hold the potential for improving the quality of large ingot production and enhancing the productivity of high-value-added steels or other alloys prone to macrosegregation. Moreover, optimizing the use of hot top material and maximizing material efficiency can be achieved through the production of high-quality hot tops and ingot bodies.

Keywords: Macrosegregation, Hot top, Solidification, Large-size steel ingot, Experiment, Simulation, Material efficiency

TABLE DES MATIÈRES

	Page
INTRODUCTION	1
CHAPITRE 1 REVUE DE LITTÉRATURE	8
1.1 Introduction à la coulée des lingots	8
1.2 Solidification du lingot	10
1.3 Macroségrégation.....	14
1.3.1 Mesures pour contrôler la macroségrégation.....	18
1.4 Porosité de rétraction et cavité de rétraction.....	22
1.5 La transition de colonnaire à équiaxe	25
1.6 Modélisation de la macroségrégation	27
1.6.1 Amélioration de la modélisation de la macroségrégation.....	29
1.6.1.1 Les modèles développés par Flemings et al.....	29
1.6.1.2 Modèles multi-domaines.....	33
1.6.1.3 Modèles continus / modèles à domaine unique (continuum models / single-domain models)	34
1.6.1.4 Avancées récentes dans la modélisation	38
1.6.2 Limitations des macromodèles	40
1.6.2.1 Modèle, géométrie et maillages	41
1.6.2.2 Paramètres d'entrée	41
1.6.2.3 Modèles auxiliaires	42
1.6.2.4 Déformation thermomécanique des solides	44
1.6.3 Méthodologies simplifiées	45
CHAPITRE 2 MATERIAUX ET MÉTHODES EXPÉIMENTALES	47
2.1 Introduction.....	47
2.2 Mesures expérimentales	47
2.3 Établissement du modèle	56
2.3.1 Critères de formation de la microporosité	65
2.3.2 Critères de formation de macroporosité.....	66
2.3.3 Détermination de la géométrie du modèle	67
2.3.4 Conditions aux limites (boundary conditions).....	69
2.3.5 Optimisation de la taille du maillage	70
2.3.6 Détermination des paramètres d'entrée	77
2.4 La validation du modèle.....	80
2.5 Étude de la masselotte.....	83
2.5.1 Géométrie de la masselotte	84
2.5.2 Régime thermique de la masselotte	86
2.5.3 Le régime thermique et la géométrie de la masselotte.....	90
CHAPITRE 3 INFLUENCE OF HOT TOP HEIGHT ON MACROSEGREGATION AND MATERIAL	

YIELD IN A LARGE SIZE CAST STEEL INGOT USING MODELING AND EXPERIMENTAL VALIDATION.....		94
3.1	Résumé.....	94
3.2	Introduction.....	95
3.3	Procédure expérimentale.....	98
3.4	Établissement du modèle	101
3.5	Résultats et discussions.....	105
3.5.1	Validation du modèle.....	105
3.5.2	Caractéristiques de la masselotte et macroségrégation.....	109
3.5.3	Pression du liquide et écoulement du fluide	112
3.5.4	Taux de refroidissement.....	117
3.5.5	Température du liquidus	119
3.6	Conclusion	123
3.7	Contributions des auteurs.....	123
3.8	Remerciements.....	124
3.9	Financement.....	124
3.10	Conflits d'intérêts	124
CHAPTIRE 4 INFLUENCE OF THE HOT TOP THERMAL REGIME ON THE SEVERITY AND EXTENT OF MACROSEGREGATION IN LARGE-SIZE STEEL INGOTS		126
4.1	Résumé.....	126
4.2	Introduction.....	127
4.3	Matériaux et méthodes.....	130
4.4	Formulation du modèle de solidification	132
4.5	Conditions limites et paramètres d'entrée	140
4.6	Conceptions de masselotte	141
4.7	Résultats et discussions.....	143
4.7.1	Temps de solidification.....	144
4.7.2	Température	151
4.7.3	Macroségrégation.....	156
4.8	Conclusions.....	162
4.9	Contributions des auteurs.....	163
4.10	Financement.....	164
4.11	Déclaration de disponibilité des données.....	164
4.12	Conflits d'intérêts	164
4.13	Appendice I	164
4.14	Appendice II.....	166
CHAPTIRE 5 INFLUENCE OF HOT TOP GEOMETRY ON COLUMNAR-TO-EQUIAxed TRANSITION IN A 12 MT STEEL INGOT		170
5.1	Résumé.....	170

5.2	Introduction.....	171
5.3	Matériaux et méthodes	174
5.3.1	Expériences	174
5.3.2	Modélisation	178
5.3.3	Configuration du modèle par éléments finis (MEF)	179
5.3.3.1	Critères de formation de la microporosité	187
5.3.3.2	Critères de formation de macroporosité.....	187
5.3.4	Validation du modèle.....	188
5.3.5	Influence de la géométrie de la masselotte	192
5.4	Résultats et discussions.....	194
5.4.1	Impact des variations de la masselotte sur la TCE	194
5.4.2	Critère de temps de solidification	200
5.4.2.1	La microporosité et la TCE.....	203
5.4.2.2	La cavité de rétreint et la TCE	207
5.4.2.3	La macroségrégation et la TCE.....	210
5.4.3	Bassin de métal en fusion et TCE	214
5.5	Conclusions.....	220
5.6	Remerciements.....	221
5.7	Conflits d'intérêts	221
5.8	Appendice I.....	221
	CONCLUSION	225
	RECOMMANDATION	230
ANNEXE I	MODELING OF THE INFLUENCE OF HOT TOP DESIGN ON MICROPOROSITY AND SHRINKAGE CAVITY IN LARGE-SIZE CAST STEEL INGOTS	233
AI.1	Résumé.....	233
AI.2	Introduction.....	234
AI.3	Matériaux et méthodes.....	236
AI.4	Résultats et discussions.....	238
AI.4.1	Porosité en ligne centrale	238
AI.4.2	Cavité de rétraction	240
AI.4.3	Temps de solidification.....	242
AI.5	Conclusions.....	243
AI.6	Remerciements.....	244
ANNEXE II	INFLUENCE OF HOT TOP GEOMETRY ON THE SOLIDIFICATION TIME AND MACROSEGREGATION IN LARGE SIZE CAST INGOT USING FINITE ELEMENT MODELING	245
AII.1	Introduction.....	245
AII.2	Matériaux et méthodes.....	246
AII.3	Résultats et discussions.....	248
AII.3.1	Macroségrégation.....	248

AII.3.2 Temps de solidification.....	249
AII.4 Conclusion	250
AII.5 Remerciements.....	250
ANNEXE III MISE EN ŒUVRE DES RÉSULTATS OBTENUS À PARTIR DES LINGOTS D'ACIER DE 12 MT DANS DES LINGOTS D'ACIER PLUS IMPORTANTS DE 20 MT POUR RÉDUIRE LA MACROSEGREGATION EN MODIFIANT LA MASSELOTTE	251
AIII.1 Introduction.....	251
AIII.2 Experimental measurements	252
AIII.3 Modélisation	254
AIII.4 Validation du modèle.....	259
AIII.5 Configurations de la masselotte	262
AIII.6 Résultats et discussions.....	265
AIII.6.1 Macroségrégation.....	265
AIII.6.2 Microporosité	271
AIII.7 Conclusion	272
LIST OF REFERENCES.....	274

LISTE DES TABLEAUX

	Page	
Tableau 2.1	La composition chimique nominale en wt. % de l'alliage AISI 4130 modifié	50
Tableau 2.2	Conditions limites thermiques du modèle.....	70
Tableau 2.3	Composition chimique de l'acier 25CrMo4 (wt.%)	71
Tableau 2.4	Modèles étudiés et maillages	71
Tableau 2.5	Les propriétés du système de coulée.....	78
Tableau 2.6	Propriétés de thermodiffusion pour chaque élément solutal	79
Tableau 2.7	Les paramètres d'entrée initiaux.....	80
Tableau 2.8	Le résumé des propriétés pour les configurations de masselotte analysées	85
Tableau 2.9	Le résumé des propriétés pour les configurations de masselotte analysées	86
Tableau 2.10	Spécifications de la masselotte dans différents designs.....	89
Tableau 2.11	Spécifications de la masselotte dans différents designs.....	91
Tableau 3.1	Composition chimique initiale du lingot en acier Cr-Mo, tous en wt.%.....	99
Tableau 3.2	Paramètres d'entrée pour la simulation	104

Tableau 3.3	Caractéristiques de la masselotte dans la conception originale et dans la nouvelle conception	110
Tableau 4.1	Composition chimique nominale de l'acier étudié (wt.%)	130
Tableau 4.2	Équations du modèle de solidification	136
Tableau 4.3	Somme cumulative des concentrations élémentaires dans les nœuds totaux après la solidification	139
Tableau 4.4	Conditions aux limites thermiques(TherCast2.1®, 2021)	141
Tableau 4.5	Specifications de la masselotte dans différentes conceptions	142
Tableau 4.6	Nomenclature	165
Tableau 4.7	Ratio de ségrégation du carbone (expérience et simulation) à la fin de la solidification dans la masselotte, en bas et en ligne médiane de l'lingot	167
Tableau 4.8	Ratio de ségrégation du manganèse (expérience et simulation) à la fin de la solidification dans la zone de la masselotte, en haut et au milieu du lingot	168
Tableau 5.1	La position des thermocouples sur la surface du moule	177
Tableau 5.2	Caractéristiques des configurations de conception étudiées	193
Tableau 5.3	Épaisseur solide et fraction solide à la position de la TCE au fond.....	199
Tableau 5.4	Épaisseur solide et fraction solide à la position du TCE au milieu.....	200
Tableau 5.5	Épaisseur solide et fraction solide à la position du TCE en haut.....	200

Tableau 5.6	Temps de solidification total pour chaque configuration à la fin de la solidification	202
Tableau 5.7	Paramètres d'entrée pour la simulation	222
Tableau 5.8	Conditions de limite thermique de la simulation	223

LISTE DES FIGURES

	Page
Figure 1.1 Schéma de la disposition pour la coulée par le bas de plusieurs lingots	9
Figure 1.2 Illustration de la structure du lingot indiquant la zone de peau (chill zone), la zone dendritique columnaire (columnar zone) et la zone équiaxe (equiaxed zone).....	12
Figure 1.3 Illustrations schématiques (a) Solidification dendritique columnaire dans les alliages (b) Structures d'lingots columnaires et équiaxes	13
Figure 1.4 Un motif de macroségrégation courant observé dans les lingots d'acier (a) Une empreinte de soufre d'un lingot d'acier de 10.5 tonnes avec une composition nominale de 0.30 % en poids de C (b) Une représentation schématique illustrant différents types de macroségrégation	15
Figure 1.5 Illustration des mécanismes responsables du transport de masse lors de la solidification des lingots (a) Courants de convection dans le liquide interdendritique, avec des symboles indiquant l'enrichissement (+) ou l'appauvrissement (-) en soluté (b) Sédimentation des grains ou mouvement solide. (c) Écoulement de liquide pour compenser le retrait de solidification (d) Déformation de la zone semi-solide. Il est important de noter que le solide columnaire représenté dans (a), (c) et (d) provient de la paroi du moule	16
Figure 1.6 (a) La lingot de 100 tonnes en 30Cr2Ni4MoV, (b) La surface sectionnée, (c) La porosité de rétraction de la ligne centrale, et (d) L'examen macroscopique du lingot gravé. Notamment, sur l'image (b), la zone de la porosité typique de rétraction de la ligne centrale est mise en évidence avec un cercle rouge.....	24
Figure 1.7 La solidification directionnelle progresse de gauche à droite. Ce schéma représente la compétition entre la croissance columnaire et équiaxe. Le front columnaire avance à une vitesse indiquée par V , tandis que le gradient de température à travers la zone de solidification est représenté par G . ΔTN signifie le sous-refroidissement nécessaire pour la nucléation hétérogène sur les particules d'inoculant dans le liquide, tandis que ΔTC	

indique le sous-refroidissement nécessaire pour la croissance du front columnaire.....	27
Figure 1.8	Diagramme illustrant l'élément de volume dans la zone pâteuse considéré lors de la formulation des équations de conservation
	30
Figure 1.9	La représentation d'un grain à l'aide d'une enveloppe enveloppant à la fois un squelette solide et un liquide interdendritique
	37
Figure 1.10	Comparaison des graphiques de fraction liquide en fonction de la température pour un alliage de 0,5% C-3% Mn-3% Mo (wt%) obtenus à partir de différents modèles de microségrégation
	43
Figure 2.1	(a) Installation du lingot industriel coulé, (b) La masselotte du moule 12 MT, (c) La masselotte vue de dessus, et (d) Le lingot de 12 MT
	49
Figure 2.2	(a) La position des 7 thermocouples (TC1 à TC7) sur la surface externe du moule du lingot de 12 MT, (b) Le moule, ainsi que les thermocouples, est installé dans le système de coulée.....
	50
Figure 2.3	(a) L'ingot de 12 MT post-solidification, avec une ligne pointillée rouge indiquant la section de découpe. (b) Section longitudinale centrale d'une épaisseur de 25 mm, (c) La moitié gauche de la section longitudinale est divisée en 10 blocs utilisés pour la macrogravure. Une image agrandie met en évidence la bande de ségrégation sur la ligne médiane, (d) La moitié gauche de la section longitudinale est divisée en 10 blocs utilisés pour l'inspection par ressuage. Une image agrandie illustre la microporosité dans les blocs indiqués, (e) La moitié droite de la section longitudinale est segmentée en 370 blocs pour la carte de macroségrégation. Une image agrandie affiche les échantillons de coupe de l'ingot pour la cartographie chimique.....
	56
Figure 2.4	(a) Modèle 3D complet à 360° créé pour reproduire le système de coulée réel (Vue de face de l'ensemble du système), (b) Composants individuels du système présentant le modèle à 90°, (c) Moule en fonte avec grande extrémité vers le haut comportant 16 ondulations (ou nervures) sur ses surfaces intérieures, (d) Lingot polygonal présentant 16 nervures sur sa surface extérieure, avec vues de dessus et de dessous, (e) Composants variés constituant la configuration de coulée
	69

Figure 2.5	90° Modèle thermique (90°M1), (a) Image du maillage avec 69444 éléments (taille de grille de 40 mm), (b) Schéma de la fraction liquide environ 1 heure après l'étape de coulage, (c) Temps de solidification total prédit à partir du calcul thermique (5 h 41 min)	72
Figure 2.6	Modèle thermique à 90° (90°M2), (a) Image du maillage avec 129943 éléments (taille de la grille de 30 mm), (b) Schéma de la fraction liquide environ 1 heure après l'étape de coulage, (c) Temps de solidification total prédit par calcul thermique (5 h 32 min)	73
Figure 2.7	Modèle thermique à 90° (90°M3), (a) Image du maillage avec 215811 éléments (taille de maillage de 30 mm avec un affinement de 10 mm), (b) Modèle de fraction liquide environ 1 heure après le stade de coulage, (c) Temps total de solidification prédit par le calcul thermique (4 h 54 min).....	74
Figure 2.8	Modèle thermomécanique à 90° (90°M4), (a) Image de la maille avec 215 811 éléments (taille de maille de 30 mm avec un raffinement de maille de 10 mm), (b) Motif de fraction liquide environ 1 heure après l'étape de coulée, (c) Temps total de solidification prévu à partir du calcul thermomécanique (6 h 2 min)	75
Figure 2.9	Modèle thermohydraulique à 90° (90°M5), (a) Image de maillage avec 4912171 éléments (taille de grille de 20 mm), (b) Motif de fraction liquide environ 1 heure après l'étape de coulée, (c) Temps total de solidification prédit à partir du calcul thermomécanique (5 h 15 min).....	76
Figure 2.10	90° modèle thermomécanique (OD), (a) Image du maillage avec 235698 éléments (taille de maille de 30 mm avec un affinement moyen de 15 mm à 8 mm), (b) Motif de fraction liquide environ 1 heure après la phase de coulée, (c) Temps total de solidification prévu à partir du calcul thermomécanique (5 h 11 min).....	77
Figure 2.11	(a) Conception originale (OD) comme référence, la partie de la masselotte est présentée dans une image agrandie, (b) La nouvelle configuration implique une augmentation de la hauteur de la masselotte, la partie de la masselotte est présentée dans une image agrandie	85

Figure 2.12	(a) Conception d'origine (OD) en tant que référence, la partie de la masselotte est présentée dans une image agrandie, (b) La nouvelle configuration implique une diminution de la hauteur de la masselotte, la partie de la masselotte est présentée dans une image agrandie.....	86
Figure 2.13	(a) Conception originale (OD) en tant que référence, la partie masselotte est présentée dans une image agrandie, (b) La nouvelle configuration implique un préchauffage (200 °C) dans la masselotte, la partie masselotte est présentée dans une image agrandie	87
Figure 2.14	(a) Conception originale (OD) en tant que référence, la partie masselotte est présentée dans une image agrandie, (b) La nouvelle configuration implique la réduction de la conductivité thermique des panneaux latéraux, la partie masselotte est présentée dans une image agrandie	88
Figure 2.15	(a) Conception originale (CO) comme référence, la partie de la masselotte est présentée dans une image agrandie, (b) La nouvelle configuration implique l'insertion d'un panneau latéral supplémentaire avec le même matériau, la partie de la masselotte est présentée dans une image agrandie.....	88
Figure 2.16	(a) Conception originale (CO) comme référence, la partie de la masselotte est présentée dans une image agrandie, (b) La nouvelle configuration implique l'insertion d'un panneau latéral supplémentaire et le changement du matériau réfractaire initial, la partie de la masselotte est présentée dans une image agrandie	89
Figure 2.17	(a) Design d'origine (OD) comme référence, la partie de la masselotte est présentée dans une image agrandie, (b) La nouvelle configuration implique une augmentation de la hauteur de la masselotte et de la hauteur du panneau latéral, la partie de la masselotte est présentée dans une image agrandie.....	90
Figure 2.18	(a) Design original (OD) comme référence, la partie de la masselotte est présentée dans une image agrandie, (b) La nouvelle configuration implique une augmentation de la hauteur de la masselotte vers le corps de la lingotière et de la hauteur du panneau latéral, la partie de la masselotte est présentée dans une image agrandie	91

Figure 3.1	Image d'assemblage du lingot de 12 tonnes, du moule et de la masselotte (mode 180°)	99
Figure 3.2	(a) Lingot de 12 MT après coulée, la ligne en pointillés rouges présente la position de la section de découpe, (b) Section longitudinale centrale, le côté droit a été utilisé pour la cartographie de la macroségrégation et le côté gauche a été utilisé pour la macro-attaque, (c) Blocs de découpe du lingot pour la macro-attaque, (d) Échantillons de découpe du lingot pour la cartographie chimique et (e) Image agrandie montrant la masselotte coupée en petits échantillons pour l'analyse	100
Figure 3.3	(a) Distribution du maillage du modèle à 90°, (b) Schéma de température à gauche et schéma de vitesse à droite après l'allumage des couvertures exothermiques à la fin du remplissage.....	103
Figure 3.4	Cavité de retrait du lingot de 12 MT à la fin de la solidification : (a) Résultat prédict, (b) Résultat d'un lingot réel	106
Figure 3.5	Carte de la macroségrégation de carbone : (a) Résultat prédict (modèle à 90°), (b) Résultat expérimental	108
Figure 3.6	Ratio de macroségrégation du carbone à la fin de la solidification : (a) Le long de l'axe radial au niveau de la masselotte (hauteur de 1659 mm à partir du bas), (b) Le long de l'axe radial en bas (hauteur de 90 mm à partir du bas), (c) Le long de l'axe central, du bas vers le haut à une distance de 300 mm sous la masselotte, et (d) Le long de l'axe central, du bas vers le haut à une distance de 600 mm au-dessus du bas du lingot.....	109
Figure 3.7	Temps de solidification à la fin de la solidification dans OD et ND.....	111
Figure 3.8	Ratio de macroségrégation du carbone lorsque la solidification est terminée dans l'OD et le ND : (a) le long de l'axe radial au niveau de la masselotte (hauteur de 1691 mm depuis le bas) et (b) le long de l'axe radial au fond (hauteur de 170 mm depuis le bas)	112
Figure 3.9	Pression liquide statique dans OD et ND au point a, à une hauteur de 170 mm depuis le bas et à 378 mm dans la direction radiale depuis le centre	113

Figure 3.10	Fraction liquide et vecteurs de vitesse du fluide de OD et ND à une fraction solide de 33 %, (b) Évolution de l'amplitude de la vitesse du liquide dans OD et ND en L1, (c) L2, (d) L3, (e) L4.....	115
Figure 3.11	Fractions liquides et vecteurs de vitesse des fluides de OD et ND à 45% de fractions solides	117
Figure 3.12	aux de refroidissement du liquide à l'état pâteux dans OD et ND : (a) à 61 mm dans la direction radiale à partir du centre dans la zone de la masselotte (hauteur de 1691 mm à partir du bas), (b) à 123 mm dans la direction radiale à partir du centre dans la zone de la masselotte (hauteur de 1691 mm à partir du bas), (c) à 378 mm dans la direction radiale à partir du centre du lingot au bas du corps du lingot (hauteur de 170 mm à partir du bas) et (d) à 441 mm dans la direction radiale à partir du centre du lingot au bas du corps du lingot (hauteur de 170 mm à partir du bas)	119
Figure 3.13	Température liquidus en °C dans OD et ND à : (a) Dans la direction radiale, à une hauteur de 1691 mm depuis le bas dans la zone de la masselotte, (b) Dans la direction radiale, à une hauteur de 170 mm depuis le bas dans la zone du corps du lingot.....	121
Figure 3.14	Intervalle de solidification en °C dans OD et ND à : (a) À une demi-distance radiale du mur du lingot dans la zone de la masselotte (à une hauteur de 1691 mm depuis le bas), (b) À une demi-distance radiale du mur du lingot dans la zone du corps du lingot (à une hauteur de 170 mm depuis le bas).....	122
Figure 4.1	(a) La configuration du lingot coulé de 12 MT (modèle à 180°) ; (b) Partie supérieure de la masselotte en industrie ; et (c) L'approche de préparation des échantillons	131
Figure 4.2	La largeur de la zone pâteuse dans la conception initiale pendant la solidification.....	138
Figure 4.3	Évolution de la concentration en carbone pendant la solidification à l'emplacement indiqué par un cercle rouge.....	140

Figure 4.4	(a) Conception originale : OD, (b) ND1, (c) ND2, (d) ND3, et (e) ND4	143
Figure 4.5	Le temps total de solidification est indiqué du côté gauche et le temps local de solidification du côté droit. (a) OD, (b) ND1, (c) ND2, (d) ND3 et (e) ND4	147
Figure 4.6	Différences en pourcentage du temps total de solidification pour chaque conception par rapport à la conception originale	148
Figure 4.7	L'extension du temps total de solidification par rapport à OD dans les zones centrale et supérieure (contours rouges, jaunes et verts dans la Figure 4.5) pour chacune des conceptions.....	149
Figure 4.8	Le flux de chaleur dans la direction radiale du centre vers la surface (a) à une hauteur de 1679 mm à partir du bas du lingot et (b) à une hauteur de 820 mm à partir du bas du lingot	150
Figure 4.9	La valeur maximale de la différence de température dans la direction radiale pour chacun des designs par rapport à la OD au fond, au milieu, en haut, à l'interface de la masselotte et du corps, et à la masselotte.....	152
Figure 4.10	Profil de température du côté droit et profil de flux thermique du côté gauche à la fin de la solidification (100 % de solidification), indiquant le taux de transfert de chaleur pendant la solidification pour (a) OD, (b) ND1, (c) ND2, (d) ND3, et (e) ND4	155
Figure 4.11	Comportement du flux de chaleur dans la direction radiale du centre vers la surface (a) Fond de lingot, (b) Sommet du lingot, (c) Interface masselotte/corps du lingot, et (d) Masselotte.....	156
Figure 4.12	Ratio de macroségrégation du carbone, y compris le maximum et le minimum, dans (a) La direction radiale dans la zone inférieure du lingot, (b) La direction radiale dans la partie médiane du lingot, (c) La direction radiale dans la partie supérieure du lingot, (d) La direction radiale dans la région de la masselotte, et (e) La direction verticale au centre du lingot	159

Figure 4.13	(a) Les profils du ratio de ségrégation du carbone de OD, ND1, ND2, ND3 et ND4 à la fin de la solidification ; (b) Profils du ratio de ségrégation du carbone et de fraction liquide à la fin du remplissage ; (c) Carte expérimentale du ratio de ségrégation du carbone dans la masselotte, où la position de (c) est marquée avec le cadre rouge	162
Figure 4.14	Les zones du haut, du bas et de la ligne médiane du lingot (telles qu'indiquées par les lignes rouges et les boîtes rouges) ont été sélectionnées pour analyser la ségrégation du carbone.....	167
Figure 4.15	Carte de ségrégation du manganèse (en pourcentage) : côté gauche—simulation ; côté droit—expérience	168
Figure 5.1	Configuration de la coulée de lingots pour 12MT, (a) Position des 7 thermocouples (TC1 à TC7), (b) Configuration de coulée de lingots par le bas, (c) Matériau réfractaire dans la masselotte, (d) La masselotte, (e) Lingot de 12 MT	176
Figure 5.2	Plan de découpe du lingot de 12 MT.....	177
Figure 5.3	Inspection par ressuage (DPI) sur la demi-section longitudinale d'un lingot de taille réelle, observation de la microségrégation sur les blocs de la ligne centrale supérieure	178
Figure 5.4	Établissement des modèles de coulée de 12 MT pour la modélisation par éléments finis (FE) : (a) Modèle construit sur la base du système de coulée réel avec ; (b) Représentation de l'ingot dans le modèle avec un moule transparent ; (c) Modèle à 90° utilisé représentant 1/4 de l'ensemble du système de coulée	179
Figure 5.5	Profils de température sur la surface extérieure du moule pendant la solidification pour un lingot de 12 MT : comparaison entre les mesures expérimentales avec les thermocouples (TC) et les températures prédictives dérivées de la simulation thermomécanique utilisant des capteurs (sensors)	190

Figure 5.6	Risque prévu de formation de microporosités à la ligne centrale du lingot de 12MT, les critères de valeur Niyama étant illustrés par la ligne pointillée rouge	191
Figure 5.7	Modèle de macroségrégation du carbone par simulation (à gauche) et expérience (à droite)	192
Figure 5.8	Les conceptions étudiées : (a) OD : originale ou de référence, (b) ND1 : réduction de la hauteur de la masselotte, (c) ND2 : augmentation de la hauteur de la masselotte et de la hauteur des panneaux latéraux, (d) ND3 : utilisation de deux réfractaires, (e) ND4 : augmentation de la hauteur de la masselotte vers le corps	194
Figure 5.9	Le taux de solidification (mm/s) par rapport au pourcentage de fraction solide a été tracé pour différents conceptions, avec (a) Les emplacements des zones inférieure, moyenne et supérieure indiqués, (b) La zone inférieure, (c) La zone médiane, et (d) La zone supérieure	197
Figure 5.10	Le gradient thermique dans le front solide (°C/s) par rapport au pourcentage de fraction solide a été tracé pour différentes conceptions aux (a) Zones Inférieure, (b) Moyenne, et (c) Supérieure, comme mentionné dans la Figure 5.9a	198
Figure 5.11	Ratio du temps total de solidification (entre la masselotte et le corps) pour chaque conception.....	203
Figure 5.12	Risque prédit de formation de microporosité sur la ligne centrale du lingot de 12 MT pour chaque configuration.....	204
Figure 5.13	Risque de formation de microporosité le long de la ligne centrale du lingot pour chaque conception	206
Figure 5.14	Le pourcentage des zones exemptes de risque de formation de microporosité le long de la ligne de dispersion pour chaque conception	207
Figure 5.15	La déformation de surface est causée par le rétreint à la fin de la solidification dans le lingot.....	208

Figure 5.16	Le taux de refroidissement au point rouge est situé à la position la plus haute le long de la ligne centrale de lingot pour chaque conception	209
Figure 5.17	(a) Évolution du pourcentage de macroségrégation en carbone dans la direction radiale au bas de lingot, (b) Plage de pourcentage de macroségrégation en carbone au bas du lingot, (c) Évolution du pourcentage de macroségrégation en carbone dans la direction radiale au milieu du lingot, (d) Plage de pourcentage de macroségrégation en carbone au milieu du lingot, (e) Évolution du pourcentage de macroségrégation en carbone dans la direction radiale en haut du lingot, (f) Plage de pourcentage de macroségrégation en carbone en haut du lingot. Les positions du bas, du milieu et du haut sont indiquées dans la Figure 5.9a	212
Figure 5.18	Schéma de macroségrégation du carbone à la fin de la solidification pour chaque configuration.....	213
Figure 5.19	Fraction liquide et vecteur de vitesse du flux de fluide pour chaque configuration, (a) 1 heure après le versement, (b) 2 heures après le versement, (c) 3 heures après le versement, et (d) 4 heures après le versement	218
Figure 5.20	(a) Largeur du métal en fusion, (b) Hauteur du métal en fusion à 1 heure (h), 2 heures (h) et 3 heures (h) après le versement	219
Figure 5.21	L'épaisseur de la zone pâteuse au point de transition de colonnaire à équiaxe au bas, au milieu et en haut du lingot pour chaque conception	220

LISTE DES ABRÉVIATIONS, SIGLES ET ACRONYMES

3D	Trois Dimensions
AISI	Institut Américain du Fer et de l'Acier
ALE	Arbitraire Lagrangien-Eulérien
TCE	Transition de Colonnaire à Équiaxe
DPI	Inspection par ressuage
EVP	Élasto-Visco-Plastique
EF	Élément Fini
MEF	Modélisation par Éléments Finis
LSRE	Équation de Redistribution Locale des Solutés
MT	Métrique Tonnes
ND	Nouveau Design
OD	Design Original
SDAS	Espacement des Bras des Dendrites Secondaires
TC	Thermocouple
TH	Modèle Thermohydraulique
TM	Modèle Thermomécanique
TST	Temps Total de Solidification
VP	Visco-plastique

LISTE DES SYMBOLES ET UNITÉS DE MESURE

Symbol	Unit	Description
α	1/K	Coefficient de dilatation thermique linéaire
α	-	Nombre de Fourier de rétrodiffusion
β	-	Retrait de solidification
β_i	wt.%/K	Coefficient de dilatation solutale du soluté i
β_T	1/K	Coefficient de dilatation thermique (/K)
ε_r	-	Émissivité de l'acier
ε_{mold}	-	Émissivité du moule
$\dot{\varepsilon}$	-	Taux de déformation plastique équivalent
$\bar{\varepsilon}$	-	Déformation plastique équivalente
$\dot{\varepsilon}$	s ⁻¹	Tenseur de taux de déformation
η_l	-	Viscosité dynamique du liquide
λ	W/(m.K)	Conductivité thermique
λ_{air}	W/(m.K)	Conductivité thermique de l'espace d'air
λ_s	W/(m.K)	Conductivité thermique du laitier
μ	Pa·s	Viscosité dynamique du fluide
v	m/s	Vitesse d'avancement linéaire locale de l'interface solide/liquide
ν	-	Coefficient de Poisson
ρ	kg/m ³	Densité
ρ_0	kg/m ³	Densité de référence (densité au liquidus)
ρ_l	kg/m ³	Densité du liquide
ρ_s	kg/m ³	Densité du solide
$\bar{\sigma}$	MPa	Contrainte d'écoulement équivalente de von Mises
σ_s	MPa	Contrainte de limite d'élasticité
σ_n	MPa	Contrainte normale
σ_T	W/m ² /K	Constante de Stefan-Boltzmann
ω_0	wt.%	Composition nominale
ω_0^i	wt.%	Concentration nominale du soluté i
ω^i	wt.%	Concentration locale du soluté i
ω_l^i	wt.%	Concentration du soluté i dans le liquide
ω_s	wt.%	Concentration du soluté à l'interface solide/liquide
$\Delta\varepsilon_{tr}$	-	Retrait de solidification
ΔH	kJ/kg	Enthalpie de la réaction
∇T	°C or K	Gradient de température
∇p	Pa	Gradient de pression
A	m ²	Section transversale de l'écoulement
C_p	J/kg/°C	Capacité thermique massique

D	mm^2/s	Coefficient de diffusion
D_l^i	mm^2/s	Coefficient de diffusion du soluté i dans le liquide
D_l	mm^2/s	Coefficient de diffusion dans la phase liquide
d_2	μm	Espacement des bras des dendrites secondaires
E	GPa	Module d'Young
e_{air}	mm	Épaisseur de la lame d'air
e_s	mm	Épaisseur du laitier
f	-	Fraction de phase
f_l	-	Fraction volumique de liquide
f_s	-	Fraction volumique de solide
f_{s0}	-	Seuil de la fraction solide
f_{lni}	-	Seuil de Niyama fraction liquide
\dot{f}_s	-	Taux de variation de la fraction solide
g	m/s^2	Accélération gravitationnelle
h	$\text{W}/\text{m}/^\circ\text{C}$	Coefficient de transfert de chaleur
h_{cv}	$\text{W}/\text{m}/^\circ\text{C}$	Coefficient de transfert de chaleur par convection
j	mol/s	Flux de soluté
k	-	Coefficient de partage à l'équilibre
K	m^2	Perméabilité de la zone pâteuse (mushy zone)
k^i	-	Coefficient de partage du soluté i
K_{perm}	m^2	Perméabilité isotrope
K_s	-	Consistance viscoplastique dans le solide
K^{vp}	-	Consistance viscoplastique du matériau
L	m	Longueur sur laquelle la chute de pression se produit
L_f	kJ/kg	Chaleur latente de fusion
m	-	Coefficient de sensibilité à la vitesse de déformation
m_l	-	Pentes de la ligne liquidus
m_l^i	-	Pente liquidus du soluté i
m_s^i	-	Pente solidus du soluté i
N	-	Nombre d'éléments solutés dans l'acier
n	-	Exposant de durcissement par déformation
n	-	Vecteur normal unitaire sortant
p	MPa	Pression
q	W	Flux de chaleur
Q_t	m^3/s	Débit total
R^i	-	Ratio de ségrégation du soluté i
R_v	$1/\text{s}$	Vitesse isotherme
R_{eq}	$(\text{W}/\text{m}^2/^\circ\text{C})^{-1}$	Résistance au transfert de chaleur
R_0	$(\text{W}/\text{m}^2/^\circ\text{C})^{-1}$	Résistance thermique nominale
R_{air}	$(\text{W}/\text{m}^2/^\circ\text{C})^{-1}$	Résistance thermique de l'interstice d'air
R_{rad}	$(\text{W}/\text{m}^2/^\circ\text{C})^{-1}$	Résistance au transfert de chaleur par rayonnement
s	-	Tensor de contraintes de Cauchy
S	m^2	Surface

t	s	Temps
t_f	s	Temps total de solidification de la masselotte
t_b	s	Temps total de solidification du corps de lingot
T	°C or K	Température
T_{conf}	°C	Température de cohérence
T_{ext}	°C	Température environnementale extérieure
T_m	°C	Température de fusion pour le fer pur
T_l	°C	Température du liquidus
T_{mold}	°C	Température initiale des moules
T_{ref}	°C	Température de référence
T_s	°C	Température du solidus
\dot{T}	°C/s	Vitesse de refroidissement
v	m/s	Moyenne de la vitesse
v	m/s	Vitesse du liquide

INTRODUCTION

Ces dernières années, une demande croissante a été observée pour des lingots de grande taille fabriqués à partir d'alliages d'acier à haute résistance, en particulier dans les secteurs du transport et de l'énergie. Ces lingots sont des composants essentiels, réputés pour leurs propriétés mécaniques exceptionnelles, incluant une grande résistance, une ténacité, une résilience et une résistance élevée à la fatigue. L'obtention de ces propriétés supérieures implique l'incorporation de divers éléments d'alliage et la mise en œuvre de processus thermomécaniques complexes. Cependant, garantir une production cohérente de grandes pièces moulées de haute qualité représente un défi majeur pour les fabricants d'acier. Le processus de fabrication commence généralement par la production d'acier dans un four électrique à arc, suivi d'un dégazage à l'argon pour affiner l'acier. L'acier affiné est ensuite coulé par le bas dans des puits de coulée, où plusieurs lingots sont étroitement disposés. Par la suite, après solidification, les lingots subissent des opérations de réchauffage, de forgeage, puis des processus de trempe et de revenu subséquents. Pendant la phase de solidification, plusieurs défauts peuvent survenir, notamment la macroségrégation, la porosité de rétraction et la cavité de rétraction. Ces défauts peuvent avoir un impact significatif sur la qualité et l'intégrité du produit final, nécessitant une surveillance et une gestion rigoureuse pendant le processus de moulage.

Parmi ces défauts, la macroségrégation est particulièrement problématique, car il est souvent difficile de l'éliminer lors des étapes de traitement ultérieures, ce qui peut entraîner des non-conformités potentielles voire le rebut du produit final, notamment dans le cas des grands lingots. La macroségrégation implique la présence de zones distinctes à l'intérieur du lingot où la composition chimique de l'alliage diffère de sa composition nominale, entraînant des variations dans les caractéristiques microstructurales, ainsi que dans les propriétés physiques et mécaniques. Il s'agit d'un défaut destructif qui pose des difficultés d'élimination lors des traitements thermo-mécaniques ultérieurs. Pour atténuer ce problème, des efforts continus sont dirigés vers l'amélioration de la qualité et de la rentabilité du moulage des lingots en minimisant la macroségrégation pendant le processus de moulage. Par conséquent, une attention

considérable a été accordée à la prévision de la présence, de l'ampleur et du positionnement de la macroségrégation, ainsi qu'à l'élaboration de méthodes pour son élimination ou sa clarification. Il est crucial de reconnaître et de contrôler les variables influençant la macroségrégation, telles que les compositions d'alliage, les paramètres de moulage, les méthodologies de moulage et la configuration de l'installation des lingots coulés.

Dans l'installation des lingots coulés, la masselotte (hot top) joue un rôle crucial. Elle se situe dans la partie supérieure du moule et comprend des panneaux (sideboards) latéraux sur les parois latérales ainsi qu'un composé ou une planche de recouvrement au sommet même du lingot. La masselotte facilite principalement l'alimentation continue pendant le moulage, contrôle le flux de chaleur au sommet du lingot pendant la solidification et fournit une région où les ségrégations et les inclusions non métalliques peuvent se rassembler. Toute modification des caractéristiques de la masselotte impacte significativement l'alimentation du corps du lingot, la redistribution du liquide interdendritique enrichi en soluté et, par conséquent, la gravité de la macroségrégation pendant la solidification.

Certaines stratégies ont été identifiées comme efficaces pour réguler le niveau de convection et de diffusion à la fois dans les phases liquide et solide, influençant ainsi la gravité de la macroségrégation pendant les premières étapes de la solidification. Cependant, la relation entre l'ampleur de la macroségrégation et la configuration de la masselotte reste floue, en particulier en ce qui concerne les lingots d'acier à faible teneur en alliage à plusieurs composants de taille industrielle. Des recherches supplémentaires sont nécessaires pour élucider cette dépendance.

Pour prévoir avec précision la formation de défauts pendant la solidification, il est essentiel de prendre en compte divers phénomènes, notamment le transfert de chaleur, le transfert de masse et de soluté, la thermodynamique, la science des matériaux et la dynamique des fluides. La taille importante des grands lingots pose des défis importants pour la caractérisation expérimentale des motifs de macroségrégation, principalement en raison des coûts et du temps considérables impliqués. Compte tenu de ces contraintes, la simulation numérique émerge comme une alternative efficace et rentable pour mener ces études. Afin d'optimiser le processus

de moulage des lingots de grande taille et de minimiser la macroségrégation, il est impératif de développer des simulations numériques basées sur des modèles matériels robustes. Ces simulations devraient faciliter la quantification de l'interdépendance entre divers facteurs, notamment la composition de l'alliage, les paramètres de moulage et la géométrie du système, et leurs effets sur les zones de macroségrégation. Les outils de modélisation par éléments finis (MEF) ont été largement utilisés pour prédire la distribution macroscopique des solutés, offrant une alternative plus rapide et plus rentable aux méthodes traditionnelles d'essai et d'erreur. Cependant, malgré des avancées significatives au cours des six dernières décennies, les modèles actuels présentent encore des capacités prédictives limitées. Des défis tels que la complexité computationnelle, les inexactitudes géométriques et les incertitudes dans les paramètres d'entrée et les modèles auxiliaires entravent l'efficacité de ces simulations. De plus, le manque d'études expérimentales appropriées pour la validation des modèles agrave la difficulté d'évaluer leur fiabilité. Par conséquent, le développement d'un modèle prédictif fiable pour la macroségrégation revêt une importance expérimentale et industrielle considérable, offrant des informations précieuses pour la recherche, la conception des processus de production et l'optimisation de l'efficacité de la fabrication des lingots.

Le projet de recherche actuel a été entrepris dans le but principal de développer un modèle de simulation robuste capable de prédire avec précision l'ampleur et la gravité de la macroségrégation dans un lingot d'acier à haute résistance de 12MT et à teneur en carbone moyenne. L'objectif général était de minimiser l'occurrence de ce défaut à l'échelle macroscopique, ce qui représente des défis importants dans la production de lingots d'acier de haute qualité. Pour atteindre cet objectif, une approche systématique a été adoptée, impliquant des études approfondies visant à identifier et à atténuer tout facteur pouvant introduire des incertitudes dans le modèle de simulation. Ce processus méticuleux a assuré la fiabilité et la précision des simulations ultérieures. L'applicabilité du modèle a été rigoureusement validée grâce à des mesures expérimentales approfondies, englobant des aspects critiques tels que la composition chimique, le comportement thermique et les caractéristiques dimensionnelles. Le processus de validation réussi a servi d'étape déterminante dans l'établissement de la crédibilité et de la fiabilité du modèle de simulation. Avec le modèle validé en main, l'étude s'est plongée

plus profondément dans l'impact de différents designs de masselotte, y compris les variations de géométrie et de régime thermique, sur les processus thermomécaniques complexes se produisant pendant la solidification du lingot. En analysant des facteurs clés tels que la cinétique de solidification, la dynamique de l'écoulement des fluides et la distribution des solutés, l'étude visait à obtenir des informations précieuses sur les mécanismes sous-jacents à la formation et à la propagation de la macroségrégation. De plus, l'étude a évalué *quantitativement* l'efficacité de l'ajustement des designs de masselotte pour atténuer la macroségrégation, fournissant des orientations précieuses pour l'optimisation des processus de coulée et l'amélioration de la qualité des lingots. Ces investigations approfondies et leurs résultats perspicaces sont minutieusement documentés à travers cinq chapitres, offrant des contributions originales au domaine de la fabrication de lingots d'acier et au contrôle de la macroségrégation.

Le chapitre 1 présente une revue de la littérature axée sur divers aspects liés à la coulée des lingots et aux processus de solidification. Une analyse critique de la solidification des lingots, incluant des défauts courants tels que la macroségrégation, la porosité de rétraction, la cavité de rétraction et la transition de colonnes à équiaxes, est fournie. La revue explore les mécanismes de formation et de développement de ces défauts, en mettant en lumière les facteurs sous-jacents contribuant à leur apparition. De plus, le chapitre examine les méthodes conventionnelles utilisées pour améliorer la qualité des lingots et atténuer l'intensité de la macroségrégation, offrant des perspectives sur les stratégies de contrôle efficaces adoptées dans l'industrie. En outre, l'évolution des techniques de modélisation macroscopique au cours des six dernières décennies est examinée, mettant en évidence les avancées et les défis dans ce domaine. Les principales difficultés associées à la mise en œuvre de contre-mesures et à l'établissement de modèles macroscopiques fiables sont également discutées, offrant un aperçu complet de l'état actuel de la recherche dans les processus de coulée de lingots et de solidification.

Le chapitre 2 explique le cadre méthodologique utilisé dans cette étude, qui combine des approches expérimentales et de simulation. Il commence par fournir des informations sur

l'algorithme logiciel et les équations constitutives pour la simulation thermomécanique. De plus, il présente les matériaux utilisés et le système de coulée de lingots spécifique étudié. Le chapitre décrit ensuite l'ensemble du processus de construction du modèle, y compris des éléments importants tels que les paramètres de configuration, la détermination de la taille de la grille appropriée et l'identification des paramètres matériels et d'entrée significatifs. De plus, il explore les procédures expérimentales menées pour générer les données nécessaires à la validation du modèle, la validation du modèle étant présentée dans le chapitre. Enfin, le chapitre aborde l'étude de la masselotte dans divers scénarios.

Au chapitre 3, l'accent est mis sur l'évaluation de l'influence de la hauteur de la masselotte sur le développement des motifs de macroségrégation positive et négative, la qualité du lingot et le rendement en matière dans le lingot étudié en utilisant la modélisation par éléments finis. Deux modèles de macroségrégation thermomécanique ont été employés pour simuler le processus de solidification en considérant deux configurations de masselotte différentes. La précision de ces modèles a été validée par une enquête expérimentale sur un lingot industriel de taille réelle. Ensuite, l'impact de l'augmentation de la hauteur de la masselotte sur divers facteurs tels que le champ de vitesse du métal liquide, la taille et la forme des tourbillons, le taux de refroidissement du liquide et la température de liquidus a été examiné. Les résultats de ce chapitre ont été publiés dans la revue Metals en novembre 2022.

Le chapitre 4 se penche sur l'examen de l'impact du régime thermique de la masselotte sur la gravité de la macroségrégation dans un lingot d'acier de grande taille. Cette étude explore de manière quantitative comment le régime thermique de la masselotte influence divers facteurs, notamment l'ampleur et la gravité de la macroségrégation, le temps de solidification, l'évolution de la température et les échanges de chaleur à travers l'ensemble du corps de grand lingot. Plus précisément, quatre scénarios différents de capacité thermique de la masselotte ont été étudiés. L'étude porte sur un lingot de 12 MT coulé par le fond en acier haute résistance, largement utilisé dans les systèmes énergétiques et de transport nécessitant des niveaux stricts d'homogénéité de la microstructure. Les investigations menées ont été publiées dans Journal of Manufacturing and Materials Processing en avril 2024.

Dans le chapitre 5, l'influence de cinq configurations différentes de masselotte sur la macroségrégation a été simulée à l'aide d'un modèle de référence. La précision du modèle de référence a été validée grâce à des études expérimentales sur la température du moule, la formation de microporosité et la macroségrégation. La prédiction du point de transition de colonne à équiaxe (CET) dans le lingot de 12 MT a été réalisée pour chaque conception en analysant l'interaction entre la vitesse du front de solidification et le gradient thermique. De plus, l'influence de la géométrie et du régime thermique de la masselotte sur le CET a été discutée pour optimiser la configuration de la masselotte. De plus, un critère basé sur le temps total de solidification (TST) est proposé pour le lingot de 12 MT afin d'atténuer les problèmes liés à la macroségrégation, à la formation de microporosité et à la cavité de rétraction. Les résultats de la recherche ont été publiées à la revue Journal of Materials Research and Technology en juillet 2024 pour considération.

L'annexe I, ajoutée à la fin, examine l'impact de diverses conceptions de masselotte sur la probabilité de formation de microporosité et de cavité de rétraction pendant la solidification d'un lingot coulé de 12 MT. Les résultats ont été présentés au 8e Congrès international sur la science et la technologie de la sidérurgie à Montréal, Québec, Canada, en août 2022.

L'annexe II présente l'effet de la hauteur de la masselotte sur le temps de solidification et la macroségrégation dans le lingot étudié. Les résultats ont été présentés à la 62e Conférence des métallurgistes, COM 2023, qui s'est tenue à Toronto, Ontario, Canada, en août 2023.

L'annexe III décrit la mise en œuvre des résultats obtenus de l'étude sur le lingot de 12 MT sur un lingot plus grand de 20 MT. Le modèle pour le lingot de 20 MT a été construit en se basant sur les données validées de l'étude sur le lingot de 12 MT. Ce nouveau modèle a subi une validation expérimentale à l'aide de mesures de température sur la surface du moule pendant le coulage. L'impact de trois nouvelles configurations de masselotte sur la gravité de la macroségrégation et la microporosité a été étudié dans le contexte du lingot de 20 MT. Les résultats obtenus de cet examen seront publiés dans le futur, offrant des informations

précieuses pour l'optimisation de la conception des masselottes en vue d'améliorer les propriétés des matériaux et l'efficacité de la fabrication.

Ces annexes fonctionnent comme des compléments aux chapitres précédents et servent d'études préliminaires pour évaluer l'influence de la configuration de la masselotte sur la cinétique de solidification.

CHAPITRE 1

REVUE DE LITTÉRATURE

1.1 Introduction à la coulée des lingots

Le processus de coulée des lingots reste essentiel pour la fabrication de composants industriels coûteux, lourds et monoblocs, tels que les rotors d'arbres pour turbines à vapeur et les récipients sous pression utilisés dans la production d'énergie nucléaire (Edward John Pickering, 2013). Après la fusion et le raffinage de l'acier, l'étape suivante consiste à le solidifier sous des formes adaptées à une transformation ultérieure ou à une utilisation finale. Bien que la coulée continue soit largement utilisée à cette fin, la coulée des lingots demeure indispensable pour des applications spécifiques comme les aciers spéciaux utilisés dans la fabrication d'outils, le forgeage et la refusion. Dans la coulée des lingots, l'acier en fusion est transféré du récipient de fabrication de l'acier à une poche doublée de matériaux réfractaires. De là, il est versé dans des moules à lingots pour la solidification. Il est largement reconnu que la méthode de coulée utilisée dans la production d'acier pour les lingots est cruciale. La coulée par le bas implique le processus de versement de l'acier à travers un système de canaux qui remplit les moules à lingots par le bas jusqu'à ce qu'ils soient complètement remplis, comme illustré dans la Figure 1.1 (Vesuvius). Cette technique est préférée car elle réduit considérablement la turbulence pendant le processus de coulée, ce qui conduit à des caractéristiques de surface et internes de haute qualité dans les lingots résultants. Cependant, elle nécessite l'utilisation d'équipements supplémentaires pour guider efficacement l'acier dans les moules (molds). Une fontaine ou une trompette (trumpet) joue un rôle crucial en dirigeant l'acier de la poche (ladle) vers une plaque de coulée ou un socle (stool) équipé de canaux séparés, appelés canaux de distribution (runner), qui dirigent l'acier dans les moules. Tant la trompette que les canaux de distribution sont doublés de matériaux réfractaires pour résister aux hautes températures, et des entrées ou sorties réfractaires sont employées pour guider l'acier dans la cavité du moule à lingot (la lingotière) (Hurtuk, 2008).

Les masselottes, également appelées têtes, sont des composants essentiels dans la coulée des lingots d'acier. Elles servent à réguler le flux de chaleur au sommet du lingot pendant la solidification. Cela est crucial pour améliorer la qualité et le rendement du lingot. L'une des fonctions principales de la masselotte est de fournir un réservoir d'acier liquide, qui aide à compenser le retrait au fur et à mesure que le lingot se solidifie. De plus, elle crée une zone désignée pour l'accumulation des ségrégations et des inclusions non métalliques. Pendant le processus de solidification du lingot, la chaleur se dissipe depuis la région de la masselotte ou de la tête dans trois directions principales: i. Vers le haut, en direction de l'atmosphère. ii. Vers le bas, dans le lingot lui-même. iii. Vers l'extérieur, à travers les parois du moule. Plus la quantité de chaleur dirigée vers le bas dans le lingot et vers l'extérieur à travers les parois du moule est grande, plus la qualité et le rendement du lingot résultant sont élevés (Hurtuk, 2008).

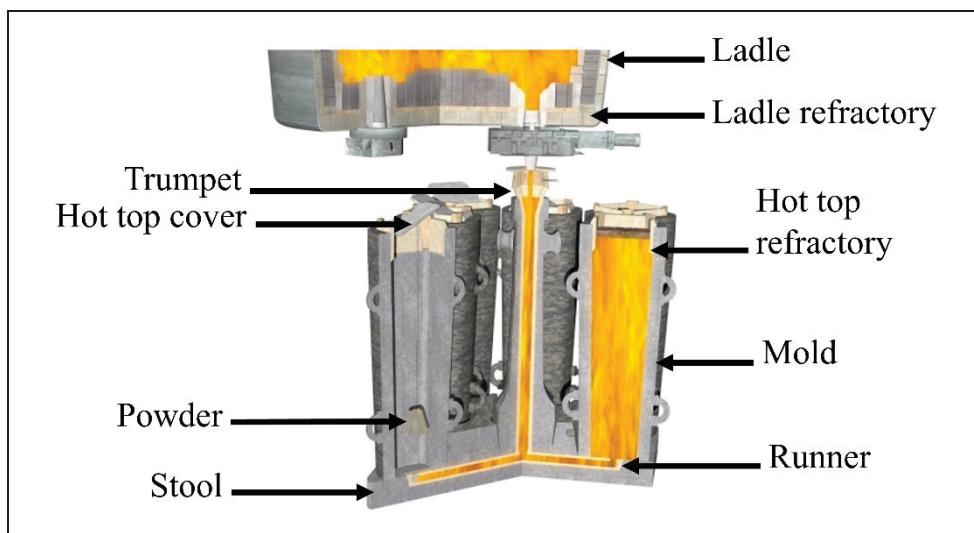


Figure 1.1 Schéma de la disposition pour la coulée par le bas de plusieurs lingots
Tirée de Vesuvius site

Les masselottes sont composées de panneaux latéraux positionnés le long des parois latérales à la partie la plus haute du lingot, complétés par un composé ou une planche de couverture placée au sommet du lingot. Ces panneaux latéraux peuvent être soit purement isolants soit exothermiques et sont fixés aux parois du moule à lingot ou à une coulée séparée située au-dessus du moule. Les composés de couverture, généralement sous forme de poudre (powder), sont appliqués sur les lingots immédiatement après la coulée. Dans certains cas, ces composés

peuvent être fournis sous forme de planches préformées similaires aux panneaux latéraux. Lorsque l'acier liquide à haute température entre en contact avec les matériaux exothermiques de la masselotte, une réaction se produit. La réaction exothermique produite par le contact entre l'acier liquide à haute température et les matériaux exothermiques de la masselotte crée de la chaleur localisée, ce qui ralentit la solidification de l'acier. Les propriétés d'isolation très élevées des matériaux exothermiques contribuent à maintenir le sommet du lingot à l'état liquide pendant que le reste du lingot se solidifie. Une masselotte bien conçue garantit que le sommet du lingot reste liquide jusqu'à ce que tout le corps du lingot se soit solidifié. Cela empêche le retrait à l'intérieur du lingot lui-même, car tout retrait est compensé par la masselotte. De plus, ce processus facilite l'élimination de la ségrégation et des impuretés, les dirigeant vers la tête du lingot (Hurtuk, 2008). En ajustant soigneusement les propriétés thermiques des panneaux latéraux et du composé, le processus de solidification du lingot peut être finement réglé pour optimiser à la fois la qualité et le rendement. Les panneaux latéraux et le composé de masselotte purement isolants offrent des avantages similaires à ceux des masselottes exothermiques, bien qu'ils ne produisent pas de chaleur due à la réaction exothermique. Néanmoins, leur efficacité est quelque peu diminuée, les rendant peu couramment utilisés sauf pour les lingots très grands. Dans de tels cas, où la solidification prend plus de temps et la rétention de chaleur dans le lingot est prolongée, les masselottes isolantes peuvent encore bien fonctionner. Les panneaux latéraux de la masselotte sont généralement installés dans le moule ou la masselotte avant d'être versés, et ils deviennent opérationnels immédiatement après que le versement est terminé. Cependant, le composé de couverture doit être appliqué rapidement après la fin du versement. Il est essentiel de le faire rapidement pour éviter une solidification prématuée dans la tête du lingot. Cela s'applique également si le composé de couverture est sous forme de planche préformée. En appliquant rapidement le composé de couverture après le versement, la solidification dans la tête est retardée, assurant une solidification correcte du lingot (Hurtuk, 2008).

1.2 Solidification du lingot

La solidification du lingot se produit lorsque la chaleur se dissipe de l'acier à travers le moule de lingot vers l'atmosphère environnante. Les schémas de solidification du lingot reflètent la

forme de la cavité à l'intérieur du moule de lingot et sont également influencés par la présence de la masselotte. Les structures de solidification résultantes dans le lingot sont principalement déterminées par le taux de dissipation de chaleur. Typiquement, ces structures comprennent une zone de refroidissement rapide ou zone de peau (chilled equiaxed grains zone), une zone dendritique columnnaire (columnar structure) et une zone équiaxe, comme illustré dans la Figure 1.2 (Merton C Flemings, 1974). La zone de refroidissement rapide ou zone de peau se forme rapidement lorsque l'acier liquide chaud entre en contact avec la paroi du moule plus froide, créant un gradient thermique abrupt à la surface du lingot. Cette première zone de solidification plane se produit juste avant qu'un espace d'air n'apparaisse entre l'acier solidifié et la paroi du moule en raison du retrait de l'acier. Ensuite, les structures se transforment en formations dendritiques columnnaires à mesure que le gradient thermique diminue et se stabilise dans une certaine mesure. Les structures dendritiques columnnaires sont principalement entraînées par le fort gradient thermique, un principe connu sous le nom de refroidissement constitutionnel (Merton C Flemings, 1974; Porter, Easterling, & Sherif, 2008). Les ségrégats présents devant l'interface en progression dans la région de fort gradient thermique maintiennent l'acier liquide en sur-refroidissement, favorisant ainsi la croissance dendritique. Cependant, à mesure que la solidification progresse et que le gradient thermique diminue, cette force motrice diminue, entraînant la formation de structures équiaxes vers le centre du lingot. Les structures dendritiques columnnaires étendues contribuent à la ségrégation et à la ponte le long de la ligne médiane. Il est généralement préférable de gérer ces structures pour réduire la ségrégation et le retrait le long de la ligne médiane. La température de l'acier liquide influence la formation de ces structures (Hurtuk, 2008).

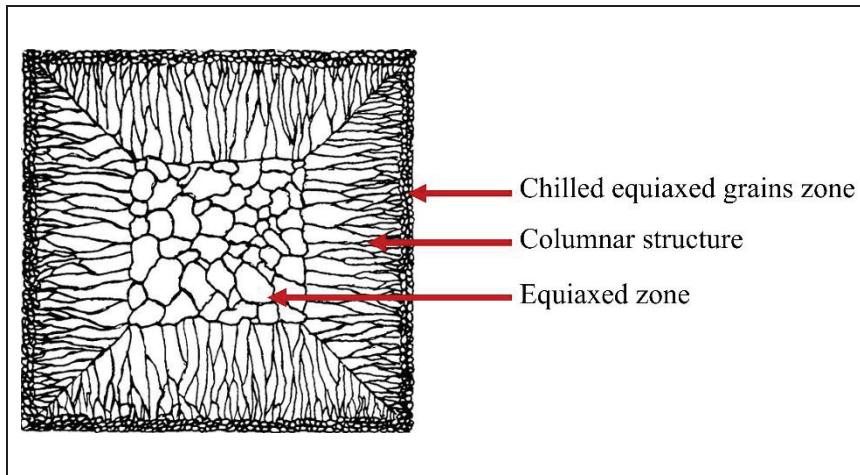


Figure 1.2 Illustration de la structure du lingot indiquant la zone de peau (chill zone), la zone dendritique columnaire (columnar zone) et la zone équiaxe (equiaxed zone)
Tirée de Merton C Flemings (1974)

La Figure 1.3a présente des illustrations des formations de solidification dendritique columnaire, mettant en avant à la fois les bras primaires et secondaires. Les bras secondaires peuvent produire de nouveaux bras primaires par ramification, et parfois, des bras tertiaires peuvent émerger des bras secondaires (Merton C Flemings, 1974). Ce processus de ramification pendant la solidification introduit une ségrégation significative et forme une structure qui peut facilement piéger des inclusions. Les structures columnaires exacerbent la ségrégation en ligne centrale et peuvent même se rejoindre à la ligne centrale, entraînant un retrait. En revanche, les structures équiaxes, comme illustré dans la Figure 1.3b, atténuent ces problèmes. Il est généralement préférable de produire une proportion plus élevée de structures équiaxes pour améliorer la qualité du lingot (Hurtuk, 2008).

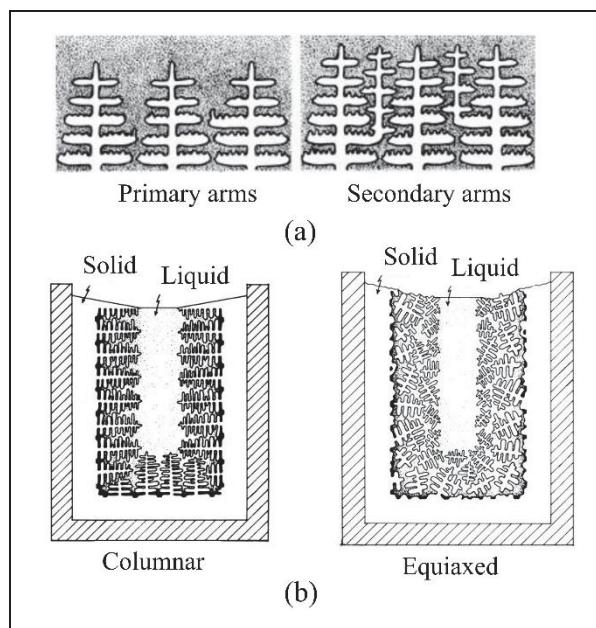


Figure 1.3 Illustrations schématiques (a) Solidification dendritique columnaire dans les alliages (b) Structures d'lingots columnnaires et équiaxes
Tirée de Merton C Flemings (1974)

Pendant la solidification des alliages, les éléments solutés se répartissent entre les phases solide et liquide, entraînant soit un enrichissement soit un appauvrissement dans les régions interdendritiques. Ce phénomène, connu sous le nom de microségrégation, provoque des variations de composition à l'échelle du micromètre. En revanche, la macroségrégation implique des variations chimiques à des échelles de longueur approchant les dimensions de la pièce moulée, qui peuvent être de l'ordre des centimètres ou des mètres pour les grands lingots. Alors que la microségrégation peut être atténuée par des traitements thermiques d'homogénéisation, la macroségrégation est difficile à éliminer en raison des distances importantes sur lesquelles les espèces solutées doivent se déplacer. La plupart de la macroségrégation est indésirable pour les fabricants de pièces moulées car elle peut entraîner des propriétés microstructurales et mécaniques imprévisibles. Par conséquent, il y a eu, et il continue d'y avoir, un intérêt significatif pour prédire et réduire la macroségrégation dans les produits moulés (Edward John Pickering, 2013). Dans les sections suivantes de ce chapitre, nous examinons différents types de macroségrégation et examinons les mécanismes sous-jacents à leur formation. De plus, nous explorons d'autres défauts significatifs qui surviennent

pendant la solidification, tels que la porosité de retrait, la cavité de retrait et la transition de la structure columnaire à équiaxe (TCE), qui sont étroitement liés à la sévérité de la macroségrégation. En outre, nous passons en revue le développement de modèles prédictifs pour la macroségrégation afin de comprendre leurs capacités prédictives et leur efficacité.

1.3 Macroségrégation

La macroségrégation fait référence à un défaut caractérisé par une hétérogénéité de composition généralement observée dans les lingots ou pièces coulées de grande taille ou de structure complexe (Ge et al., 2017). Les premières études sur les phénomènes de macroségrégation dans les lingots d'acier remontent à plusieurs décennies. Malgré des avancées significatives dans la compréhension des processus sous-jacents, des schémas similaires de ségrégation sont toujours observés dans la production contemporaine de lingots (Edward John Pickering, 2013). Les schémas représentés, comme illustré dans la Figure 1.4 (Wu, Ludwig, & Kharicha, 2018), englobent la ségrégation positive en haut, où la teneur en soluté est plus concentrée que la composition nominale dans la section supérieure du lingot, la ségrégation négative en bas, caractérisée par une concentration en soluté inférieure à la composition nominale au fond du lingot, et les ségrégations en canal enrichi en soluté, désignées sous forme de bandes A et V. Les ségrégations de type A, qui pointent vers le haut de la pièce, sont généralement situées près de la frontière entre le centre et la périphérie, tandis que les ségrégations de type V sont discernables dans la partie centrale de la pièce (Chunping Zhang, 2020).

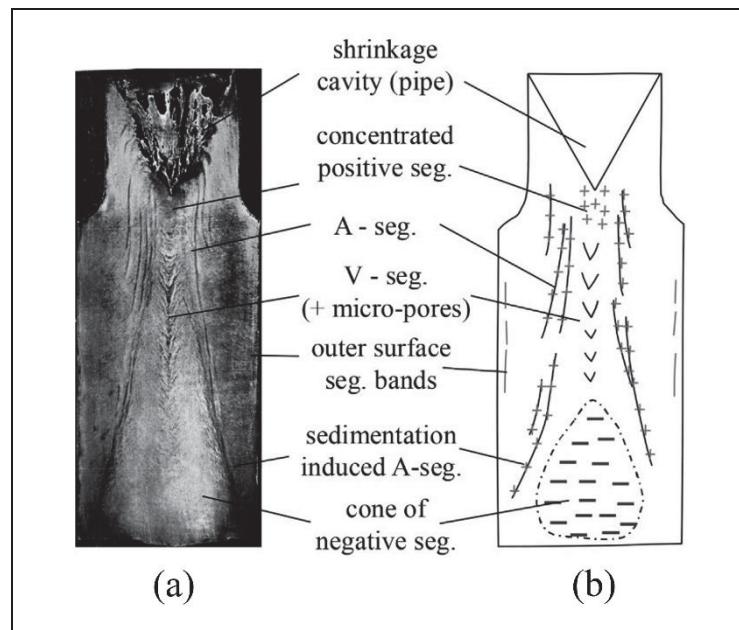


Figure 1.4 Un motif de macroségrégation courant observé dans les lingots d'acier (a) Une empreinte de soufre d'un lingot d'acier de 10.5 tonnes avec une composition nominale de 0.30 % en poids de C (b) Une représentation schématique illustrant différents types de macroségrégation

Tirée de Wu & Ludwig (2018)

Jusqu'au milieu des années 1960, plusieurs chercheurs croyaient largement que l'accumulation de solutés aux pointes des interfaces solides en expansion était la cause principale des phénomènes de macroségrégation dans les lingots. Cependant, des investigations théoriques et expérimentales ultérieures ont réfuté cette hypothèse. Il est désormais bien établi que la majorité des solutés est rejetée latéralement à partir des dendrites en croissance, enrichissant la zone semi-solide, et que l'accumulation devant les pointes des dendrites est négligeable. Les différentes formes de macroségrégation proviennent d'un processus fondamental commun : le mouvement ou le transfert de liquide ségrégué à l'intérieur du réseau solide de la zone semi-solide lors de la solidification. Cette migration de liquide enrichi et de solide appauvri peut se produire via plusieurs mécanismes, comme illustré dans la Figure 1.5 (Edward John Pickering, 2013).

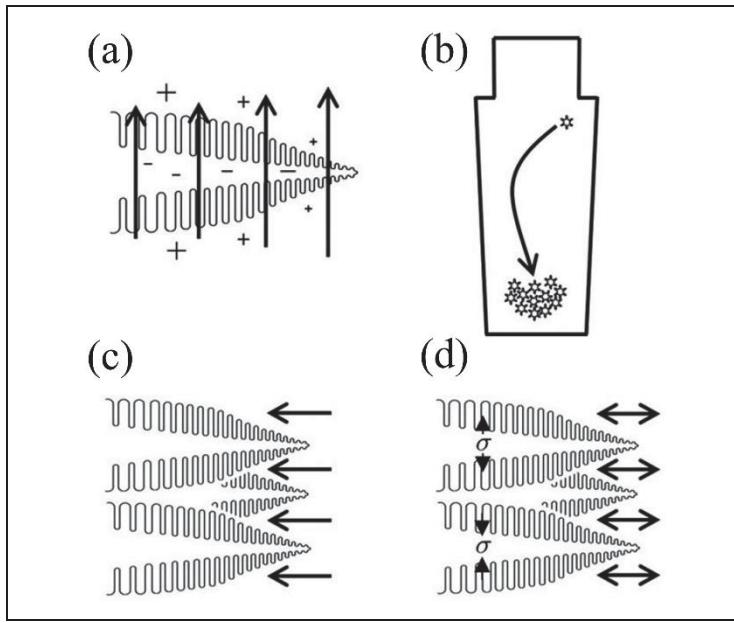


Figure 1.5 Illustration des mécanismes responsables du transport de masse lors de la solidification des lingots (a) Courants de convection dans le liquide interdendritique, avec des symboles indiquant l'enrichissement (+) ou l'appauvrissement (-) en soluté (b) Sédimentation des grains ou mouvement solide. (c) Écoulement de liquide pour compenser le retrait de solidification (d) Déformation de la zone semi-solide. Il est important de noter que le solide columnnaire représenté dans (a), (c) et (d) provient de la paroi du moule

Tirée de Pickering (2013)

- i. Les flux de convection résultent des disparités de densité dues aux écarts de température et de composition dans le liquide, comme illustré dans la Figure 1.5a. Les effets combinés de la poussée thermique et solutale peuvent soit se renforcer, soit s'opposer les uns aux autres, selon que les gradients locaux de température et de concentration conduisent à une augmentation ou à une diminution de la densité du liquide. La convection induite par l'influence conjointe de la température et du soluté est appelée convection thermosolutale.
- ii. Le mouvement implique des grains équiaxes ou des fragments solides, qui peuvent provenir de la nucléation hétérogène dans le bain fondu, se détacher des dendrites en raison de la refusion ou du stress, ou se séparer de la paroi du moule après la coulée, comme illustré dans la Figure 1.5b. Les grains équiaxes dans les aciers ont une densité

plus élevée que le liquide environnant, ce qui les fait descendre. Ce mécanisme, associé à l'écoulement de fluide de convection, constitue un processus de macroségrégation primaire dans les grands lingots.

- iii. Des phénomènes d'écoulement se produisent pour compenser le retrait de solidification et la contraction thermique des phases liquide et solide pendant le refroidissement, comme illustré dans la Figure 1.5c.
- iv. Le réseau solide subit également une déformation due à divers facteurs tels que les contraintes thermiques, les contraintes de retrait et la tête métalostatique (la pression exercée par le métal liquide au-dessus), comme indiqué dans la Figure 1.5d.
- v. De plus, des flux imposés peuvent survenir en raison de facteurs externes tels que le verse, l'application de champs magnétiques, l'agitation, la rotation et d'autres mécanismes.

La formation de la macroségrégation dans de grands lingots est un processus multifactoriel, influencé par divers phénomènes physico-chimiques. Différentes catégories de macroségrégation présentent des mécanismes de formation distincts. Il existe un consensus général parmi les chercheurs concernant les causes des zones de ségrégation positives en haut et des zones de ségrégation négatives en forme de noyau en bas. Ces phénomènes sont attribués à la convection thermosolutale, au flux de fluide interdendritique induit par le retrait, et à la sédimentation des grains équiaxes. Alors que le mécanisme de formation de la ségrégation de type A ne fait pas l'objet d'un consensus complet, la plupart des chercheurs l'attribuent à l'instabilité du bain dans la zone de cristallisation partielle. La formation des ségrégats de type A se produit en raison de la convection solutale dans la zone dendritique columnaire, s'écoulant dans la même direction que la vitesse des isothermes mais à une vitesse plus élevée. La ségrégation de type V se développe généralement lors des dernières étapes de la solidification, où le sommet central du lingot est occupé par un agglomérat lâche de grains équiaxes. L'interaction complexe entre ces mécanismes pose un défi important pour modéliser avec

précision les phénomènes de macroségrégation, nécessitant souvent des traitements mathématiques complexe (Jun Li, Xu, Ren, Xia, & Li, 2022; Edward John Pickering, 2013).

1.3.1 Mesures pour contrôler la macroségrégation

Le degré de ségrégation a été observé être significativement influencé par le niveau de convection ou de diffusion se produisant dans les phases liquide et solide, ce qui, à son tour, dépend des conditions de refroidissement pendant la solidification. Par conséquent, une gestion méticuleuse des variables du processus de coulée dès les premières étapes pourrait s'avérer être une approche efficace pour réguler l'étendue et la gravité de la macroségrégation. Des efforts de recherche continus et étendus ont identifié certains paramètres de processus clés qui ont été utilisés comme "contre-mesures" pour produire des lingots solides de qualité améliorée et avec une macroségrégation minimale.

1) Régulation de la composition de l'alliage

Les alliages, composés de plusieurs éléments, présentent des interactions complexes lors de la solidification. La présence de différents éléments d'alliage peut influencer la densité du mélange fondu, la force de flottabilité (qui s'oppose à la gravité) et le flux global du fluide. Par conséquent, ces éléments jouent un rôle dans la convection solutale, le mouvement du fluide induit par les changements de composition, ce qui influence à son tour la macroségrégation (Du, Eskin, & Katgerman, 2007). De plus, différentes concentrations d'éléments d'alliage affectent le coefficient de partition (k), qui représente le rapport de la composition solide à la composition liquide pendant la solidification. Les écarts de k par rapport à l'unité indiquent la répartition des éléments de soluté entre les phases liquide et solide, entraînant une ségrégation. Des études ont montré qu'ajuster les concentrations d'éléments comme le molybdène, le silicium et le manganèse dans certaines plages peut réduire la ségrégation de type A. Cette réduction est attribuée à une stratification de densité stable dans le liquide riche en soluté et à une diminution de la flottabilité dans la zone de congélation (SUZUKI & TANIGUCHI, 1981; Chunping Zhang, 2020).

2) Utilisation de la technique de "multipouring"

La technique de "multipouring" implique de verser séquentiellement de l'acier fondu à partir de plusieurs poches, chacune contenant de l'acier avec des concentrations différentes en éléments d'alliage. Les paramètres tels que le contenu de la poche, la température, le poids et le débit sont méticuleusement contrôlés pour atteindre des conditions optimales. L'objectif est d'établir une distribution de concentration initiale délamellée, créant une distribution chimique disparate pour la solidification ultérieure des lingots d'acier (Z.-H. Duan, Shen, & Liu, 2015; Chunping Zhang, 2020). Cette méthode a été suggérée comme un moyen efficace de contrer la macroségrégation dans les grands lingots d'acier en inversant la distribution de concentration initiale entre les sections supérieure et inférieure du lingot avant le début de la solidification (Tu, Shen, & Liu, 2015; Chunping Zhang, 2020).

3) Mise en œuvre du flux forcé de métal fondu

L'utilisation de techniques telles que l'agitation, la rotation ou l'oscillation du creuset, ou l'introduction d'un champ magnétique ou électromagnétique rotatif, force l'écoulement ou la convection de la fondre. L'objectif est de soulager la pression de contact entre la fondre et le moule, d'élargir la zone pâteuse, de favoriser la nucléation hétérogène, de diminuer les gradients de température et d'atténuer les effets de la gravité. Par conséquent, ces méthodes peuvent conduire à un affinement significatif de la microstructure de la pièce moulée, à une amélioration de la distribution des solutés dans l'lingot, et à une réduction de la macroségrégation des éléments d'alliage (Chunping Zhang, 2020; Z. Zhao, Cui, Dong, & Zhang, 2007; Z. Zhao, Cui, & Nagaumi, 2005). L'application de l'oscillation magnéto-pulsée dans la partie supérieure chaude (HPMO) a été démontrée pour réduire la sévérité de la macroségrégation (H.-c. Li, Liu, Zhang, Liu, & Zhai, 2018).

4) Contrôle des paramètres de coulée

Les paramètres de coulée, tels que la vitesse de remplissage, la surchauffe initiale du métal en fusion et la température initiale du moule, jouent un rôle crucial dans l'influence de la formation de la macroségrégation et la qualité globale des produits coulés. Une vitesse de remplissage

plus élevée a été observée pour atténuer la sévérité de la ségrégation dans diverses régions du corps de la lingotière, y compris la section supérieure, le long de la ligne centrale et dans la zone entre la ligne centrale de la lingotière et la paroi du moule (Chunping Zhang, 2020; Chunping Zhang, Loucif, Jahazi, Tremblay, & Lapierre, 2018). Modifier la surchauffe initiale du métal en fusion entraîne des changements dans la distribution de la température, la dynamique de l'écoulement du liquide, la vitesse de solidification et la contraction thermomécanique. Par conséquent, des niveaux de surchauffe plus bas ont tendance à réduire l'intensité de la ségrégation dans la partie supérieure du corps de la lingotière, dans la masselotte et dans les bandes riches en solutés entre la ligne centrale de la lingotière et la périphérie (C. Zhang, Jahazi, & Tremblay, 2020). À l'inverse, des températures de moule plus élevées ont été associées à une sévérité accrue de la ségrégation dans le corps de la lingotière, le long de la ligne centrale et dans la région entre la ligne centrale de la lingotière et la paroi du moule (Chunping Zhang, 2020; C. Zhang, A. Loucif, M. Jahazi, & J. B. Morin, 2022).

5) Ajustement des dimensions et de la configuration du système de coulée

La modification des dimensions du système de coulée est considérée comme l'une des "contre-mesures" les plus pratiques et a attiré une attention significative de la part des chercheurs. Diverses études ont examiné l'impact des dimensions des composants de coulée sur le comportement de solidification des pièces moulées. En particulier, la géométrie à la fois du moule et de la masselotte sont des facteurs critiques pour garantir la production de lingots de grande taille et de haute qualité. Des paramètres géométriques tels que le rapport entre le diamètre de la masselotte et le diamètre du lingot, le rapport de masse de la masselotte (mass ratio) (qui est le rapport entre le poids de la masse de la masselotte et le poids total de la masse), et le rapport de minceur (slender ratio) (H/D : le rapport entre la hauteur du corps du lingot et le diamètre moyen du corps du lingot) ont été identifiés comme des facteurs pertinents affectant la cinétique de solidification (comme le temps et le taux de solidification) et la formation de macroségrégation dans les lingots d'acier (Lesoult, 2005; Scepi, Andreoli, Basevi, & Giorgetti, 1981; Tashiro, Watanabe, Kitagawa, & Tamura, 1983). Les paramètres du système de coulée,

y compris la pente du moule et la hauteur de la masselotte, influencent également le temps de solidification, le taux de refroidissement et le gradient de température.

La réduction de la hauteur de la masselotte et de la température de préchauffage entraîne une diminution du taux de refroidissement de la masselotte, une réduction du gradient de température dans la masselotte et une augmentation du gradient de température dans le corps du lingot. Cela permet de diminuer les ségrégations canalisées dans la masselotte tout en aggravant les porosités de retrait sur la ligne centrale (Kermanpur, Eskandari, Purmohamad, Soltani, & Shateri, 2010; Qian, Hu, Cao, Kang, & Li, 2015). L'isolation de la masselotte est cruciale dans la coulée des lingots, influençant la cinétique de solidification et la formation des défauts. L'utilisation de matériaux réfractaires exothermiques dans la masselotte peut augmenter la formation de noyaux, entraînant une macroségrégation axiale plus importante (Kumar, Založnik, Combeau, Demurger, & Wendenbaum, Juin 2012). La hauteur et la forme du matériau isolant dans la masselotte influencent également le comportement de solidification, une section transversale circulaire étant préférée. Une conception appropriée de l'isolation de la masselotte peut améliorer l'efficacité du masselottage et potentiellement réduire la susceptibilité aux fissures lors de la forge à chaud ultérieure (Kermanpur et al., 2010). Les directives pour la conception des masselottes afin d'améliorer la qualité des lingots proposent de déterminer le volume minimum suffisant nécessaire pour alimenter le lingot et d'établir un gradient de température descendant de la masselotte au corps du lingot (M. C. Flemings, 1976).

Ces dernières années, aucune recherche n'a été menée sur l'impact de la configuration de la masselotte sur la formation de la macroségrégation. Cependant, l'influence exacte de la géométrie de la masselotte et de l'isolation sur la cinétique de solidification reste incertaine et nécessite une quantification plus poussée. Cela inclut une analyse approfondie de divers facteurs tels que le temps de solidification, le taux de refroidissement, le gradient thermique, le flux de chaleur, la dynamique des fluides et la macroségrégation dans l'ensemble du lingot. Comprendre ces paramètres est crucial pour optimiser le processus de solidification et améliorer la qualité et la constance du produit final du lingot.

Afin de minimiser la macroségrégation dans les lingots d'acier lourds, un contrôle rigoureux de ces paramètres est essentiel. Quantifier leur impact sur la macroségrégation représente toutefois un défi majeur, notamment en utilisant des méthodes d'essais et erreurs coûteuses et chronophages. Les simulations par la méthode des éléments finis (MEF) offrent une approche prometteuse pour relever ce défi.

1.4 Porosité de rétraction et cavité de rétraction

Les deux principaux défauts de rétraction couramment observés dans les lingots d'acier sont la cavité de rétraction macroscopique et la microporosité ou les pores. La cavité de rétraction macroscopique se présente généralement sous la forme d'un conduit ouvert dans la région du haut du moule, parfois accompagnée de cavités satellites déconnectées juste en dessous du conduit principal. L'affaissement du niveau de la fonte en raison de la contraction volumique accumulée pendant le refroidissement et la solidification conduit à la formation d'un conduit en forme d'entonnoir. Le mécanisme de formation des cavités satellites est similaire à celui du conduit ouvert; cependant, ils se produisent dans des régions isolées séparées du conduit principal. Malgré leur isolement, chaque région maintient un flux d'alimentation actif. Ces régions de fonte isolées résultent d'une conception inadéquate du haut du moule ou du phénomène connu sous le nom de "bridging". La microporosité se manifeste principalement dans la région de la ligne centrale des lingots. Pendant les dernières étapes de la solidification, la profonde zone de fonte interdendritique le long de la ligne centrale pose des défis pour une alimentation adéquate par la fonte provenant du haut du moule. Lorsque la chute de pression induite par la rétraction atteint un seuil critique, des pores sont initiés et commencent à croître. (Wu et al., 2018). Traditionnellement, certains défauts, tels que la porosité de rétraction de la ligne centrale, étaient souvent négligés dans les lingots d'acier lourds. Cette négligence découlait de la croyance que le processus de forgeage ultérieur pouvait efficacement fermer ces défauts de porosité. Cependant, si les porosités à l'intérieur du lingot d'acier lourd sont excessivement grandes, il devient difficile de les éliminer entièrement uniquement par forgeage. Par conséquent, la porosité de rétraction impacte significativement la qualité du produit, en particulier dans les lingots utilisés pour des applications de haute exigence telles

que les rotors à basse pression des centrales nucléaires. Il est donc crucial de simuler avec précision la porosité de rétraction dans les lingots d'acier lourds et de développer des stratégies efficaces pour atténuer ces défauts dans des applications pratiques. Figure 1.6 illustre la présence de la porosité de rétraction de la ligne centrale et de la cavité de rétraction macroscopique dans le lingot de 100 tonnes. Alors que la formation de la rétraction implique des processus complexes tels que le flux thermique et massique, une approche largement acceptée pour simuler la porosité de rétraction se concentre uniquement sur les calculs thermiques. En utilisant cette méthode simplifiée, la rétraction peut être identifiée en fonction des motifs de solidification (J. Wang, Fu, Liu, Li, & Li, 2012). En particulier, différents critères sont utilisés pour évaluer la porosité de rétraction dans les pièces moulées. Cela inclut le critère du gradient de température, le critère de fraction solide critique, et le célèbre critère de Niyama. Cependant, cette approche a ensuite été modifiée ou élargie pour prendre en compte la morphologie de la zone pâteuse et la perméabilité, améliorant ainsi sa précision prédictive (J. Wang et al., 2012; Wu et al., 2018).

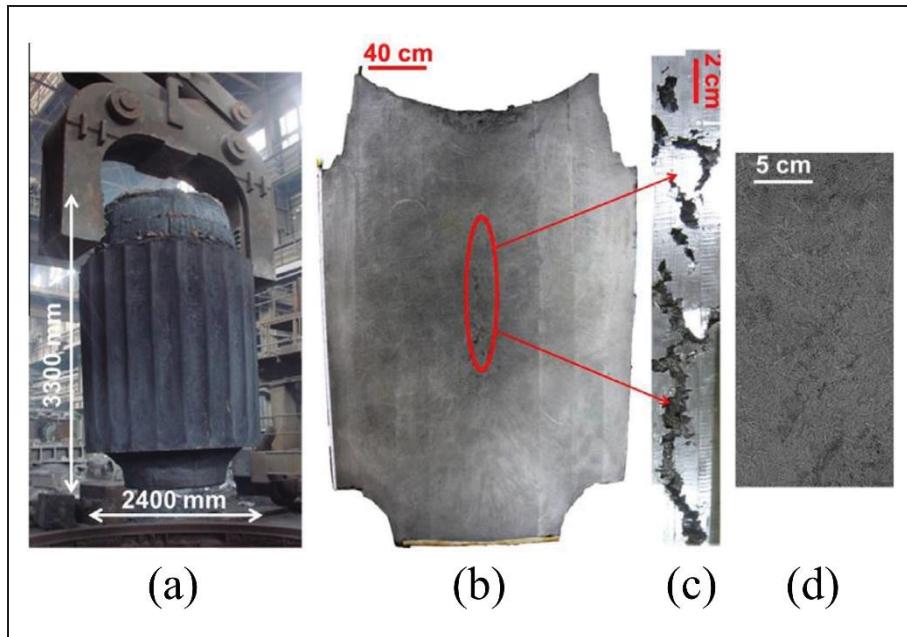


Figure 1.6 (a) La lingot de 100 tonnes en 30Cr2Ni4MoV, (b) La surface sectionnée, (c) La porosité de rétraction de la ligne centrale, et (d) L'examen macroscopique du lingot gravé. Notamment, sur l'image (b), la zone de la porosité typique de rétraction de la ligne centrale est mise en évidence avec un cercle rouge

Tirée de Wang & Fu (2012)

La masselotte joue un rôle crucial en assurant l'alimentation continue pendant la coulée et en régulant le flux de chaleur pendant la solidification. Par conséquent, toute variation dans les propriétés de la masselotte peut avoir un impact sur l'alimentation en liquide de la masselotte vers le corps de lingot et sur l'apparition de la porosité de la ligne centrale. Le développement de nouveaux designs de masselotte visant à réduire les défauts de coulée et les coûts globaux des produits est impératif. Par conséquent, l'étude des propriétés de la masselotte fait l'objet d'investigations numériques depuis de nombreuses années.

Réduire le rapport de minceur (H/D) et augmenter le cône de la lingotière ont été trouvés pour diminuer la porosité centrale (Heidarzadeh & Keshmiri, 2013; Kermanpur et al., 2010; Tashiro et al., 1983). De plus, l'incorporation d'une plaque d'isolation supplémentaire entre le corps du moule et la masselotte entraîne une réduction de la porosité de la ligne centrale (Heidarzadeh & Keshmiri, 2013). En outre, l'augmentation du rapport de masse de la masselotte, la réduction du cône de la masselotte, l'utilisation de matériaux d'isolation thermique supérieurs et le

préchauffage du moule de la masselotte ont été identifiés comme des mesures efficaces pour éliminer la porosité de rétraction (Balcar, Zelezny, Sochor, Fila, & Martínek, 2008). Ces résultats soulignent l'importance d'optimiser les propriétés de la masselotte pour améliorer la qualité de la coulée et réduire les coûts de production. Malgré les résultats obtenus jusqu'à présent, il manque encore de recherches exhaustives sur la façon dont la modification du régime thermique et de la géométrie de la masselotte dans différents scénarios impacte la combinaison de la microporosité de la ligne centrale, des cavités de rétraction et de la macroségrégation.

1.5 La transition de colonnaire à équiaxe

Les structures de grains observées dans la plupart des processus de coulée des alliages métalliques résultent d'une compétition entre la croissance de divers réseaux de dendrites qui se développent dans des conditions contraintes et non contraintes (Zimmermann et al., 2011). La Transition de Colonnaire à Équiaxe (TCE) (Columnar to Equiaxed Transition : CET) fait référence au passage des grains columnaires aux grains équiaxes, évident dans les macrostructures des pièces coulées. La position de la TCE est cruciale car elle détermine la proportion de grains columnaires et équiaxes, influençant ainsi les propriétés significatives des produits coulés. Divers mécanismes conduisant à la TCE ont été proposés, explorés et examinés au fil des ans. Il existe un accord général selon lequel la TCE se produit lorsque les grains équiaxes qui croissent dans le liquide sous-refroidi devant le front de grain columnaire obstruent son mouvement. Ce mécanisme a été directement observé à l'aide de radiographies par rayons X de synchrotron (Marcelo Aquino Martorano & Biscuola, 2009). Le développement de la structure de grains équiaxes nécessite la formation réussie de nouveaux grains dans le liquide devant le front de croissance directionnelle principal (Figure 1.7) (O'Reilly, 2016). Comme illustré dans la Figure 1.7, la nucléation des grains se produit uniquement dans la région sous-refroidie constitutionnellement devant le front principal. Une réduction du gradient de température élargit cette région, favorisant la croissance équiaxe. De même, l'augmentation de la vitesse de solidification augmente le sous-refroidissement au niveau du front principal de croissance, agrandissant la zone sous-refroidie et favorisant la croissance équiaxe. La nucléation efficace de nouveaux grains dépend de l'abondance et de

l'efficacité des sites de nucléation, opérant à des niveaux de sous-refroidissement plus bas. Ces facteurs, y compris la vitesse de solidification, le gradient de température, les paramètres de l'alliage (tels que la pente du liquidus, le coefficient de position du soluté et la teneur en éléments d'alliage), la densité des sites et le sous-refroidissement critique, régulent collectivement la taille des grains dans le régime équiaxe. De toute évidence, la nucléation joue un rôle crucial dans la formation des structures de grains équiaxes (O'Reilly, 2016). Cependant, il y a un débat en cours concernant les mécanismes spécifiques par lesquels les grains équiaxes arrêtent la progression du front columnaire. Initialement, il a été proposé que les grains équiaxes entravent le front columnaire par des interactions mécaniques (obstruction mécanique). Par la suite, il a été suggéré que des interactions solutales (obstruction solutale) ou thermiques (obstruction thermique) pourraient également jouer un rôle (Marcelo Aquino Martorano & Biscuola, 2009).

La macroségrégation et le pontage de la ligne centrale (bridging) sont exacerbés par les structures principalement columnaires, il est donc conseillé de gérer ces structures pour réduire la ségrégation de la ligne centrale et les problèmes de rétraction. Selon de nombreuses études, la TCE est largement influencée par des paramètres de coulée tels que la composition de l'alliage, le degré de surchauffe pendant le coulage, la densité des noyaux dans le métal en fusion, l'efficacité de refroidissement à la frontière métal/moule, et la convection dans le métal (O'Reilly, 2016). Un examen des paramètres de microstructure tels que le gradient thermique et la vitesse de solidification a révélé que la lingot carré présente une zone équiaxe plus importante par rapport à un lingot rectangulaire (Prafull Patil, Puranik, Balachandran, & Balasubramanian, 2017).

Les changements dans les caractéristiques de la masselotte affectent significativement la cinétique de solidification, modifiant ainsi la position de la transition de Colonnaire à Équiaxe (TCE). Malgré les découvertes précédentes mettant en évidence l'importance de la cinétique de solidification, l'influence spécifique de la configuration de la masselotte sur la position de la TCE reste inexplorée. Ce manque dans la recherche indique un besoin critique d'une enquête approfondie sur la manière dont les variations dans la conception et les propriétés de la

masselotte impactent la TCE lors du processus de coulée. Comprendre ces effets pourrait conduire à des techniques de coulée optimisées et à des propriétés améliorées du matériau dans le produit final.

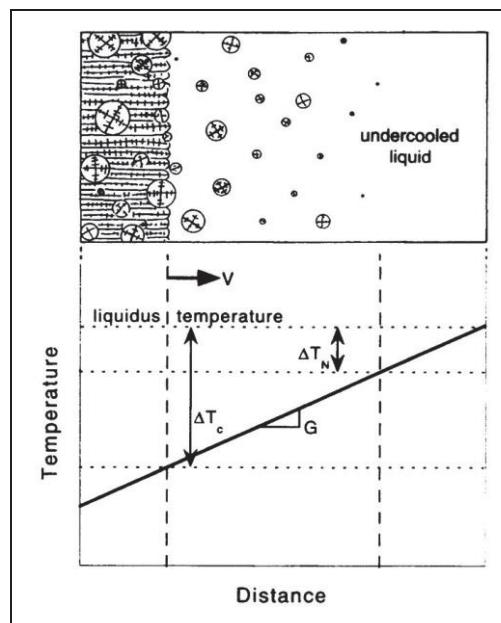


Figure 1.7 La solidification directionnelle progresse de gauche à droite. Ce schéma représente la compétition entre la croissance columnaire et équiaxe. Le front columnaire avance à une vitesse indiquée par V , tandis que le gradient de température à travers la zone de solidification est représenté par G . ΔT_N signifie le sous-refroidissement nécessaire pour la nucléation hétérogène sur les particules d'inoculant dans le liquide, tandis que ΔT_C indique le sous-refroidissement nécessaire pour la croissance du front columnaire

Tirée de O'Reilly (2016)

1.6 Modélisation de la macroségrégation

La méthode des éléments finis (MEF) représente un défi redoutable dans le domaine de la recherche sur la solidification, en raison de la nature multifacette du phénomène. Les processus de solidification impliquent des phénomènes multiphasiques complexes et une dynamique des fluides complexe, nécessitant des techniques de calcul avancées pour une prédition précise. La MEF émerge comme une méthode de choix, offrant un cadre robuste pour simuler les processus de solidification et prédire les motifs de macroségrégation. Contrairement aux études expérimentales, qui peuvent être coûteuses et chronophages, la MEF permet aux chercheurs

de prédire quantitativement l'occurrence et la gravité des défauts de solidification. Cette capacité facilite les études paramétriques axées sur l'amélioration de la qualité de la coulée. De plus, les simulations par MEF offrent des insights précieux sur les mécanismes physiques sous-jacents de la solidification, ouvrant la voie au développement de stratégies efficaces pour prévenir et réduire les défauts. Malgré les progrès significatifs dans les capacités de modélisation au cours des soixante dernières années, les modèles actuels présentent encore des limites en termes de précision prédictive. La principale contrainte est le manque de puissance de calcul, aggravé par le manque de données expérimentales adaptées pour la validation des modèles.

Les modèles de solidification sont intrinsèquement complexes, nécessitant des ressources informatiques importantes pour résoudre en raison de la multitude de facteurs qu'ils considèrent. Ces facteurs comprennent le transfert de chaleur, le transport de soluté, l'écoulement de fluide, le mouvement solide, les gradients thermiques, les taux de refroidissement, la convection de la fusion, la composition de l'alliage, la surchauffe de la fusion, la température du moule, et la déformation macroscopique de la coulée, ainsi que des phénomènes microscopiques tels que l'équilibre des phases, la nucléation, la formation de la structure, la ségrégation et l'écoulement (Ch Beckermann, 2002; Edward John Pickering, 2013; E. J. Pickering et al., 2015; Willers, Eckert, Michel, Haase, & Zouhar, 2005). L'interaction de ces paramètres dans les processus de coulée met en évidence la nature complexe de la macroségrégation. Bien qu'il puisse sembler attrayant de développer un modèle de solidification complet couvrant tous ces effets, il serait probablement impraticable pour les applications du monde réel. Par conséquent, les efforts de recherche actuels se concentrent sur l'incorporation d'interactions spécifiques pour aborder efficacement la macroségrégation et d'autres défis significatifs de la solidification.

1.6.1 Amélioration de la modélisation de la macroségrégation

1.6.1.1 Les modèles développés par Flemings et al.

À la fin des années 1960, Flemings et al. ont mené des recherches pionnières sur l'influence de l'écoulement fluide macroscopique sur la distribution de soluté (Schneider et Beckermann, 1995; Schneider et al., 1997). Leur travail a abouti au développement de l'équation de redistribution locale du soluté (LSRE), qui est un concept fondamental dans la modélisation de la macroségrégation. La LSRE a été formulée sur la base de la conservation de la masse et du soluté à l'intérieur d'un élément de volume de la zone pâteuse (mushy zone), comme représenté dans la Figure 1.8 (Merton C. Flemings, 2000). Flemings et al. ont émis l'hypothèse que le transfert de masse se produisait principalement en raison de l'écoulement fluide induit par la densité causée par le retrait de solidification, où la différence de densité entre les phases solide et liquide jouait un rôle crucial. Ils ont en outre supposé que la phase solide restait stationnaire avec une densité constante et sans la formation de pores (Merton C. Flemings, 1991, 2000; R. Mehrabian, M. Keane, & M. C. Flemings, 1970a; Edward John Pickering, 2013).

$$\frac{\partial f_l}{\partial C_l} = \left(\frac{1 - \beta}{1 - k} \right) \left[1 + \frac{\nu \nabla T}{\partial T / \partial t} \right] \frac{f_l}{C_l} \quad (1.1)$$

Dans l'équation, où f_l représente la fraction volumique de liquide, C_l représente la concentration du liquide en wt.%, $\beta = (\rho_s - \rho_l) / \rho_s$ représente le retrait de solidification, avec ρ_s et ρ_l désignant respectivement les densités du solide et du liquide. De plus, k coefficient de partition à l'équilibre, ν représente le vecteur de vitesse du liquide, ∇T représente le gradient de température, t représente le temps, et $\partial T / \partial t$ représente le taux de changement de température. Lorsqu'il n'y a pas d'écoulement interdendritique, la vitesse ν diminue, et en l'absence de retrait ($\beta = 0$) ou lorsqu'il n'y a pas d'écoulement pour accomoder précisément le retrait de solidification, l'équation (1.1) se simplifie à l'équation bien connue de Scheil (Edward John Pickering, 2013; Schaffnit, Stallybrass, Konrad, Stein, & Weinberg, 2015).

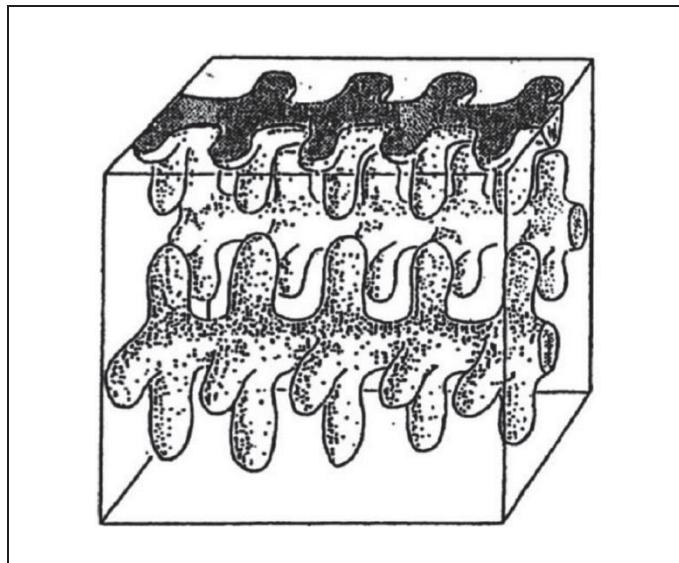


Figure 1.8 Diagramme illustrant l'élément de volume dans la zone pâteuse considéré lors de la formulation des équations de conservation

Tirée de Flemings (2000)

La ségrégation positive se produit lorsque la vitesse d'écoulement est plus lente que la vitesse de retrait ou lorsque l'écoulement se déplace dans la direction opposée (vers des régions de fraction solide plus faible) par rapport à l'écoulement de retrait. En revanche, la ségrégation négative se produit lorsque la vitesse d'écoulement est de magnitude supérieure et dans la même direction que l'écoulement de retrait (c'est-à-dire, vers des régions de température décroissante). Les solutions analytiques dérivées de la LSRE ont été corroborées par des études expérimentales (Mehrabian & Flemings, 1970; Mehrabian et al., 1970a), ce qui a permis de prédire les bandes riches et pauvres en soluté résultant de fluctuations thermiques. Ces solutions ont également démontré la formation de ségrégation inverse et de ségrégation dans la masselotte en supposant un gradient de température linéaire dans la zone pâteuse, avec des valeurs fixes de fraction liquide et du taux de solidification, pour la solidification unidirectionnelle avec des isothermes plane (Edward John Pickering, 2013).

Le modèle LSRE a été encore développé par le même groupe de recherche, en incorporant des écoulements entraînés par la flottabilité pour prendre en compte le mouvement du fluide dans la zone pâteuse (R. Mehrabian, M. A. Keane, & M. C. Flemings, 1970b). Cette expansion a

tenu compte des différences de densité du liquide résultant à la fois des effets thermiques et solutaux, connus sous le nom de convection thermosolutale. Cependant, comme le modèle supposait toujours un gradient de température dans la zone pâteuse (avec la concentration liée à la température via le liquidus du diagramme de phase), la densité du liquide était uniquement fonction de la température locale. Pour tenir compte de la résistance à l'écoulement du liquide posée par le réseau dendritique, les chercheurs ont intégré la loi de Darcy dans les équations de conservation. La loi de Darcy, qui régit l'écoulement des fluides dans les milieux poreux, a été jugée appropriée en raison de sa pertinence dans les situations impliquant un écoulement lent, laminaire avec une fraction liquide uniforme. Elle articule la corrélation proportionnelle entre le débit d'écoulement du fluide et le gradient de pression à travers un milieu poreux uniformément perméable sur une distance définie (M. Liu, Wu, Gan, Hanaor, & Chen, 2016; Chunping Zhang, 2020).

$$Q_t = -\frac{KA(\rho_b - \rho_a)}{\mu L} \quad (1.2)$$

Là où Q_t représente le débit total (mesuré en volume par unité de temps, tel que, m^3/s), il équivaut au produit de la perméabilité intrinsèque du milieu K (mesurée en m^2), de la section transversale disponible pour l'écoulement A (mesurée en m^2), et de la chute de pression totale $p_b - p_a$ (Pa). Cette quantité entière est divisée par la viscosité dynamique μ (en Pa.s) et la longueur sur laquelle la chute de pression se produit L (m).

Cette approche a permis le calcul des vitesses d'écoulement du liquide, en considérant la gravité et les chutes de pression à travers un élément de volume de la zone pâteuse dendritique (Edward John Pickering, 2013):

$$v = -\frac{k}{\mu f_l} (\nabla p + \rho_l g) \quad (1.3)$$

L'équation représente la viscosité dynamique du fluide interdendritique, désignée par μ , K la perméabilité de la zone pâteuse (mesurée en m^2), ∇p représentant le gradient de pression (mesuré en Pa), et g symbolisant le vecteur gravité (mesuré en m/s^2).

L'équation (1.1) peut être exprimée différemment en reconnaissant que le terme $(\partial T / \partial t) / \nabla T$ peut être interprété comme la vitesse de l'isotherme Rv (la LSRE simple est considérée momentanément). Ainsi, l'équation peut être restructurée comme suit:

$$\frac{\partial f_l}{\partial C_l} = \left(\frac{1 - \beta}{1 - k} \right) \left[1 + \frac{v}{R_v} \right] \frac{f_l}{C_l} \quad (1.4)$$

L'occurrence de la refusion locale, indiquant une augmentation de la fraction liquide, est observée lorsque les vitesses du fluide alignées avec la direction du mouvement de l'isotherme dépassent les vitesses de l'isotherme, ce qui indique une instabilité de l'écoulement. Cela est représenté par l'inégalité $\frac{|v|}{R_v} > 1$ lorsque la dérivée partielle de la fraction liquide par rapport à la concentration du liquidus devient positive. En termes plus simples, lorsque le liquide enrichi refroidi se déplace vers le point où il devient entièrement liquide (le liquidus), il peut provoquer une refusion locale s'il se déplace plus rapidement que l'isotherme lui-même. Ce phénomène conduit à la formation de canaux durables, tels que la ségrégation A, qui sont des motifs persistants dans le processus de solidification où certains éléments ou composants se concentrent dans des régions spécifiques (Edward John Pickering, 2013; Chunping Zhang, 2020).

Les modèles antérieurs étaient confrontés à plusieurs limitations, notamment la nécessité d'un gradient de température dans la zone pâteuse, l'ignorance de l'écoulement du fluide dans le liquide en vrac et des interactions entre les régions en vrac et pâteuses, une considération insuffisante de la conservation de l'énergie pour déterminer les valeurs transitoires, et la relation fixe entre la concentration en soluté et les profils de température. Ces contraintes découlaient de la dépendance vis-à-vis des diagrammes de phase pour déterminer la composition du liquide à des températures spécifiques, ce qui conduisait à des simplifications

significatives dans les modèles. Cependant, dans les années 1980, l'introduction de modèles multi-domaines suivis de modèles continus a marqué une avancée significative, éliminant progressivement ces simplifications (Edward John Pickering, 2013).

1.6.1.2 Modèles multi-domaines

Les modèles multi-domaines impliquent le développement d'équations de conservation pour la masse, le soluté, la quantité de mouvement et l'énergie individuellement pour chaque région - liquide, pâteuse et solide - puis le couplage de ces équations à travers les frontières mobiles entre elles. Par exemple, la quantité de mouvement du fluide dans le liquide en vrac est généralement décrite par les équations de Navier-Stokes pour l'écoulement convectif laminaire, tandis que dans la zone pâteuse, la loi de Darcy est utilisée. L'un des premiers efforts pour prévoir les champs de température transitoire de la zone pâteuse par le couplage des équations d'énergie et de quantité de mouvement a été réalisé avec un modèle multi-domaines conçu par Fujii et al. (Fujii, Poirier, & Flemings, 1979). Leur étude s'est concentrée sur la macroségrégation dans l'acier faiblement allié, en utilisant une LSRE modifiée pour les alliages multi-composants. Ce modèle a pris en compte la diffusion solide complète des atomes interstitiels (comportement de la règle de levier) et le comportement de Scheil pour les atomes substitutionnels. Notamment, dans leur modèle, la densité du liquide était déterminée à la fois par la concentration locale et la température, et ces champs n'étaient plus fixes.

Ridder et al. (Ridder, Kou, & Mehrabian, 1981) ont été les premiers à explorer l'impact des écoulements convectifs naturels dans le liquide en vrac sur les écoulements interdendritiques dans la zone pâteuse. Ils ont réalisé cela en couplant les équations de vitesse d'écoulement et de pression dans chaque domaine à travers l'interface du liquidus. Bien que des équations d'énergie et de quantité de mouvement aient été utilisées pour le liquide en vrac dans leur étude, les effets solutaux n'ont pas été pris en compte. Malgré les travaux pionniers sur les écoulements de liquide en vrac, ce traitement n'a pas prédit les températures de la zone pâteuse, nécessitant une connaissance préalable.

Szekely et Jassal (Szekely & Jassal, 1978) ont introduit peut-être le premier modèle véritablement prédictif pour le transport d'énergie et de quantité de mouvement, qui a également étudié les écoulements de liquide en vrac. Ils ont incorporé des expressions pour l'énergie et la quantité de mouvement dans les zones solide, pâteuse et liquide en vrac et ont couplé ces équations en utilisant les températures et les vitesses aux frontières des domaines. Cependant, un défi significatif avec l'approche multi-domaines est l'exigence de suivre les frontières entre le solide, la zone pâteuse et le liquide en vrac, ce qui peut être complexe et difficile. Ce problème est contourné dans les modèles continus, car ils comprennent un ensemble unique d'équations qui sont également applicables à travers le solide, la zone pâteuse et le liquide en vrac, éliminant ainsi le besoin de suivi des frontières (Edward John Pickering, 2013).

1.6.1.3 Modèles continus / modèles à domaine unique (continuum models / single-domain models)

À la fin des années 1980, Bennon et Incropera (Bennon & Incropera, 1987a) ont développé un modèle pour la transformation liquide-solide dans les systèmes binaires, en utilisant des formulations continues. Ils ont combiné des équations constitutives en utilisant une théorie de mélange simple et ont introduit des modifications aux équations de quantité de mouvement, en intégrant le terme de Darcy pour traiter la résistance solide dans la zone pâteuse. Les hypothèses comprenaient un écoulement laminaire newtonien avec une viscosité constante dans la phase liquide, ainsi que l'approximation de Boussinesq pour des différences de densité négligeables, sauf lorsqu'elles sont multipliées par l'accélération de la gravité. La fermeture du modèle impliquait le couplage des champs d'enthalpie et solutal à travers la solidification à l'équilibre de la règle de levier. En adoptant une approche continue, la nécessité d'une grille numérique mobile a été éliminée, les conditions aux limites étant uniquement appliquées aux surfaces de domaine externes. Par conséquent, ils ont pu présenter les premières prédictions numériques directes de la ségrégation A.

Pendant la même période, Beckermann et Viskanta ont développé un ensemble d'équations continues similaire au travail de Bennon et Incropera, avec une légère différence dans

l'équation de quantité de mouvement (C Beckermann & Viskanta, 1988). Leur approche consistait à utiliser une technique de moyennage volumique, largement considérée comme plus robuste, pour dériver des équations de conservation macroscopiques à partir de relations microscopiques pour chaque phase (C Beckermann & Viskanta, 1993). Cela a permis la synthèse d'un ensemble unifié d'équations applicable à tous les régimes. Alors que la résolution des équations microscopiques directement à petite échelle est entravée par les géométries interfaciales complexes dans la zone pâteuse, les moyennant sur un élément de volume approprié modifie l'échelle du problème, le rendant gérable à un niveau macroscopique. Pour des informations détaillées sur la procédure de moyennage volumique et les formulations macroscopiques résultantes, référez-vous au travail de Beckermann et Viskanta (C Beckermann & Viskanta, 1993). Des enquêtes ultérieures sur la méthode de moyennage volumique et les hypothèses sous-jacentes ont été menées par Ganesan, Poirier et Voller, entre autres (Ganesan & Poirier, 1990; Voller, Brent, & Prakash, 1989).

Après les recherches influentes discutées précédemment, de nombreuses investigations ont utilisé des itérations comparables ou adaptées des équations continues pour explorer divers phénomènes de solidification. Celles-ci incluent la formation de canaux dans les alliages solidifiés directionnellement (Felicelli, Heinrich, & Poirier, 1991, 1993; J. C. Heinrich, Felicelli, Nandapurkar, & Poirier, 1989; PJ Nandapurkar, Poirier, & Heinrich, 1991; P. Nandapurkar, Poirier, Heinrich, & Felicelli, 1989; Poirier & Heinrich, 1994), l'impact du retrait de solidification et la formation de pores (Chiang & Tsai, 1992; J. Heinrich & McBride, 2000; J. C. Heinrich & Poirier, 2004; McBride, Heinrich, & Poirier, 1999; Naterer, 1997; Schneider & Beckermann, 1995b; Xu & Li, 1991b), et l'influence des contraintes induites par la transformation (El-Bealy, 2000; El-Bealy & Fredriksson, 1996). De plus, de nombreux chercheurs ont examiné les formulations et hypothèses spécifiques des modèles originaux (Poirier & Nandapurkar, 1988; Michel Rappaz & Voller, 1990; Schneider & Beckermann, 1991).

Les premières approches continues présentaient un inconvénient dans leur incapacité à considérer adéquatement l'interaction entre les phases liquide et solide. Des caractéristiques clés de la solidification, telles que les concentrations solides locales, étaient soit moyennées

sur les deux phases, soit complètement ignorées. Cela a conduit à une incapacité à calculer le transport solide, responsable de la ségrégation basale négative dans les lingots, ce qui entraînait souvent des résultats de modèles en contradiction avec les observations expérimentales (C Beckermann & Viskanta, 1993). Pour remédier à cela, les premières tentatives d'incorporation de l'advection solide utilisaient deux approches principales. Une approche impliquait l'utilisation d'une seule équation de quantité de mouvement, où la vitesse de la zone pâteuse (un mélange de solide et de liquide) était modifiée à un stade spécifique de la solidification ou à travers une fonction à variation continue (Oldenburg & Spera, 1992; Edward John Pickering, 2013). Une autre approche, développée par Ni et Beckermann, a introduit un modèle 'à deux phases'. Ce modèle utilisait des équations de conservation moyennées sur le volume séparées pour les phases solide et liquide, incorporant des termes de transfert interfacial (Ni & Beckermann, 1991). Le mouvement du solide et du liquide, ainsi que le transfert de quantité de mouvement entre eux, était pris en compte en utilisant une viscosité solide effective variant en fonction de la fraction solide locale. Si le solide formait une structure continue, la viscosité solide était considérée comme infinie, supposant une rigidité parfaite. En revanche, si le solide ne formait pas une structure continue, la viscosité solide était ajustée entre zéro et l'infini en fonction de la nature de l'environnement solide. L'approche à deux phases offre plusieurs avantages. Elle élimine le besoin d'imposer des relations entre les vitesses liquides et solides et permet la modélisation de phénomènes tels que le tassemement des grains solides libres. De plus, elle peut fournir des prédictions pour les compositions et les températures interfaciales liquides et solides, et elle a la capacité d'incorporer des calculs de nucléation et de croissance des grains. Wang et Beckermann ont utilisé un modèle à deux phases pour étudier certains aspects de la solidification dendritique équiaxe, tels que le tassemement des grains équiaxes et la transition couramment observée de la structure columnaire à équiaxe (TCE) dans les lingots d'acier (C. Beckermann & Wang, 1996; C. Y. Wang & Beckermann, 1996a, 1996b). Un aspect significatif de leur méthodologie était l'introduction d'une enveloppe de grain, représentée dans la Figure 1.9 (Combeau, Založník, Hans, & Richy, 2009). Cette enveloppe de grain servait de frontière théorique séparant les régions liquides interdendritiques et extradendritiques. À travers cette interface d'enveloppe, les équations microscopiques régissant la croissance des

grains et la composition du liquide pouvaient être connectées avec des termes macroscopiques, améliorant ainsi les capacités prédictives du modèle.

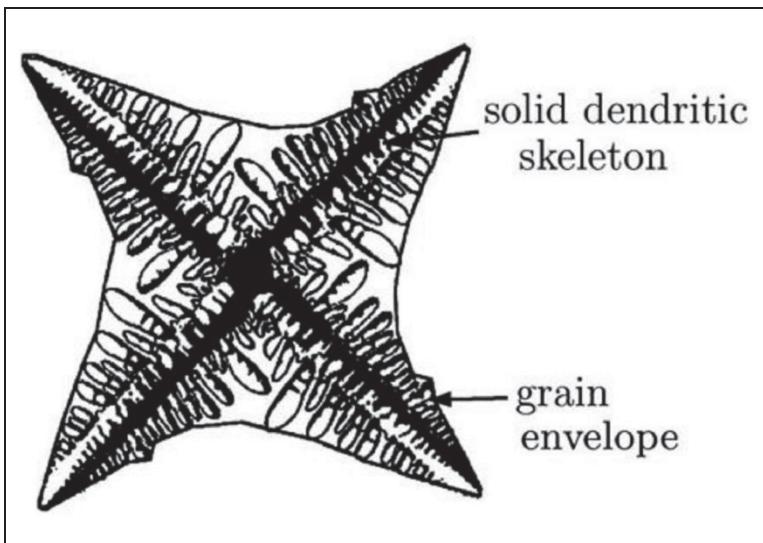


Figure 1.9 La représentation d'un grain à l'aide d'une enveloppe enveloppant à la fois un squelette solide et un liquide interdendritique
Tirée de Combeau & Zalonžnik (2009)

Au milieu des années 1990, les chercheurs ont commencé à adapter les formulations continues pour traiter les systèmes multicomposants. Schneider et Beckermann ont développé un modèle à deux phases multicomposants complet, qu'ils ont appliqué pour analyser un lingot d'acier faiblement allié (Schneider & Beckermann, 1995a). Ce modèle impliquait la résolution d'équations de conservation des espèces séparément pour chaque composant du système dans les phases liquide et solide, couplant les équations de conservation de l'énergie et des espèces par le biais des exigences d'équilibre thermodynamique à l'interface solide/liquide, et tenant compte des différents niveaux de diffusion à l'état solide. Les applications ultérieures de ce modèle ont inclus l'étude de la formation de taches de rousseur dans les superalliages à base de Ni, marquant l'une des premières investigations en modélisation tridimensionnelle (3D) de tels phénomènes (Boettinger, Kattner, Coriell, Chang, & Mueller, 1995; Felicelli, Poirier, Giamei, & Heinrich, 1997; Felicelli, Poirier, & Heinrich, 1998; Schneider, Gu, Beckermann, Boettinger, & Kattner, 1997). Bien que d'autres approches multicomposants aient été présentées par des chercheurs tels que Vannier (Vannier, Combeau,

& Lesoult, 1993) et Krane et Incropera (Krane & Incropera, 1997), elles ne sont pas aussi largement utilisées dans le domaine.

1.6.1.4 Avancées récentes dans la modélisation

À la suite des modèles biphasiques pionniers introduits par Beckermann et al., une attention significative a été accordée à l'étude de la formation, de la croissance et de la mobilité des grains équiaxes dans les mélanges en convection, en se concentrant particulièrement sur la transition de colonnaire à équiaxe (TCE). Beckermann a souligné l'importance de ces recherches en 2000, soulignant leur importance pour prédire la ségrégation de base négative dans les lingots (Christoph Beckermann, 2000). Il va de soi que ces modèles serviraient également d'outils fondamentaux pour prévoir la ségrégation en V et aider à la localisation des agrégats en A, qui ne se trouvent généralement pas dans les zones équiaxes (Edward John Pickering, 2013).

Les explorations tout au long du 21e siècle ont inclus l'expansion des modèles biphasiques (Combeau et al., 2009; Lesoult, 2005; Wu, Ludwig, Bührig-Polaczek, Fehlbier, & Sahm, 2003) pour accommoder les comportements variés des grains équiaxes globulaires et dendritiques. De plus, de nouvelles formulations ont émergé (Ciobanas & Fautrelle, 2007a, 2007b), y compris le traitement triphasique de Ludwig, Wu et al., qui délimite les phases solides colonnaire et équiaxe stationnaires, ainsi que la phase de métal en fusion parente (Ludwig & Wu, 2005; Tanzer et al., 2009; Wu & Ludwig, 2006). Martorano et al. (M. A. Martorano, Beckermann, & Gandin, 2003) se sont penchés sur la faisabilité d'un critère de TCE fondé sur le champ de soluté des grains équiaxes en croissance entravant l'avancement de la solidification colonnaire, un concept connu sous le nom de "blocage doux". Cette approche a été juxtaposée au critère traditionnel de blocage mécanique, où les grains équiaxes en amont d'un front colonnaire empêchent physiquement sa progression. Wu, Ludwig et leurs collègues ont construit sur les modèles de solidification équiaxe précédents en utilisant une approche biphasique pour calculer les vitesses des "phases hydrodynamiques" et résoudre le transport de masse et de soluté à travers trois régions de phase distinctes connues sous le nom de "phases thermodynamiques" (M. Rappaz & Thévoz, 1987; C. Y. Wang & Beckermann, 1993, 1996a,

1996b; Wu, Ludwig, & Fjeld, 2010). Le métal fondu interdendritique et les dendrites solides, contenues dans une enveloppe de grain, ont été traités comme une seule phase hydrodynamique partageant la même vitesse, tandis que l'autre phase hydrodynamique comprenait le liquide extradendritique. Les trois régions de phase thermodynamique comprenaient les dendrites solides, le métal fondu interdendritique et le métal extradendritique. Ce modèle a ensuite été étendu pour englober la solidification mixte colonnaire-équiaxe, ce qui nécessitait l'inclusion de cinq régions de phase thermodynamique : les dendrites solides dans les grains équiaxes, le métal interdendritique entre les dendrites équiaxes, les dendrites solides dans la zone colonnaire, le métal interdendritique entre les dendrites colonnaires, et le métal extradendritique. De plus, trois phases hydrodynamiques, conformément à leur traitement original en trois phases, ont été prises en compte dans ce modèle étendu (Wu, Fjeld, & Ludwig, 2010; Wu, Ludwig, et al., 2010). Dans une étude récente, Ludwig et ses collègues ont appliqué leur modèle initial binaire à trois phases pour analyser la macroségrégation dans un lingot d'acier de 2,45 tonnes (J. Li, Wu, Ludwig, & Kharicha, 2012; Wu & Ludwig, 2006). En comparant les résultats avec ceux obtenus à partir d'un modèle à deux phases et des données expérimentales, des disparités notables sont apparues. De manière surprenante, le modèle simplifié à deux phases, se concentrant uniquement sur la solidification colonnaire, était mieux aligné avec les observations expérimentales, tandis que la simulation à trois phases donnait des résultats significativement différents. Cette divergence a conduit à la spéculation selon laquelle l'approche à trois phases aurait pu générer un nombre excessif de grains équiaxes, ou alternativement, le lingot expérimental aurait principalement subi une solidification colonnaire.

Ces dernières années, plusieurs recherches se sont concentrées sur le perfectionnement des techniques et des schémas de solution numérique (I. L. Ferreira, Voller, Nestler, & Garcia, 2009; Gouttebroze, Bellet, & Combeau, 2007; D. R. Liu, Sang, Kang, & Li, 2010; Pardeshi, Voller, Singh, & Dutta, 2008; P. Sung, Poirier, & Felicelli, 2001; Voller, Mouchmov, & Cross, 2004), en s'appuyant sur les travaux antérieurs d'Ahmad et al. en 1998 (Ahmad et al., 1998). De plus, des efforts ont été déployés pour intégrer les contraintes mécaniques dans les simulations (Bellet, Boughanmi, & Fidel, 2012; W. Liu, 2005). Cependant, une part importante

de la recherche a utilisé des simulations binaires simplifiées monophasées (Singh, Basu, & Ghosh, 2006; Singh, Pardeshi, & Basu, 2001; P. K. Sung, Poirier, & Felicelli, 2002). Cette préférence est probablement attribuée aux complexités et aux importantes ressources informatiques nécessaires pour les grandes simulations multiphasiques, comme discuté dans la section suivante (Edward John Pickering, 2013).

Actuellement, les modèles macroscopiques, qui englobent la dynamique de la génération, de la croissance et de l'installation des grains équiaxes, présentent des limitations (Edward John Pickering, 2013; Chunping Zhang, 2020). Ils s'appliquent principalement aux systèmes binaires et aux géométries à petite échelle, ce qui rend difficile de résoudre avec précision les ségrégations A et la transition de la colonne à l'équiaxe (TCE). De plus, ces modèles entraînent des coûts de calcul élevés, ce qui les rend impraticables pour les applications industrielles (Ge et al., 2017; J. Li, Wu, Hao, Kharicha, & Ludwig, 2012; Ludwig & Wu, 2005). En conséquence, de nombreuses recherches récentes sont revenues aux méthodologies originales proposées par Bennon, Incropera et Beckermann et al. pour faire des prédictions (Fujii et al., 1979; Ganesan & Poirier, 1990; Ridder et al., 1981; Szekely & Jassal, 1978).

Compte tenu de ces défis et des enseignements tirés des études antérieures, le modèle liquide-solide "à deux phases" émerge comme une solution prometteuse. Ce modèle utilise des calculs séparés moyennés sur le volume et intègre la conservation couplée de la masse, du moment cinétique, de l'énergie, du soluté et des espèces. Une telle approche présente un potentiel pour résoudre des problèmes à plus grande échelle tout en trouvant un équilibre entre l'applicabilité industrielle et l'efficacité computationnelle.

1.6.2 Limitations des macromodèles

Les macro-modélisateurs sont généralement d'accord pour dire que se fier uniquement aux modèles de macroségrégation les plus sophistiqués pour la coulée de lingots peut ne pas donner des résultats quantitatifs précis (Bennon & Incropera, 1987a; Edward John Pickering, 2013). Souvent, ces modèles ont du mal à prédire de manière fiable les tendances de base, notamment dans les logiciels commerciaux. Cette divergence peut être attribuée à deux facteurs

principaux: premièrement, les ressources informatiques importantes nécessaires aux modèles macro complexes, ce qui impose par conséquent des limitations et des compromis aux modèles eux-mêmes, et deuxièmement, les incertitudes entourant les paramètres d'entrée et les modèles auxiliaires.

1.6.2.1 Modèle, géométrie et maillages

Gu et Beckermann ont noté en 1999 (Bennon & Incropora, 1987a, 1987b) qu'utiliser le modèle à deux phases multicomposants développé par Schneider et Beckermann Beckermann (Schneider & Beckermann, 1995a) pour prédire les motifs de macroségrégation dans un grand lingot commercial (mesurant 65 tonnes, avec des dimensions de $1,016 \times 2,083 \times 2,819$ mètres cubes) nécessiterait des ressources informatiques considérables. Même avec une géométrie réduite, le temps de calcul nécessaire pour la taille de maillage nécessaire s'élèverait à des années.

Pour atténuer ce problème, on pourrait envisager de réduire la taille du système modèle, d'augmenter la taille du maillage, ou d'introduire des simplifications significatives. Cependant, ces approches peuvent entraîner une réduction drastique des temps de calcul. De plus, l'utilisation de la symétrie est cruciale, mais il convient de faire preuve de prudence lors de l'extrapolation des résultats à des problèmes plus importants, car la macroségrégation ne se produit généralement pas dans de petits lingots. De plus, l'augmentation de la taille du maillage peut entraîner une résolution insuffisante de certaines caractéristiques, telles que les ségrégations de type A, modifiant potentiellement les motifs de ségrégation calculés. De même, l'introduction de trop de simplifications peut compromettre gravement la précision prédictive d'un modèle (Edward John Pickering, 2013; Chunping Zhang, 2020).

1.6.2.2 Paramètres d'entrée

Les modèles de macroségrégation dépendent fortement des paramètres d'entrée qui leur sont fournis. Ces paramètres comprennent généralement diverses propriétés pertinentes pour la modélisation de la solidification, notamment des facteurs dépendant de la température

représentant les caractéristiques thermophysiques des matériaux (tels que la densité, la conductivité thermique, les espacements des bras de dendrites, les capacités thermiques spécifiques, les chaleurs latentes et l'émissivité), les propriétés thermomécaniques (comme le module de Young, la sensibilité au taux de déformation, la sensibilité à la déformation, la viscosité dynamique, le coefficient de Poisson, la contrainte limite d'élasticité et le facteur de retrait de soluté), ainsi que les comportements de thermodiffusion (y compris les coefficients de partition, les pentes du liquidus, les coefficients de dilatation thermique et les coefficients de dilatation solutale de chaque soluté). Même de légères déviations de ces valeurs ont été observées pour influencer de manière significative les résultats des modèles (J. Li, Wu, Ludwig, et al., 2012; Schneider & Beckermann, 1991, 1995a; Wu & Ludwig, 2006; Wu, Ludwig, et al., 2010). Bien que certains logiciels puissent fournir certains paramètres matériels pour les aciers, leurs sorties peuvent être limitées dans leur forme actuelle, ne fournissant souvent que des valeurs pour la solidification à l'équilibre. De plus, certains paramètres, tels que ceux concernant la nucléation des grains équiaxes et les espacements des bras de dendrites, ne peuvent être déterminés que de manière expérimentale (Michel Rappaz & Voller, 1990).

1.6.2.3 Modèles auxiliaires

Les modèles auxiliaires de microsegregation et de perméabilité, qui sont des composants essentiels des simulations de macroségrégation, souffrent de similarités incertaines. Les modèles de microsegregation jouent un rôle crucial dans les études de macroségrégation, car c'est la microsegregation des éléments à l'échelle dendritique qui conduit finalement à l'enrichissement ou à l'appauvrissement du liquide et à la ségrégation macroscopique des espèces chimiques pendant la solidification des lingots. Dès 1969, Fridberg et al. ont souligné l'impact substantiel du choix du modèle de microsegregation sur les résultats de la solidification prédictive.

Figure 1.10 (Fridberg, Torndahl, & Hillert, 1969) illustre la comparaison des profils de fraction liquide pour un alliage 0.5C-3Mn-3Ni (wt.%) calculés en utilisant divers modèles de microsegregation, y compris le modèle de règle de levier d'équilibre standard et les modèles alternatifs proposés par Brody-Flemings (Brody, 1965), Clyne-Kurz (Clyne & Kurz, 1981),

Ohnaka-Kobayashi (KOBAYASHI, 1988a, 1988b; Ohnaka, 1984), et Ganesan-Voller-Beckermann (Ganesan & Poirier, 1989; Voller & Beckermann, 1999).

La divergence significative de la fraction liquide en fonction de la température observée entre différents modèles de microségrégation indique des températures du solidus inférieures variées et des inclinaisons distinctes des courbes prédictives. Ces écarts dans les zones de solidification peuvent profondément influencer la perméabilité de la zone pâteuse, les propriétés thermophysiques et le comportement de distribution chimique résultant. Par conséquent, le choix du modèle de microségrégation approprié revêt une importance primordiale pour garantir l'exactitude de toute prédiction de macroségrégation (Guan, Ji, Zhu, & Deng, 2018; Edward John Pickering, 2013).

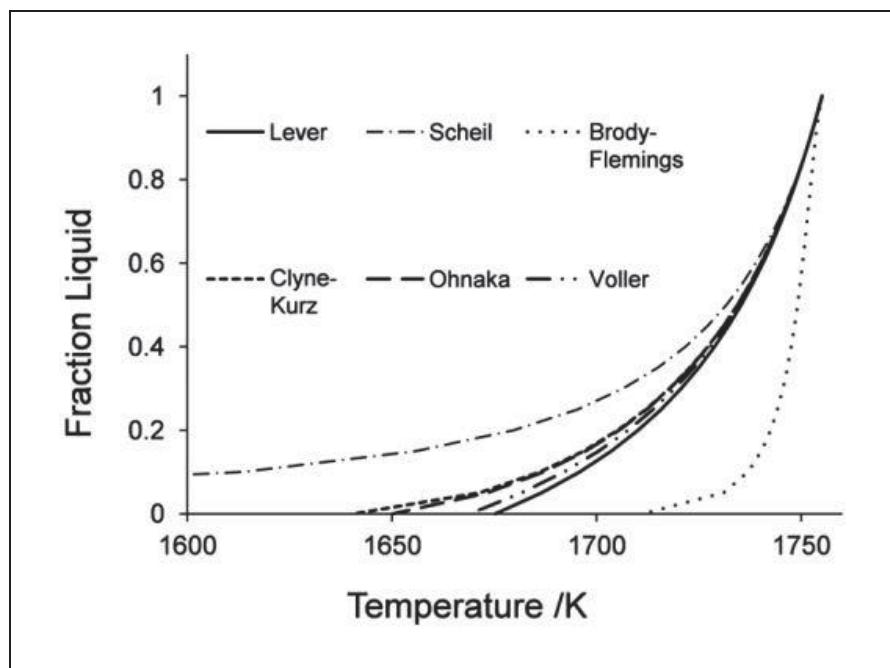


Figure 1.10 Comparaison des graphiques de fraction liquide en fonction de la température pour un alliage de 0.5% C-3% Mn-3% Mo (wt%) obtenus à partir de différents modèles de microségrégation

Tirée de Fridberg & Torndahl (1969)

Pour prévoir avec précision l'écoulement des fluides dans la zone pâteuse, il est impératif de déterminer sa perméabilité, notée K . La perméabilité est intrinsèquement un tenseur d'ordre

deux, ce qui signifie qu'elle dépend de la direction de l'écoulement du fluide par rapport à une structure poreuse. Cependant, les expérimentateurs et les modélisateurs macroscopiques ont couramment supposé qu'elle est isotrope ou qu'elle ne comporte que deux composants, alignés parallèlement et perpendiculairement aux bras dendritiques principaux. Néanmoins, développer des modèles de perméabilité a posé un défi significatif pendant de nombreuses années, et à juste titre. Sa détermination est fortement influencée par divers facteurs, notamment la fraction liquide locale, les espacements des bras dendritiques et les morphologies dendritiques. Par conséquent, la perméabilité varie non seulement de manière continue dans une zone pâteuse, mais elle montre également une variabilité à travers différents alliages. Des estimations des fonctions de perméabilité ont été tentées en approximant la géométrie de la zone pâteuse et en utilisant des formes spécialisées de la loi de Darcy, telles que le modèle de Hagen-Poiseuille pour l'écoulement à travers un faisceau de tubes capillaires ou le modèle de Blake-Kozeny (également appelé modèle de Carman-Kozeny) pour l'écoulement à travers un lit de solides empilés (Edward John Pickering, 2013). Les résultats des macromodèles ont mis en évidence que l'utilisation de différentes fonctions de perméabilité de la zone pâteuse et l'ignorance de l'anisotropie de la perméabilité peuvent avoir des impacts substantiels sur les prédictions de macroségrégation. Ces effets s'étendent à des variables telles que la quantité, la longueur et l'alignement des ségrégations canalisées (Krane & Incropera, 1997; Schneider & Beckermann, 1995b; Singh et al., 2006; Singh et al., 2001; Yoo & Viskanta, 1992).

1.6.2.4 Déformation thermomécanique des solides

Dans le domaine des analyses de simulation par la méthode des éléments finis (MEF), le traitement des matériaux solides adopte deux approches principales. Initialement, les solides sont souvent représentés comme rigides, fixes et immobiles, négligeant toute rétraction thermomécanique (Ch Beckermann, 2002). En revanche, dans d'autres scénarios, des facteurs clés liés à la rétraction de solidification et à la déformation de la structure solide, tels que le taux de contraction de solidification (Ehlen, Ludwig, Sahm, & Bührig-Polaczek, 2003), la vitesse de coulée (Chiang & Tsai, 1992; Gao, Jie, Liu, & Luo, 2017), la longueur de remplissage (Lan & Zhang, 2014), ou la vitesse d'écoulement (J. C. Heinrich & Poirier, 2004), sont traités comme des constantes en raison de l'absence de paramètres thermomécaniques

dépendant de la température des matériaux (Ehlen et al., 2003) ou d'outils de modélisation appropriés (Reikher, Gerber, Pillai, & Jen, 2010). Cependant, ces approches s'écartent de la réalité, car elles ne tiennent pas compte des observations significatives comme la rétraction au sommet et la contraction radiale couramment observées dans les grands lingots, ce qui peut entraîner des inexactitudes en négligeant les changements de composition et des propriétés mécaniques de la phase solidifiée (Ch Beckermann, 2002). Par conséquent, il est crucial de déterminer s'il faut inclure la déformation thermomécanique des solides dans les investigations numériques du comportement de solidification dans les grands lingots, malgré l'augmentation des ressources informatiques associée (Chunping Zhang, 2020).

1.6.3 Méthodologies simplifiées

Les exigences computationnelles actuelles des modèles de macroségrégation pour les grands lingots sont indéniablement contraignantes, donnant souvent des prédictions qui divergent des tendances établies. Bien que le développement continu des modèles reste crucial, il y a un besoin urgent d'approches simplifiées qui peuvent fournir des prédictions réalistes sans des temps de calcul prolongés. Les utilisateurs industriels sont réticents à investir un temps significatif dans l'exécution de modèles complexes si les résultats ne sont pas pratiquement utiles (Edward John Pickering, 2013).

Des études ont montré que la mise en œuvre de certaines simplifications dans les modèles peut réduire considérablement les temps de calcul tout en produisant des résultats comparables. Par exemple, Schneider et Beckermann ont démontré qu'en limitant le nombre de composants du système uniquement à ceux qui affectent le plus la ségrégation et la flottabilité, des résultats similaires ont été obtenus par rapport à l'utilisation d'un ensemble complet de composants (Schneider & Beckermann, 1995a). Cependant, même avec des alliages binaires assez simplistes considérés dans des codes commerciaux comme MAGMA, THERCAST et ProCAST, les calculs complets de macroségrégation peuvent encore prendre des jours ou des semaines pour s'achever sur les modestes grappes informatiques couramment utilisées dans les environnements industriels.

Les fabricants ont souvent la flexibilité d'ajuster divers paramètres de traitement et de modifier légèrement les compositions d'alliages pour atténuer la macroségrégation. Ainsi, il est nécessaire de comparer rapidement les conditions de coulée et leurs impacts potentiels sur la macroségrégation. Cela peut être facilité par des modèles de critères, qui, malgré leur simplicité, sont fondés sur des principes théoriques solides. Ces modèles, comprenant le critère de Niyama pour la porosité et les critères de nombre de Rayleigh et de Suzuki pour la formation de ségrégats en canaux, permettent une évaluation rapide des résultats potentiels. L'évaluation de ces critères peut être réalisée simplement en manipulant les résultats d'un calcul "purement thermique", en se concentrant uniquement sur le champ de température et en ignorant l'écoulement de fluide et la macroségrégation. Il a été observé que les champs de température prédits par une analyse de la conduction thermique de base s'alignent étroitement avec ceux générés dans des simulations de macroségrégation entièrement couplées (Gu & Beckermann, 1999).

CHAPITRE 2

MATÉRIAUX ET MÉTHODES EXPÉRIMENTALES

2.1 Introduction

Ce chapitre présente la méthodologie complète adoptée pour cette étude, qui intègre des méthodes expérimentales et numériques. Une vaste enquête expérimentale a été menée à l'échelle industrielle pour explorer en profondeur la macroségrégation, la microporosité de retrait, la cavité de retrait et le comportement thermique au sein d'un lingot de taille réelle, dans le but principal de valider le modèle de simulation. La simulation du modèle de macroségrégation a été réalisée à l'aide du logiciel de code à éléments finis (FE) THERCAST®, avec une validation effectuée par rapport aux mesures expérimentales. De plus, une étude de la variation de la configuration du haut de lingot a été menée pour affiner la conception du haut de lingot, améliorant ainsi la compréhension globale du processus.

2.2 Mesures expérimentales

Ce projet a été mené en collaboration avec Finkl Steel-Sorel, situé à Saint-Joseph-de-Sorel, au Québec. Finkl Steel est une entreprise de forge renommée avec une histoire de plus de 70 ans. Des matériaux de ferraille solide provenant de sources contrôlées sont fondus pour former un bain liquide à l'aide d'un four à arc électrique. Les premières étapes de raffinage consistent à éliminer le phosphore, une impureté indésirable connue pour causer la fragilisation. Ensuite, la température est élevée pour faciliter le transfert dans une poche en vue de son transfert vers la station de raffinage ou le four de métallurgie des creusets. Le four de métallurgie des creusets ou la station de raffinage permettent un contrôle précis de la composition chimique. Cette étape se concentre sur l'élimination du soufre, une autre impureté contribuant à la fragilisation. Un contrôle précis de l'oxydation est maintenu et des fondants sont introduits pour capturer les impuretés. Ensuite, une technique de dégazage sous vide est utilisée pour minimiser les niveaux d'hydrogène, d'oxygène et d'azote. Le processus de coulée de lingots chez Finkl Steel

intègre une protection à l'argon, un coulage par le bas et un remplissage par le bas pour garantir la production de lingots de haute qualité. La configuration de coulée de lingots comprend plusieurs composants essentiels tels que le moule, la masselotte, les panneaux latéraux réfractaires, la trompette, la poche et le coureur. L'acier fondu est introduit dans les moules par le bas à travers un système de trompette et de coureur jusqu'à atteindre le poids cible. La conception des moules permet l'élimination du matériau solidifié.

Dans ce projet, un lingot d'acier de forme polygonale de 12 tonnes a été fabriqué à l'aide d'un système de coulée par le bas dans un moule en fonte à grande extrémité. La cavité du moule mesurait environ 2000 mm de hauteur, avec un diamètre supérieur de 1266 mm et un diamètre inférieur de 1000 mm. La masselotte, d'une hauteur de 381 mm, était équipée de carreaux isolants mesurant 203 mm de hauteur. Ces carreaux dépassaient de 26 mm du bord supérieur de la masselotte et mesuraient 177 mm de hauteur à l'intérieur de la masselotte elle-même. De plus, la surface supérieure de la masselotte était protégée par deux couvertures exothermiques (exothermic caps) composées de composés Al, SiO₂ et Al₂O₃, générant une chaleur significative au contact du métal en fusion. La réaction exothermique principale, déterminée par la composition chimique de la couverture exothermique, peut être représentée par l'équation chimique spécifique ($2\text{Al} + \text{Fe}_2\text{O}_3 = 2\text{Fe} + \text{Al}_2\text{O}_3 + \text{Q}$) (Hurtuk, 2008; Yadong et al., 2019).

Figure 2.1 illustre l'installation du lingot industriel coulé, comprenant la masselotte et le lingot de 12 MT, la trompette, le moule, et le lingot de 12 MT. Dans le processus de fabrication, de l'acier liquide de l'alliage choisi (AISI 4130 modifié), avec la composition chimique initiale décrite dans le Tableau 2.1, a été obtenu en faisant fondre une charge de ferraille d'acier solide dans un four à arc électrique, puis affiné à l'aide d'un four de métallurgie des poches et d'une technique de dégazage sous vide. Après préparation, le métal en fusion a été versé depuis le bas du moule pendant 26 minutes à 1580°C via un système de trompette et de coureur jusqu'à ce que le moule soit complètement rempli jusqu'au sommet de la couche isolante. L'énergie totale libérée lors de l'allumage des deux couvertures exothermiques avant la fin du remplissage s'élevait à 72 MJ.

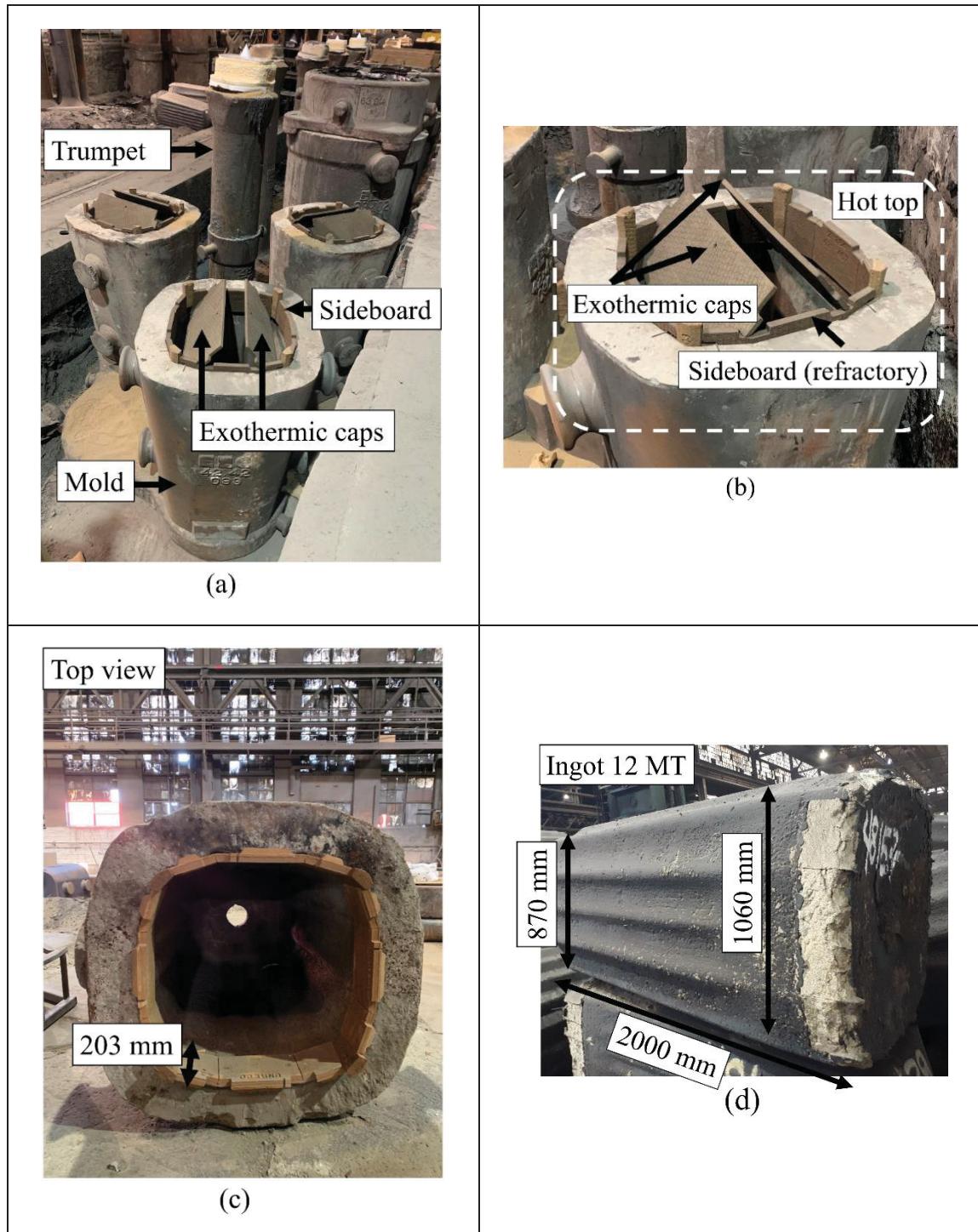


Figure 2.1 (a) Installation du lingot industriel coulé, (b) La masselotte du moule 12 MT, (c) La masselotte vue de dessus, et (d) Le lingot de 12 MT

Tableau 2.1 La composition chimique nominale en wt. % de l'alliage AISI 4130 modifié

C	Mn	P	S	Si	Ni	Cr	Mo	Cu	Fe
0.32	0.57	0.015	0.001	0.27	0.23	1.08	0.34	0.16	Équilibre

Tout au long des processus de coulée et de solidification, la température du moule a été étroitement surveillée à l'aide de sept thermocouples stratégiquement positionnés, chacun placé à une profondeur de 25 mm à l'intérieur de la paroi du moule depuis sa surface externe, comme le montre la Figure 2.2. Parmi ceux-ci, trois thermocouples (TC1, TC2 et TC3) étaient situés à l'intérieur de la masselotte à des distances de 51 mm, 127 mm et 279 mm sous la surface supérieure du moule, respectivement, tandis que les quatre autres étaient répartis sur la partie supérieure (TC4) à une distance de 686 mm, la partie médiane (TC5) à une distance de 991 mm, et les sections inférieures du moule (TC6, TC7) à des distances de 1295 mm et 1600 mm sous la surface supérieure du moule, comme détaillé dans la Figure 2.2a.

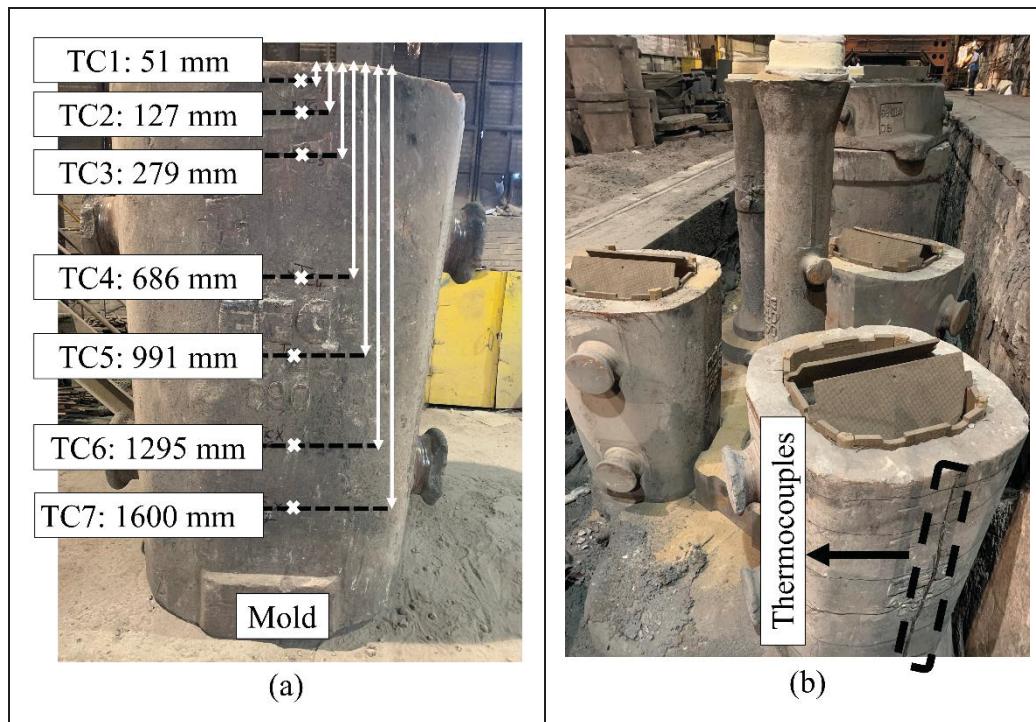


Figure 2.2 (a) La position des 7 thermocouples (TC1 à TC7) sur la surface externe du moule du lingot de 12 MT, (b) Le moule, ainsi que les thermocouples, est installé dans le système de coulée

Une fois la solidification terminée et le lingot retiré du moule, la profondeur de la cavité de retrait par rapport au bord le plus élevé de la paroi du lingot a été déterminée. Ensuite, une section longitudinale englobant l'ensemble du lingot (comprenant à la fois le corps et la masselotte) a été coupée depuis son centre (Figure 2.3a). Dans les étapes suivantes de l'expérience, cette section longitudinale centrale, mesurant 25,4 mm d'épaisseur, a été divisée en deux sections distinctes (Figure 2.3b). Les Figure 2.3a, b, c, d, et e illustrent les étapes séquentielles du processus de découpe. Une de ces sections (côté gauche comme indiqué sur la Figure 2.3c) a été ensuite divisée en dix blocs individuels. Ces blocs ont été soumis à un processus de meulage et leurs faces axiales ont été gravées dans une solution à 50% HCl-50% H₂O à 50 °C pour révéler les motifs de macroségrégation. De plus, une inspection par ressuage a été réalisée (Dye Penetrant Inspection :DPI) a été réalisée sur chaque bloc pour évaluer la microporosité. Figure 2.3d illustre la présence de microporosité sur les blocs de la ligne médiane supérieure. De plus, l'autre moitié de la section longitudinale (côté droit) a été divisée en 370 petits échantillons, chaque échantillon subissant des mesures chimiques pour générer une carte de macroségrégation pour chaque élément (Figure 2.3e). L'analyse chimique a été réalisée à l'aide d'un spectromètre à émission optique Thermo Scientific ARLTM 4460 (Thermo Fisher Scientific Inc., Waltham, MA, USA). Ensuite, les ratios de ségrégation de chaque échantillon ont été calculés à l'aide de la formule: $R^i = (\omega^i - \omega_0^i) / \omega_0^i$, où R^i représente le ratio de ségrégation de l'élément de soluté ω^i , la concentration locale du soluté, et ω_0^i est la concentration initiale. Une valeur positive ou négative de R^i indique une ségrégation positive ou négative, respectivement. Ces ratios de ségrégation ont ensuite été utilisés pour construire des motifs de macroségrégation pour les éléments sur l'ensemble de la section longitudinale. Ce processus de cartographie a été effectué à l'aide de MATLAB® (The MathWorks Inc., Natick, MA, USA) (MATLAB, 2012b). Malgré sa longueur et sa consommation de temps, cette méthodologie assure une compréhension complète des processus de coulée et de solidification, fournissant des perspectives précieuses sur le comportement thermique, ainsi que la formation de défauts, y compris la macroségrégation et la microporosité, dans un vrai lingot de grande taille de 12 MT.

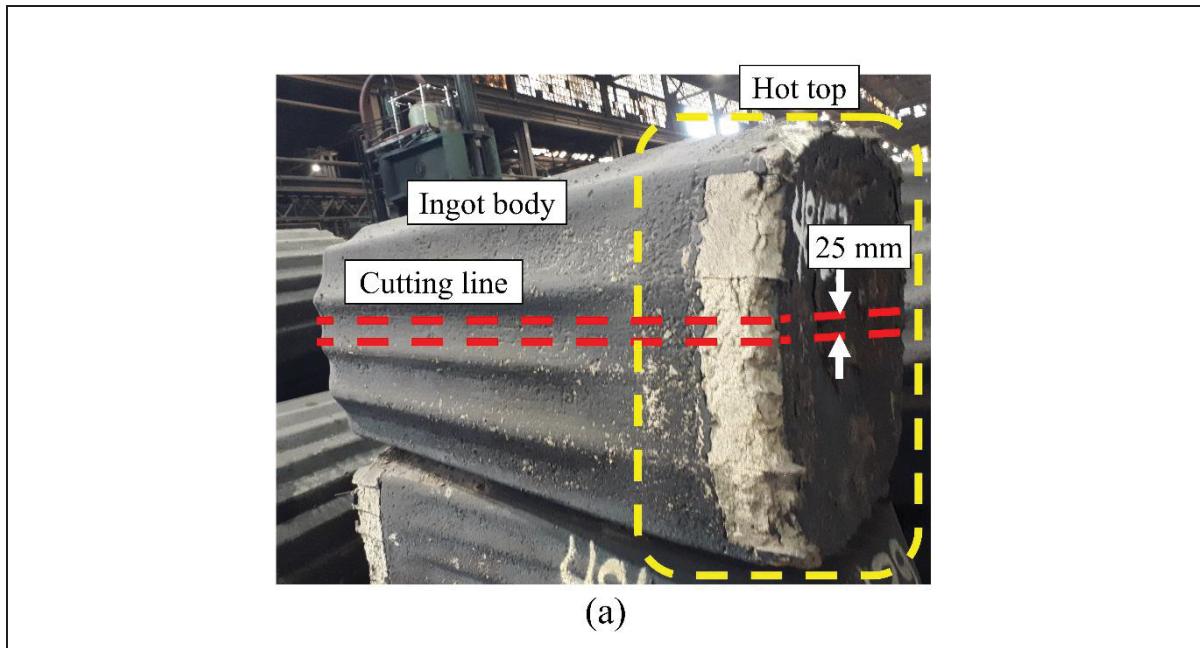


Figure 2.3 (a) L'ingot de 12 MT post-solidification, avec une ligne pointillée rouge indiquant la section de découpe

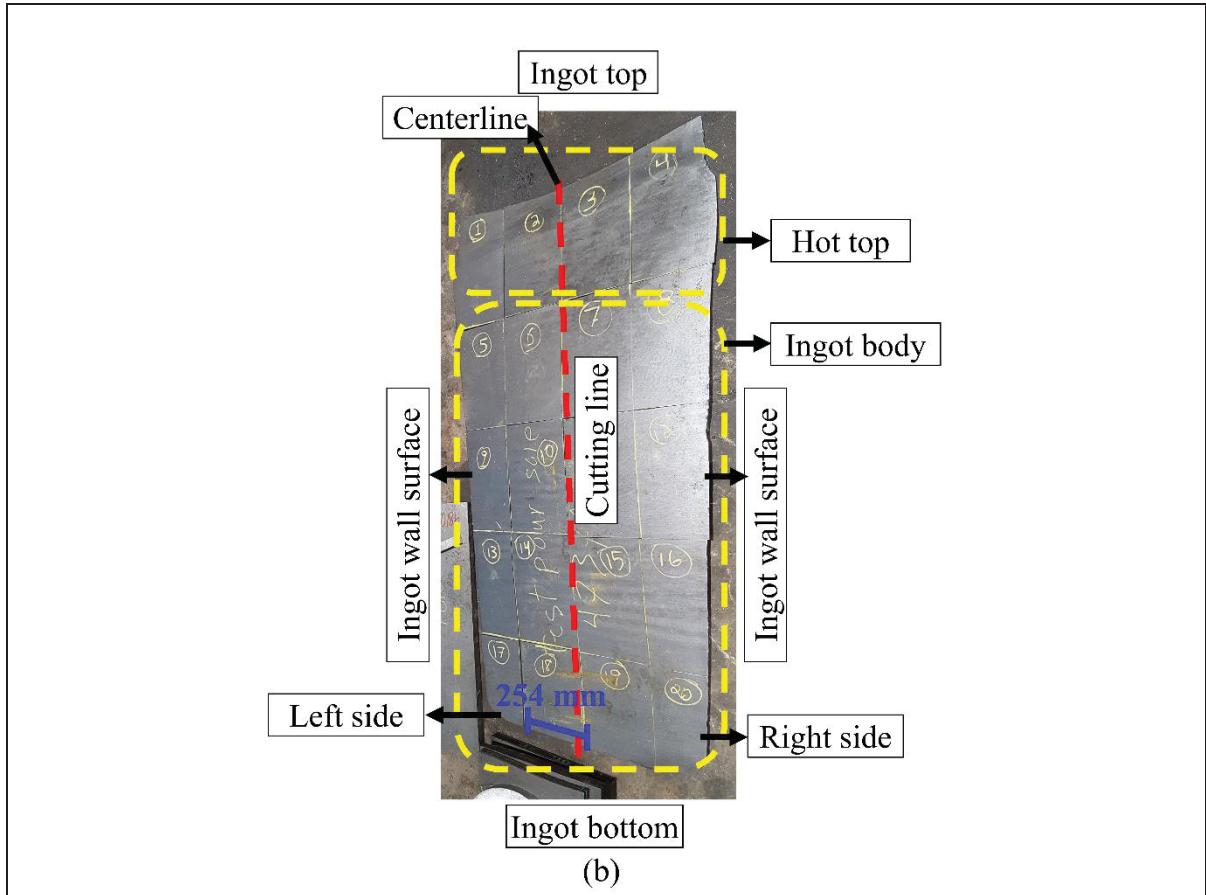


Figure 2.3 (b) Section longitudinale centrale d'une épaisseur de 25 mm

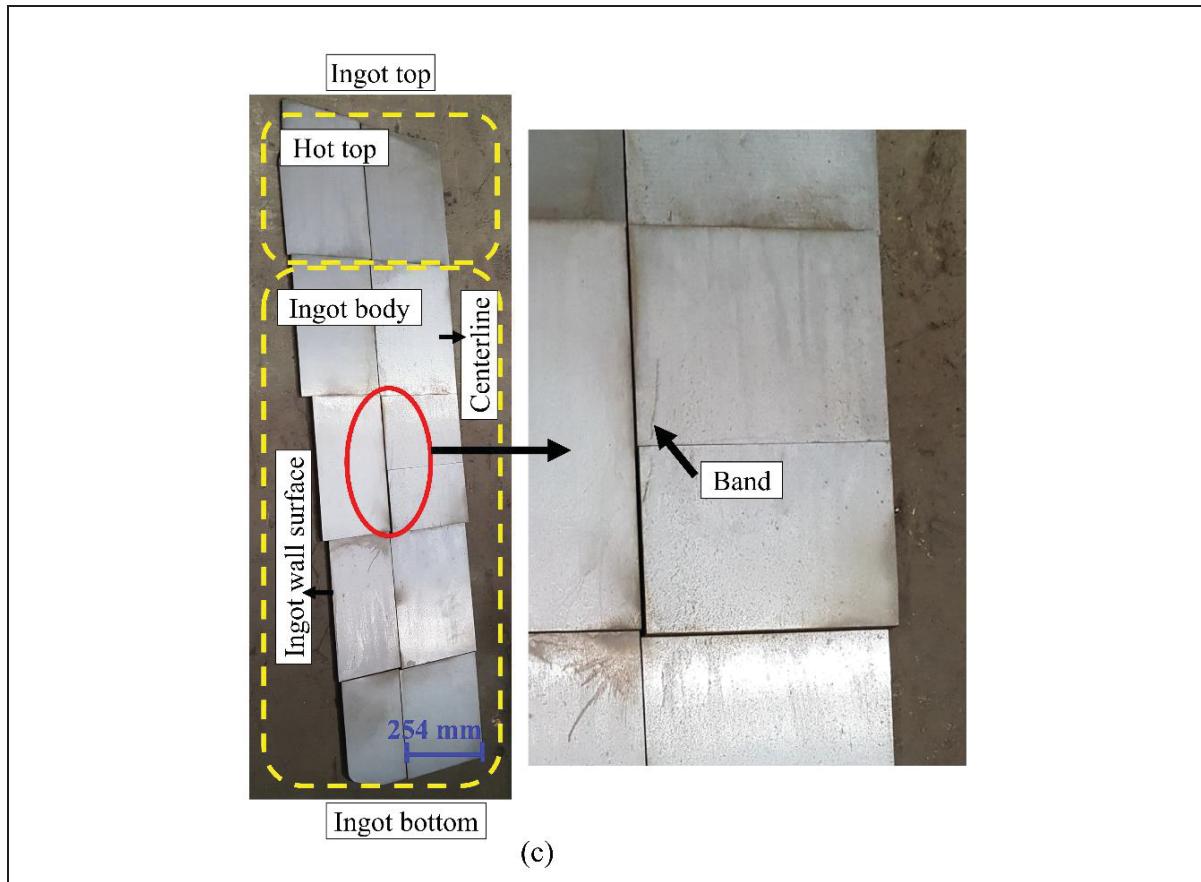


Figure 2.3 (c) La moitié gauche de la section longitudinale est divisée en 10 blocs utilisés pour la macrogravure. Une image agrandie met en évidence la bande de ségrégation sur la ligne médiane

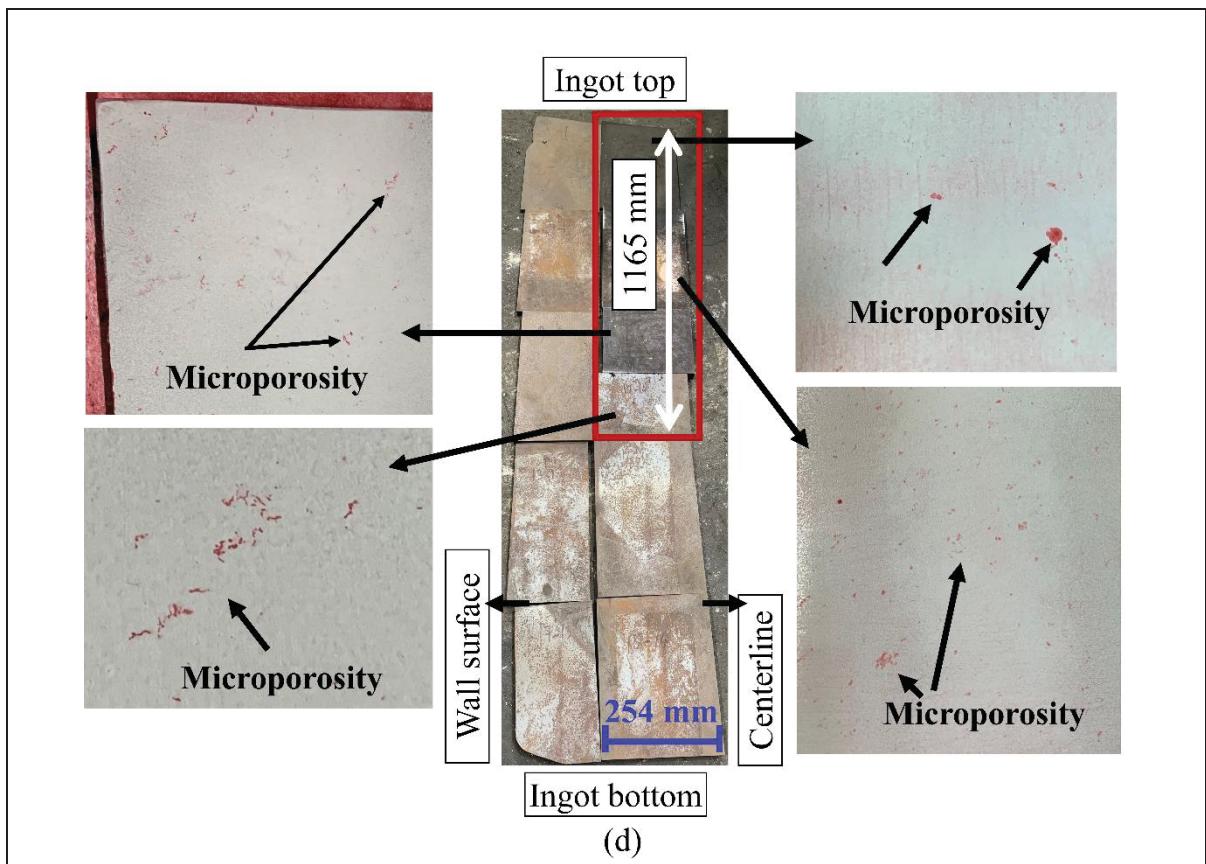


Figure 2.3 (d) La moitié gauche de la section longitudinale est divisée en 10 blocs utilisés pour l'inspection par ressusage. Une image agrandie illustre la microporosité dans les blocs indiqués

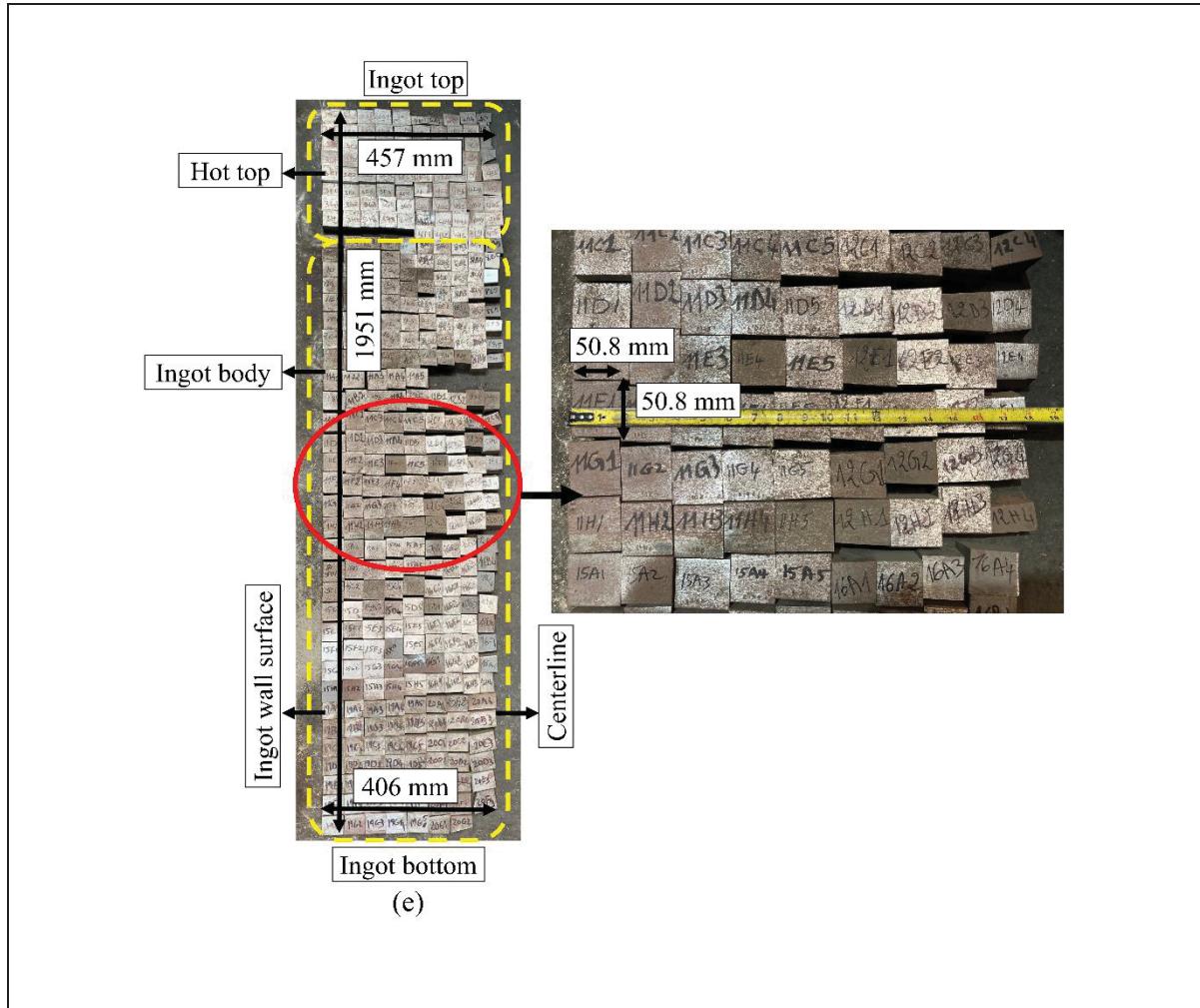


Figure 2.3 (e) La moitié droite de la section longitudinale est segmentée en 370 blocs pour la carte de macroségrégation. Une image agrandie affiche les échantillons de coupe de l'ingot pour la cartographie chimique

2.3 Établissement du modèle

Les simulations tridimensionnelles de remplissage de moule et de solidification ont été réalisées à l'aide du code à éléments finis THERCAST®, utilisant un modèle à deux phases solide-liquide moyennées en volume (TherCast2.1®, 2021). Le modèle de solidification impliquait la division du système de solidification en plusieurs domaines, tels que le moule, la masselotte ou lingot, chacun étant divisé en maillages d'éléments finis indépendants de forme tétraédrique. Une formulation Arbitraire Lagrangien-Eulerien (ALE) a été utilisée pour calculer la convection thermique dans le bain liquide et la zone pâteuse, ainsi que pour gérer

les changements de volume et de masse du métal dans le moule pendant la phase de remplissage. La déformation dans les régions solides a été déterminée à l'aide d'une méthode Lagrangienne. Le modèle de ségrégation comprend une partie macroscopique, qui intègre les équations de conservation de la quantité de mouvement, de la masse, de la chaleur et du soluté, ainsi qu'une partie microscopique décrivant le transport local du soluté. Dans THERCAST®, la modélisation de la solidification est facilitée par des modèles purement thermiques, thermohydrauliques (TH) et thermomécaniques (TM), en supposant que les moules restent non déformables. Dans le modèle thermohydraulique, le transport de chaleur et de soluté est couplé avec l'écoulement, entraîné par la convection thermosolutale, qui est un écoulement induit par la poussée d'Archimète. Le modèle thermomécanique intègre le transport thermosolutal induit par les effets combinés de l'écoulement induit par la poussée d'Archimète et de la contraction. Notamment, la modélisation n'a pas pris en compte la sédimentation des grains équiaxes ou la déformation du moule. Pour optimiser les modèles numériques et réduire les coûts de calcul tout en maintenant la précision des résultats, plusieurs hypothèses ont été faites (Transvalor, 2017; Chunping Zhang, 2020).

1. Le liquide est représenté par un modèle newtonien, tandis que la zone pâteuse présente un comportement viscoplastique. En revanche, la zone solide est simulée à l'aide d'un modèle élasto-viscoplastique.
2. La phase liquide a été considérée comme incompressible et présentant un comportement newtonien. De plus, l'écoulement du fluide a été supposé laminaire en raison du taux de remplissage progressif caractéristique de la méthode de coulée par le bas. Des boucles de convection naturelle induites par la gravité ont résulté des fluctuations locales de densité, englobant à la fois les écoulements de convection thermique résultant de l'expansion thermique et des gradients de température, ainsi que les écoulements de convection solutale induits par l'expansion solutale et les gradients de concentration (Lesoult, 2005; Ludwig, Wu, & Kharicha, 2015; Transvalor, 2017; Chunping Zhang, 2020). Dans l'équation de la quantité de mouvement, la masse volumétrique du liquide est exprimée par l'équation:

$$\rho_l = \rho_0 \left(1 - \beta_T (T - T_{ref}) - \sum_{i=1}^n \beta_i (\omega_l^i - \omega_0^i) \right) \quad (2.1)$$

Ici, ρ_l représente la densité du liquide, ρ_0 désigne la densité prise à la température de référence T_{ref} (la température du liquide), β_T et β_i sont respectivement les coefficients de dilatation thermique et solutale. T représente la température, ω_l^i représente la concentration en soluté dans le liquide, et ω_0^i est la concentration en soluté initiale pour l'élément soluté i .

3. La région pâteuse a été conceptualisée comme un milieu solide poreux isotrope saturé de liquide. On suppose que le milieu est saturé, $f_l + f_s = 1$, with f_l représentant la fraction volumique du liquide et f_s représentant la fraction volumique du solide. Ceci est sous l'équation suivante:

$$(X) = X_l f_l + X_s f_s \quad (2.2)$$

La relation de Carman-Kozeny fournit la perméabilité isotrope de la zone pâteuse.

$$K_{perm} = \frac{d_2^2 f_l^3}{180(1 - f_l)^2} \quad (2.3)$$

La perméabilité isotrope (K_{perm}) est déterminée par l'espacement secondaire des bras de dendrite (SDAS) (d_2) et la fraction volumique locale de liquide (f_l). Il est important de noter que l'équation de Carman-Kozeny suppose la présence d'une fraction de liquide, ce qui donne une valeur numérique réelle pour K_{perm} . À mesure que la fraction de liquide approche zéro pendant la solidification complète, la perméabilité devient négligeable ou nulle, indiquant l'absence d'écoulement de fluide à travers le matériau solide. Pendant la solidification, l'épaisseur de la zone pâteuse subit des changements dynamiques, influencés par des facteurs tels que les conditions thermiques et la cinétique de solidification. Le calcul de l'épaisseur de la zone pâteuse à chaque pas de temps tient compte de variables telles que la fraction volumique de liquides et de solides, la température, la composition en solutés et le temps de solidification local. Initialement, la zone pâteuse est plus mince en raison de taux de refroidissement plus

élevés et d'une solidification plus rapide. Cependant, à mesure que la solidification progresse et que le taux ralentit, la zone pâteuse s'épaissit. Vers les derniers stades de la solidification, à mesure que plus de matériau se solidifie et que la chaleur continue à être extraite du métal en fusion, l'épaisseur de la zone pâteuse diminue à mesure qu'elle se contracte.

4. La température locale a été prise en compte en fonction à la fois de la composition de la concentration liquide (ω_l^i) et de la pente du liquidus (m_l^i).

$$T = T_m + \sum_{i=1}^N m_l^i \omega_l^i \quad (2.4)$$

Ici, T_m représente la température de fusion du fer pur, N désigne le nombre d'éléments solutés présents dans l'acier, et m_l^i est la pente du liquidus. Cela permet la représentation des forces de flottabilité globales (incluant à la fois les forces thermiques et solutales) comme $B \propto \sum_i (m_l^i \beta_T + \beta_w^i) \Delta w_l^i$. Les pentes du solidus et du liquidus sont liées par le coefficient de partition, défini comme:

$$k^i = \frac{m_s^i}{m_l^i} \quad (2.5)$$

Ici, m_s^i représente la pente du solidus (dérivée d'un diagramme de phase binaire linéarisé par rapport au fer), et k^i représente le coefficient de partition pour traduire la répartition non homogène de l'élément chimique i entre le solide et le liquide.

5. Le flux de soluté est déterminé en suivant la loi de Fick :

$$j = -D_l^i \nabla \omega_l^i \quad (2.6)$$

D_l^i représente le coefficient de diffusion de l'élément chimique i dans le liquide.

6. Le flux de chaleur a été déterminé selon la loi de Fourier, qui tient compte de la somme des contributions à la convection naturelle et au rayonnement.

$$q = -\lambda \nabla T \cdot n = h(T - T_{ext}) \quad (2.7)$$

$$h = h_{cv} + \varepsilon_r \sigma_r (T + T_{ext}) (T^2 + T_{ext}^2) \quad (2.8)$$

Dans l'équation, n représente le vecteur unitaire normal vers l'extérieur, h est le coefficient de transfert de chaleur, et T_{ext} désigne la température externe. De plus, ε_r représente l'émissivité de l'acier (égale à 0,8), tandis que σ_r est la constante de Stefan-Boltzmann ($\sigma_r=5.776\times10^{-8}$ Wm⁻²K⁻⁴). Le coefficient de transfert de chaleur h change avec le temps ou avec les variations de la température à l'interface entre le métal et le moule, permettant la simulation du contact ou du détachement (formation d'un espace d'air) entre la pièce et le moule pendant le refroidissement du métal. Le transfert de chaleur aux interfaces est considéré à l'aide de l'équation de type Fourier.

$$-\lambda \Delta T n = \frac{1}{R_{eq}} (T - T_{mold}) \quad (2.9)$$

Ici, T_{mold} représente la température à l'interface du moule, tandis que R_{eq} désigne la résistance au transfert de chaleur, qui peut varier en fonction de facteurs tels que l'espace d'air et/ou la contrainte normale locale, comme expliqué ci-dessous.

$$R_{eq} = \frac{1}{\min(\frac{1}{R_0}, \frac{1}{R_{air}}, \frac{1}{R_{rad}})} + R_s \text{ if } e_{air} > 0 \quad (2.10)$$

$$R_{eq} = \frac{1}{\frac{1}{R_\sigma} + \frac{1}{R_0}} + R_s \text{ if } e_{air} = 0 \quad (2.11)$$

Ici, $R_{air} = \frac{e_{air}}{\lambda_{air}}$, où e_{air} représente l'épaisseur de l'espace d'air et λ_{air} représente la conductivité thermique de l'air. De même, $R_s = \frac{e_s}{\lambda_s}$, où e_s représente l'épaisseur du laitier et λ_s représente

la conductivité thermique du laitier. De plus, R_0 désigne une résistance thermique nominale, qui varie en fonction de la rugosité de surface.

$$R_{rad} = \frac{\frac{1}{\varepsilon} + \frac{1}{\varepsilon_{mold}} - 1}{\sigma_{stef}(T^2 + T_{mold}^2)(T + T_{mold})} \quad (2.12)$$

Où, ε_{mold} est l'émissivité du moule.

La résistance thermique, prenant en compte la contrainte normale σ_n est donnée par la relation suivante, où A et m sont des paramètres de la loi:

$$R_\sigma = 1 / A\sigma_n^m \quad (2.13)$$

7. À l'échelle macroscopique, la diffusion est négligeable dans la phase solide.

8. À l'échelle microscopique, les hypothèses suivantes ont été faites: i) L'équilibre thermomécanique est maintenu à l'interface entre le liquide et le solide; ii) Une diffusion parfaite se produit dans la phase liquide; et iii) le modèle de Brody-Flemings est utilisé pour décrire le processus de diffusion dans la phase solide. Ce modèle intègre un schéma de redistribution des solutés unidimensionnel qui suit une tendance parabolique décroissante. Le transfert transitoire des solutés dans le solide est régi par la diffusion et est influencé par le nombre de Fourier sans diffusion en retour α .

$$\omega_s = k\omega_0 \{1 - (1 - 2\alpha k)f_s\}^{(k-1)/(1-2\alpha k)} \quad (2.14)$$

$$f_s = \left[\frac{1}{(1 - 2\alpha k)} \right] \left\{ 1 - \left[(T_f - T) / (T_f - T_l) \right]^{(1-2\alpha k)/(k-1)} \right\} \quad (2.15)$$

Ici, ω_s représente la concentration en soluté à l'interface solide/liquide en avancement, f_s est la fraction solide, k est le coefficient de partition, et α est le nombre de Fourier.

9. La contraction de solidification est automatiquement calculée à l'aide de l'équation:

$$\Delta\varepsilon_{tr} = \frac{(\rho_l - \rho_s)}{\rho_l} \quad (2.16)$$

Où ρ_s et ρ_l représentent les densités aux températures du solidus et du liquidus, respectivement.

Les calculs thermiques purs et couplés thermomécaniques sont effectués dans la simulation en résolvant diverses équations gouvernantes avec un pas de temps prescrit. Ces calculs sont effectués sur la base des hypothèses susmentionnées pour analyser l'écoulement de fluide, la température et la distribution de soluté pendant la solidification du matériau. Les équations gouvernantes utilisées dans le modèle sont détaillées ci-dessous.

Le calcul thermique est réalisé en résolvant l'équation générale de conservation de l'énergie en transfert de chaleur.

$$\rho \frac{\partial H}{\partial T} \frac{dT}{dt} - \nabla \cdot (\lambda(T) \nabla T) = 0 \quad (2.17)$$

Ici, ρ (kg/m³) désigne la densité, T (°C) représente la température, λ représente la conductivité thermique, et H représente l'enthalpie spécifique, qui est définie comme suit:

$$\frac{\partial H}{\partial T} = C_p(T) + L_f \frac{\partial f_l(T)}{\partial T} \quad (2.18)$$

Où C_p (J/kg/K) représente la chaleur spécifique, f_l désigne la fraction volumique de liquide, et L_f (J/kg) représente la chaleur latente de fusion spécifique. En fonction de l'hypothèse, la chaleur latente reste constante.

La redistribution de chaque soluté i était contrôlée par l'équation de conservation du soluté.

$$\frac{\partial \omega^i}{\partial t} + v \cdot \nabla \omega_l^i - \nabla \cdot (f_l D_l^i \nabla \omega_l^i) = 0 \quad (2.19)$$

L'état d'équilibre mécanique est déterminé par l'équation de conservation de la quantité de mouvement, qui est fondamentale en dynamique et signifie la conservation de la quantité de mouvement.

$$\nabla \cdot s - \nabla p + \rho g = \rho \frac{dv}{dt} \quad (2.20)$$

Où s représente le tenseur des contraintes de Cauchy, p représente la pression, g représente l'accélération gravitationnelle, et v désigne la vitesse moyenne.

Pour reproduire la progression du refroidissement du matériau lorsqu'il passe de l'état liquide à l'état pâteux, puis à l'état solide, un modèle constitutif hybride est utilisé. Le bilan de masse moyen varie en fonction de l'état du métal.

À l'état liquide, le métal présente un comportement newtonien et suit l'équation de Navier-Stokes, incorporant des termes qui varient avec la température.

$$\bar{\sigma} = \eta_l(T) \sqrt{3}^2 \dot{\varepsilon} \quad (2.21)$$

Ici, $\bar{\sigma}$ représente la contrainte d'écoulement équivalente de Von Mises, η_l désigne la viscosité dynamique du liquide, T représente la température, et $\dot{\varepsilon}$ représente le taux de déformation plastique équivalent.

Dans un traitement thermo-élasto-viscoplastique des métaux en dessous de la température de solidus (T_s), une formulation lagrangienne est souvent utilisée. La loi II de Kozlowski et al. peut être reformulée dans ce cadre pour correspondre aux conditions spécifiques de l'état solide.

$$\bar{\sigma} = K_s(T) \bar{\varepsilon}^{n(T)} \dot{\bar{\varepsilon}}^{m(T)} \quad (2.22)$$

Dans ce contexte, K_s représente la cohérence viscoplastique dans le matériau solide, tandis que $\bar{\varepsilon}$ désigne la déformation plastique équivalente. Les variables n et m correspondent respectivement au coefficient de durcissement par déformation et au coefficient de sensibilité, qui caractérisent la relation entre la contrainte d'écoulement et le taux de déformation.

On distingue deux comportements distincts du métal à l'état pâteux, basés sur une température critique appelée température de cohérence T_{cohe} , qui correspond à une fraction volumique de liquide $f_l = 0.3$.

À l'état pâteux, le métal semi-liquide est traité comme un fluide non newtonien suivant la loi thermo-viscoplastique de Norton-Hoff au-dessus de la température T_{cohe} .

$$\bar{\sigma} = K^{vp}(T) \sqrt{3}^{m(T)+1} \dot{\bar{\varepsilon}}^{m(T)} \quad (2.23)$$

Où K^{vp} représente la cohérence viscoplastique du matériau. Le tenseur du taux de déformation $\dot{\varepsilon}$ est divisé en une composante viscoplastique (non réversible) et une composante thermique.

L'équation de continuité (équation de conservation de la masse) est la suivante :

$$\nabla \cdot v = 3\alpha(T)\dot{T} + \dot{f}_s(T)\Delta\varepsilon_{tr} \quad (2.24)$$

Ici, α représente le coefficient de dilatation thermique linéaire.

Sous la température T_{cohe} , le métal semi-solide avec une faible fraction liquide est supposé suivre un comportement constitutif thermo-élasto-viscoplastique (EVP). Ce comportement est modélisé selon la loi de Perzyna, qui intègre un type de seuil.

$$\bar{\sigma} = \sigma_s + K^{evp}(T) \sqrt{3}^{m+1} \dot{\varepsilon}^n \dot{\varepsilon}^m \quad (2.25)$$

Le tenseur du taux de déformation $\dot{\varepsilon}$ est décomposé en une composante élastique, une composante visco-plastique et une composante thermique. L'équation de continuité (équation de conservation de la masse) est la suivante:

$$\nabla \cdot v = -\left(\frac{\dot{p}}{x} - \frac{\dot{x}}{x^2} p\right) + 3\alpha(T)\dot{T} + \dot{f}_s(T)\Delta\varepsilon_{tr} \quad (2.26)$$

Où, $x = \frac{E}{3(1-2\nu)}$, E est le module de Young (MPa), ν est le coefficient de Poisson.

L'équilibre thermodynamique est présumé à l'interface solide-liquide. Cela nécessite de maintenir la continuité de la contrainte d'écoulement à la température de cohérence (T_{cohe}), assurant ainsi la cohérence du comportement du matériau dans des conditions à la fois viscoplastiques et thermo-élastoviscoplastiques.

$$\begin{aligned} K^{evp}(T_{cohe}) &= K^{vp}(T_{cohe}) \\ m^{evp}(T_{cohe}) &= m^{vp}(T_{cohe}) \\ \sigma_s(T_{cohe}) &= 0 \end{aligned} \quad (2.27)$$

2.3.1 Critères de formation de la microporosité

La possible formation de porosités centrales dans le modèle de solidification est basée sur les critères de Niyama (Ge et al., 2017; Transvalor, 2017; J. Wang et al., 2012). Il est important de noter que les critères de Niyama ne considèrent pas la taille et la forme précises des porosités, mais permettent de prédire le risque, la possibilité et les zones de formation de porosités lorsque la valeur dépasse l'unité (Ghodrati, Loucif, Morin, & Jahazi, 2022a; Prafull Patil et al., 2017). Le critère de Niyama est mathématiquement exprimé comme suit (Ghodrati, Loucif, et al., 2022a; Prafull Patil et al., 2017; Transvalor, 2017):

$$Niyama = \frac{\sqrt{\|\dot{T}\|}}{\|\Delta T\|} \quad \text{for } f_l = f_{lNi} \quad (2.28)$$

Le symbole \dot{T} représente le taux de refroidissement et ΔT désigne le gradient de température. De plus, f_l représente la fraction liquide et f_{lNi} est la fraction liquide seuil fixée à $f_{lNi} = 0.3$. Il convient de noter que l'équation de Niyama présentée est l'inverse de l'expression du critère de Niyama trouvée dans certaines publications (Abootorabi, Korojy, & Jabbareh, 2019; N. Liu et al., 2022; Y. Zhang, Xu, Liu, Zhang, & Xue, 2021); par conséquent, dans ce travail, des valeurs de critère élevées indiquent une forte probabilité de formation de micropores.

2.3.2 Critères de formation de macroporosité

Le retrait primaire (retrait en tuyau) ou le retrait secondaire (macroporosité) a été estimé en calculant la perte de volume encourue dans la pièce à chaque étape. Cette perte volumétrique est attribuée à la contraction thermique et à la transition des phases liquide à solide. La distribution de cette perte de volume est déterminée en fonction de la progression du front de solidification. Une fraction solide seuil de 60%, $f_{s0} = 0.6$, représentant la limite supérieure au-delà de laquelle la perte de volume est considérée comme négligeable pour le processus de retrait, a été utilisée, en accord avec la littérature (P. Patil, Nalawade, Balachandran, & Balasubramanian, 2015; Prafull Patil et al., 2017). Par conséquent, la perte de volume dans les zones liquides et pâteuses, où la fraction solide est inférieure à ce seuil, est incluse dans le calcul du retrait. Le calcul de la variation de volume attribuable au retrait suit les équations suivantes (Ghodrati, Loucif, et al., 2022a; Transvalor, 2017):

$$\Delta V = \int_{t_1}^{t_2} (\Delta \varepsilon_{tr} \dot{f}_s dt + 3\alpha(T(t)) \dot{T}) dt \quad (2.29)$$

$$\Delta \varepsilon_{tr} = - \frac{(\rho_{liquidus} - \rho_{solidus})}{\rho_{liquidus}} \quad (2.30)$$

Dans l'expression ci-dessus, $[t_1, t_2]$ représente l'intervalle de temps actuel, et $\Delta\varepsilon_{tr}$ signifie la variation relative de volume résultant de la transition de phase complète entre la température liquidus et solidus. Ici, $\rho_{liquidus}$ et $\rho_{solidus}$ représentent respectivement les densités aux températures liquidus et solidus. De plus, \dot{f}_s représente le taux de changement de la fraction solide, $\alpha(T(t))$ est le coefficient de dilatation linéaire dépendant de la température, et \dot{T} représente le taux de changement de la température. La diminution de hauteur pour chaque incrément dans le niveau de retrait est déduite de ΔV de la manière suivante (Transvalor, 2017):

$$\Delta h = \frac{\Delta V}{S} \quad (2.31)$$

Dans ce contexte, S représente la surface définie par la fraction solide f_{s0} .

2.3.3 Détermination de la géométrie du modèle

Initialement, chaque élément composant la configuration de coulée de lingot de 12 MT a fait l'objet d'une construction méticuleuse dans ANSYS WORKBENCH®. Une attention particulière a été portée à l'alignement des géométries et des dimensions de chaque composant avec ceux du système de coulée réel, comme illustré dans la Figure 2.1(a, c-d). Une fois la construction de tous les composants terminés, ils ont été transférés de manière transparente et assemblés au sein de la plateforme logicielle THERCAST® pour le processus de modélisation. Le modèle 360° résultant a intégré de manière exhaustive tous les aspects géométriques et structurels, englobant des éléments tels que le moule (mold), les pattes (lugs) positionnées sur la surface extérieure du moule, l'anneau (ring) situé sous le moule, le riser isolant positionné au bas du moule, les panneaux latéraux (sideboard) réfractaires logés à l'intérieur de la masselotte, le lingot en acier de forme polygonale comportant 16 nervures sur sa surface extérieure, et 16 ondulations sur la surface intérieure du moule à cône progressif avec le moule à cône progressif à grande extrémité en haut, ainsi que les chapeaux exothermiques. Pour rationaliser les simulations par la méthode des éléments finis et réduire les temps de calcul, un

modèle de 90° (représentant un quart de la structure complète) a été utilisé, en tirant parti de la symétrie de rotation des 16 nervures (Figure 2.4b).

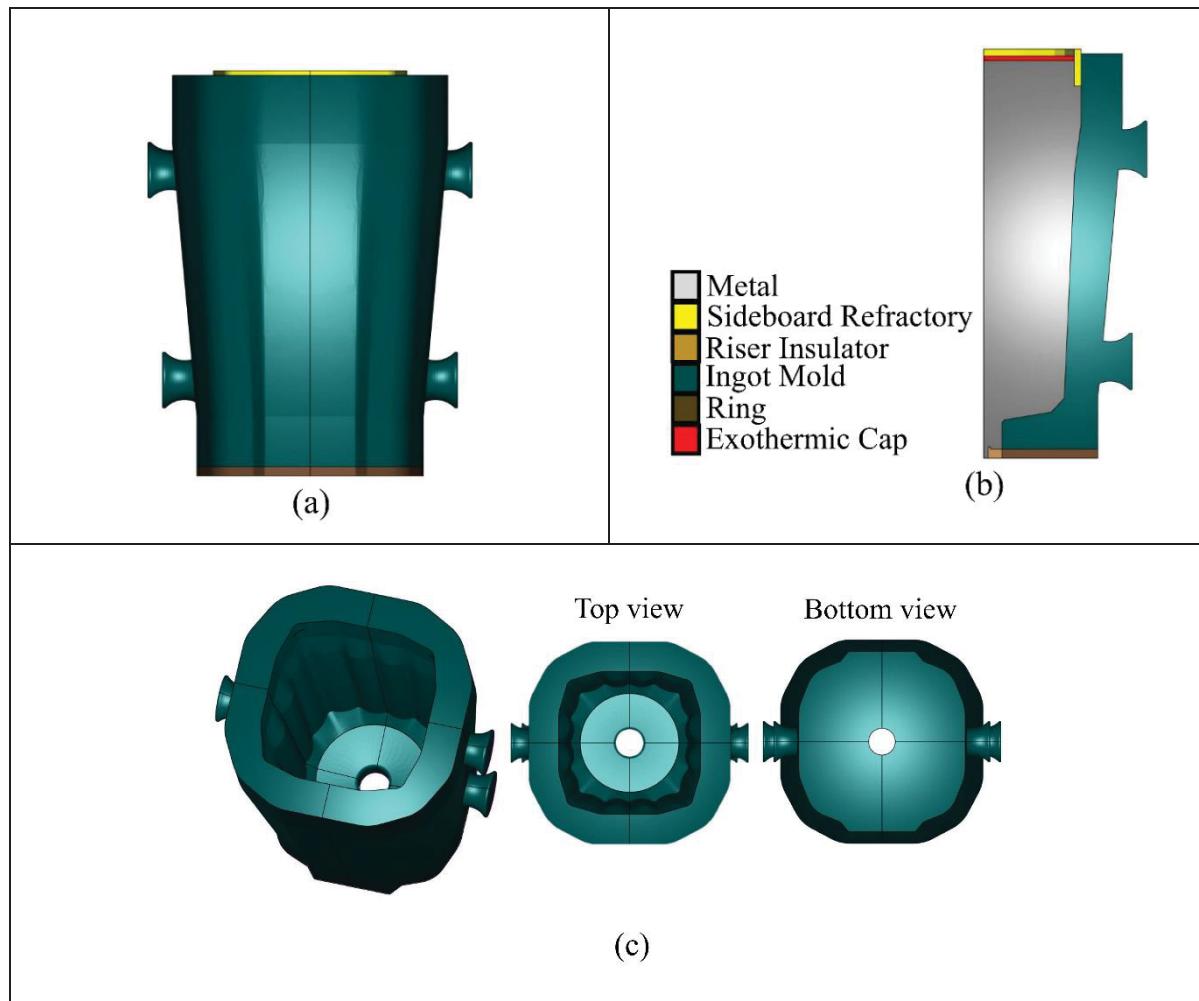


Figure 2.4. (a) Modèle 3D complet à 360° créé pour reproduire le système de coulée réel (Vue de face de l'ensemble du système), (b) Composants individuels du système présentant le modèle à 90°, (c) Moule en fonte avec grande extrémité vers le haut comportant 16 ondulations (ou nervures) sur ses surfaces intérieures

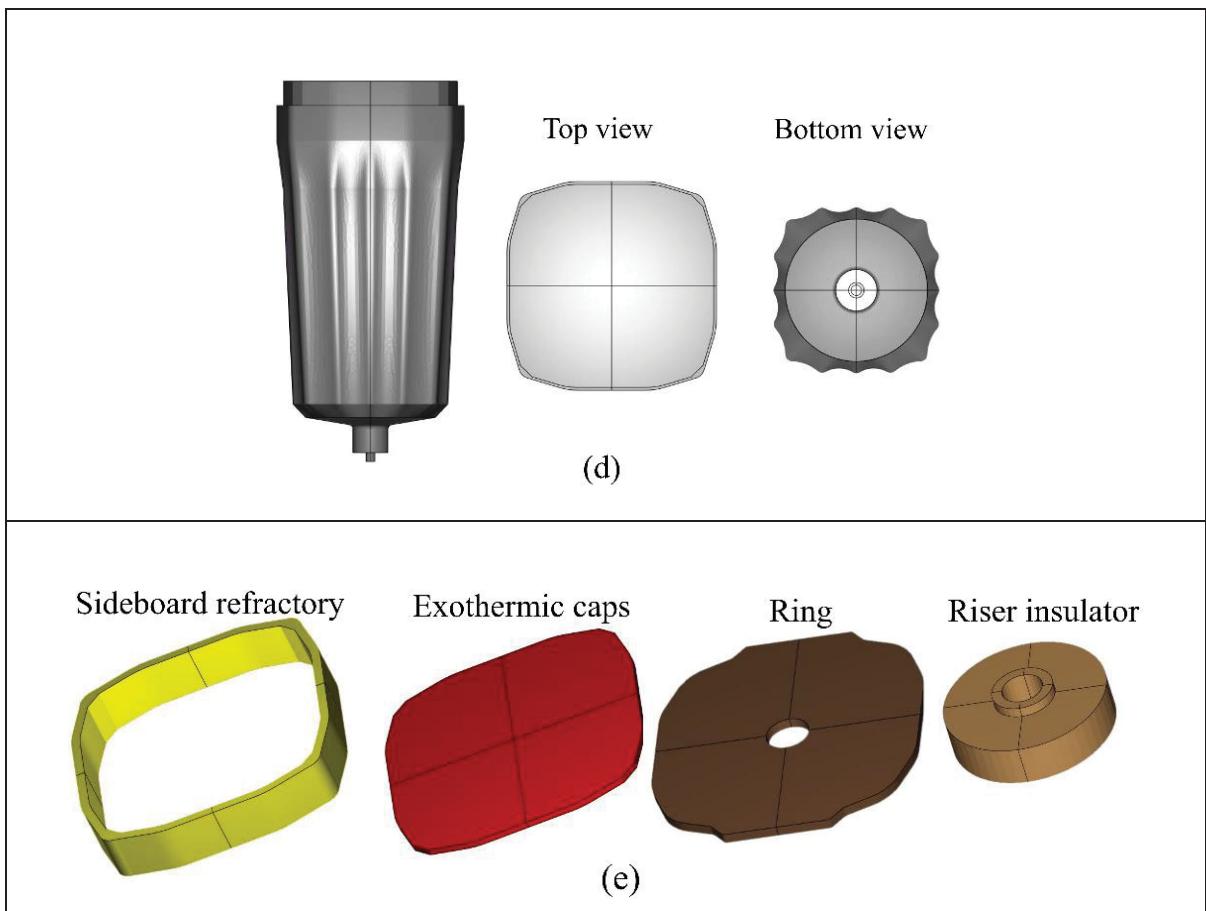


Figure 2.4 (d) Lingot polygonal présentant 16 nervures sur sa surface extérieure, avec vues de dessus et de dessous, (e) Composants variés constituant la configuration de coulée

2.3.4 Conditions aux limites (boundary conditions)

Les équations de transfert de chaleur sont résolues individuellement pour chaque sous-domaine, en tenant compte de conditions aux limites spécifiques. Les conditions aux limites applicables à l'ensemble de la lingotière sont les suivantes: (i) isolation à la surface libre de la couverture exothermique, (ii) isolation au niveau de la masselotte et du plongeur, (iii) convection et rayonnement au niveau de la paroi externe du moule, (iv) convection initiale et rayonnement après la formation du jeu d'air, suivi de la résistance de contact entre le métal solide et la paroi du moule, et (v) résistance de contact entre les différents composants du moule. Un aperçu détaillé des conditions aux limites thermiques est fourni dans le Tableau 2.2.

Tableau 2.2 Conditions limites thermiques du modèle

Propriété	Unité	valeur	Référence
Coefficient de transfert de chaleur entre le métal/le moule	W/m ² ·K	5×10^3	(TherCast2.1®, 2021)
Coefficient de transfert de chaleur entre le moule en fonte/l'extérieur	W/m ² ·K	12	(TherCast2.1®, 2021)
Coefficient de transfert de chaleur entre le métal/le réfractaire et entre le métal/riser	W/m ² ·K	1×10^2	(TherCast2.1®, 2021)
Résistance thermique à l'interface entre le métal/la couverture exothermique	m ² ·K/W	1×10^{-5}	(TherCast2.1®, 2021)
Résistance thermique entre les composants du moule	m ² ·K/W	1×10^{-6}	(TherCast2.1®, 2021)
Résistance thermique entre le moule/le matériau réfractaire et entre le moule/le matériau du riser.	m ² ·K/W	1×10^{-2}	(TherCast2.1®, 2021)

2.3.5 Optimisation de la taille du maillage

Un maillage bien construit est essentiel pour des simulations précises. Une mauvaise qualité de maillage peut entraîner des résultats inexacts et des erreurs du solveur, tandis que des maillages de haute qualité entraînent des coûts computationnels plus élevés. De plus, des tailles de maillage inadéquates peuvent ne pas parvenir à résoudre des caractéristiques telles que les ségrégations A, ce qui affecte les modèles de ségrégation calculés. Pour aborder la ségrégation par canaux, les tailles de maillage doivent être plus petites que les largeurs de canaux, en particulier pour obtenir des résultats indépendants du maillage (Edward John Pickering, 2013; Chunping Zhang, 2020). Par conséquent, une enquête a été menée pour trouver un équilibre entre le raffinement du maillage et les coûts computationnels, dans le but d'optimiser les deux aspects.

Pour la discréétisation spatiale des composants du lingot et du moule, des éléments tétraédriques linéaires ont été utilisés. La taille du maillage choisie était de 40 mm pour le moule, de 10 mm pour la bague et les panneaux latéraux réfractaires, et de 8 mm pour le montant et les chapeaux

exothermiques. Des modèles thermiques, thermohydrauliques et thermomécaniques ont été simulés pour le modèle à 90° (90°M) en utilisant différentes tailles de maillage dans le lingot pour l'acier 25CrMo4 (Tableau 2.3), qui a une composition chimique similaire à celle de l'acier étudié dans cette étude. L'acier a été choisi dans la base de données des matériaux de THERCAST® (TherCast2.1®, 2021). Le Tableau 2.4 affiche chaque modèle étudié aux côtés des tailles et nombres de maillage correspondants (modèles 90°M1 et 90°M5), offrant une vue d'ensemble plus complète des configurations de maillage utilisées. Par la suite, une analyse a été menée sur divers paramètres, y compris la durée de simulation, la période de solidification et la forme du front solide.

Tableau 2.3 Composition chimique de l'acier 25CrMo4 (wt.%)

C	Mn	P	S	Si	Cr	Mo	Fe
0.25	0.9	0.035	0.035	0.4	1.2	0.3	Équilibre

Tableau 2.4 Modèles étudiés et maillages

Description	Modèles à 90°				
	90°M1	90°M2	90°M3	90°M4	90°M5
Taille du maillage	40 mm	30 mm	(30-10) mm	(30-10) mm	20 mm
Nombre de nœuds dans la partie acier	14448	25707	42358	42358	91849
Nombre d'éléments dans la partie acier	69444	129943	215811	215811	491217
Nombre total de nœuds dans le système de coulée	104914	116173	132824	133482	200314
Nombre total d'éléments dans le système de coulée	498380	558879	644747	646529	1001715

Pour une simulation thermique (90°M1), une taille de grille moyenne de 40 mm a été choisie, guidée par des recherches antérieures sur des lingots de plus grande taille (40 MT) menées par nos collègues (Chunping Zhang, 2020) comme indiqué dans la Figure 2.5. Cette figure illustre l'image du maillage, la fraction liquide une heure après le coulage et le schéma de solidification totale. Des bruits et des fluctuations ont été observés dans le front solide selon le schéma de la

fraction liquide. La simulation thermique a duré 3 heures et 17 minutes, avec un temps de solidification total de 5 heures et 41 minutes.

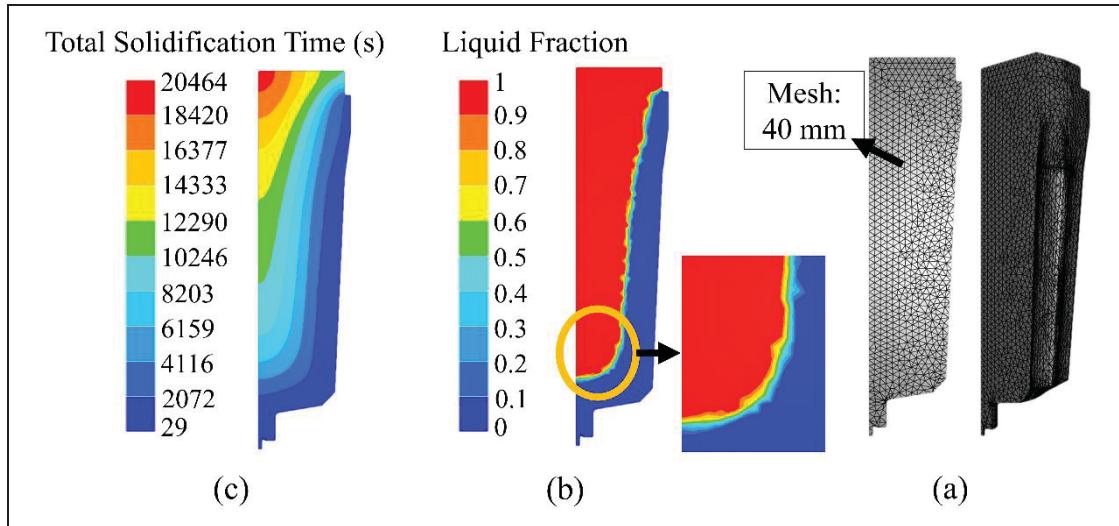


Figure 2.5 90° Modèle thermique (90°M1), (a) Image du maillage avec 69444 éléments (taille de grille de 40 mm), (b) Schéma de la fraction liquide environ 1 heure après l'étape de coulage, (c) Temps de solidification total prédict à partir du calcul thermique (5 h 41 min)

Des maillages de 30 mm ont également été utilisés dans un autre modèle thermique (90°M2) pour améliorer la précision des résultats. La Figure 2.6 illustre l'image du maillage, la fraction liquide une heure après le coulage, et le schéma de la solidification totale. Dans la Figure 2.6b, marquée en position circulaire, le bruit et les fluctuations à l'interface solide étaient réduits par rapport au maillage de 40 mm. L'interface solide apparaissait plus lisse avec un maillage de 30 mm comparé à un maillage de 40 mm. La simulation thermique a duré 4 heures et 37 minutes, avec un temps de solidification total de 5 heures et 32 minutes. Une répétabilité du temps de solidification total a été observée entre les maillages de 40 mm et 30 mm.

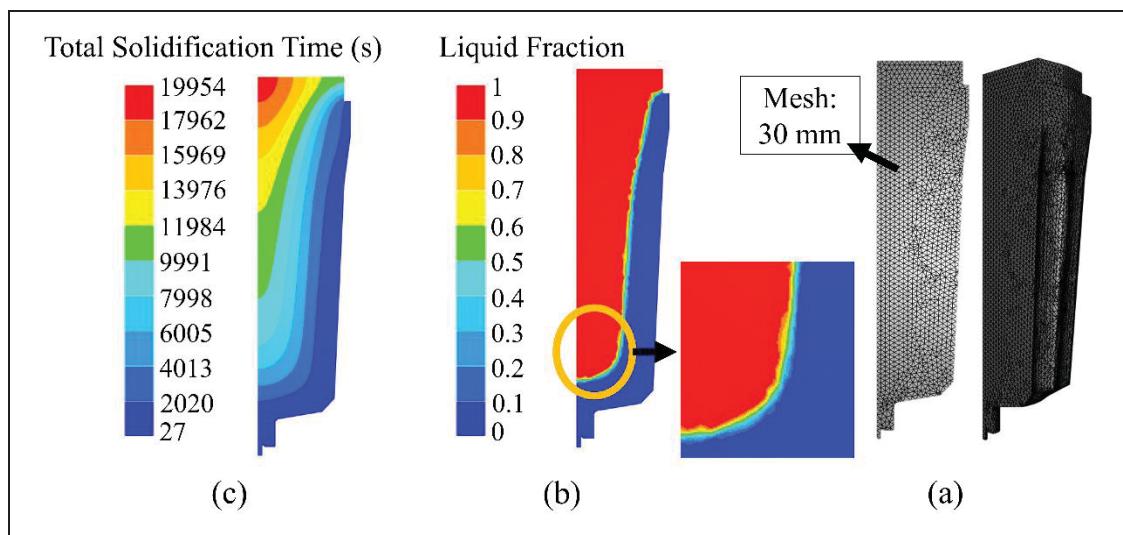


Figure 2.6 Modèle thermique à 90° (90°M2), (a) Image du maillage avec 129943 éléments (taille de la grille de 30 mm), (b) Schéma de la fraction liquide environ 1 heure après l'étape de coulage, (c) Temps de solidification total prédict par calcul thermique (5 h 32 min)

Dans un modèle thermique (90°M3), une taille de maillage de 30 mm a été utilisée, avec des affinements supplémentaires de 10 mm au bas du lingot dans la section de la masselotte pour aborder l'aspect critique du remplissage. Cette configuration de maillage est illustrée à la Figure 2.7. Le front de solidification a montré une plus grande régularité dans la partie inférieure du lingot avec un raffinement de maillage de 10 mm par rapport aux modèles précédents. La simulation thermique a duré 4 heures et 48 minutes, aboutissant à un temps total de solidification de 4 heures et 54 minutes.

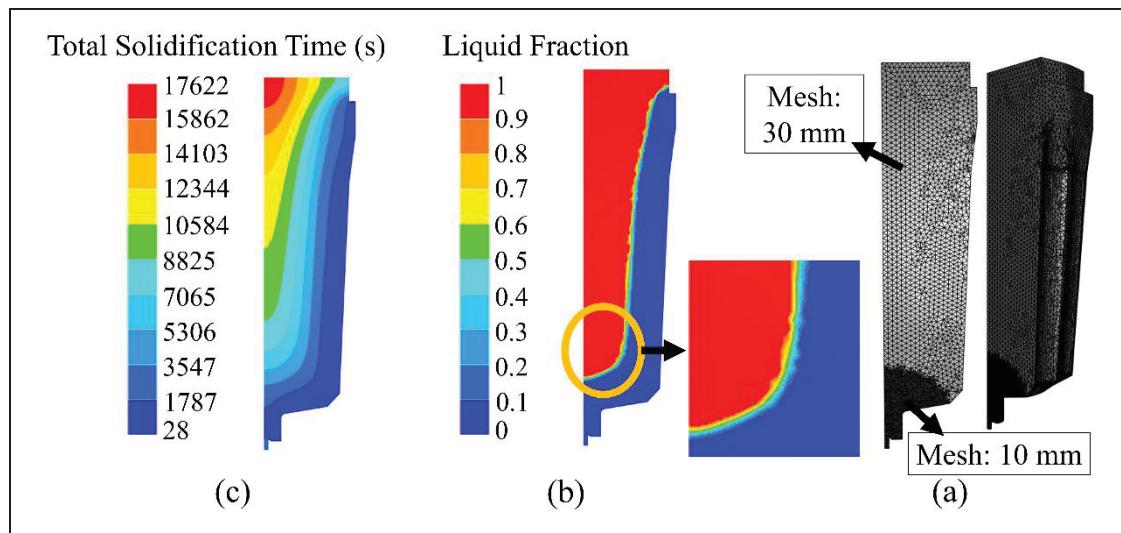


Figure 2.7 Modèle thermique à 90° (90°M3), (a) Image du maillage avec 215811 éléments (taille de maillage de 30 mm avec un affinement de 10 mm), (b) Modèle de fraction liquide environ 1 heure après le stade de coulage, (c) Temps total de solidification prédict par le calcul thermique (4 h 54 min)

Basé sur les résultats du modèle 90°M3, une diminution du bruit et des fluctuations a été observée, et le temps de solidification a montré une répétabilité et une raisonabilité comparées à d'autres modèles. En conséquence, un modèle thermomécanique (90°M4) a été réalisé, en utilisant une taille de maillage de 30 mm avec des affinements supplémentaires de 10 mm (Figure 2.8). Le front solide a montré une surface lisse, et la simulation thermomécanique a duré 2 jours, 21 heures et 19 minutes, résultant en un temps total de solidification de 6 heures et 2 minutes.

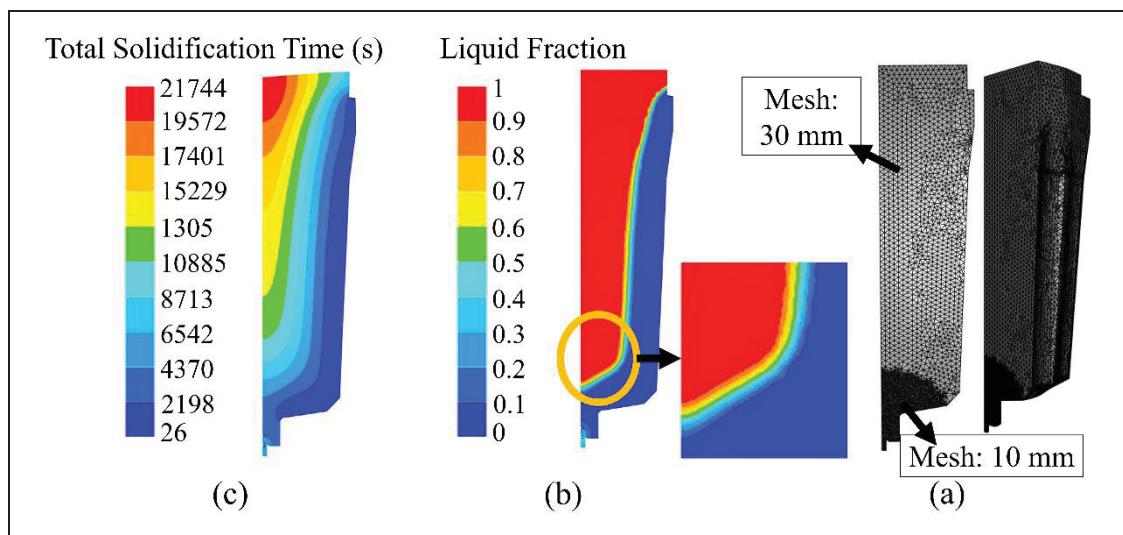


Figure 2.8 Modèle thermomécanique à 90° (90°M4), (a) Image de la maille avec 215 811 éléments (taille de maille de 30 mm avec un raffinement de maille de 10 mm), (b) Motif de fraction liquide environ 1 heure après l'étape de coulée, (c) Temps total de solidification prévu à partir du calcul thermomécanique (6 h 2 min)

Un modèle thermohydraulique (90°M5) a été réalisé avec une taille de grille de 20 mm pour évaluer l'impact d'une taille de maille plus petite sur la précision des données (Figure 2.9). Malgré l'obtention d'une frontière solide remarquablement lisse pendant la solidification, la durée de la simulation a été prolongée, durant 2 jours, 15 heures et 30 minutes, en raison de l'omission du calcul du retrait. Le temps total de solidification s'est élevé à 5 heures et 15 minutes.

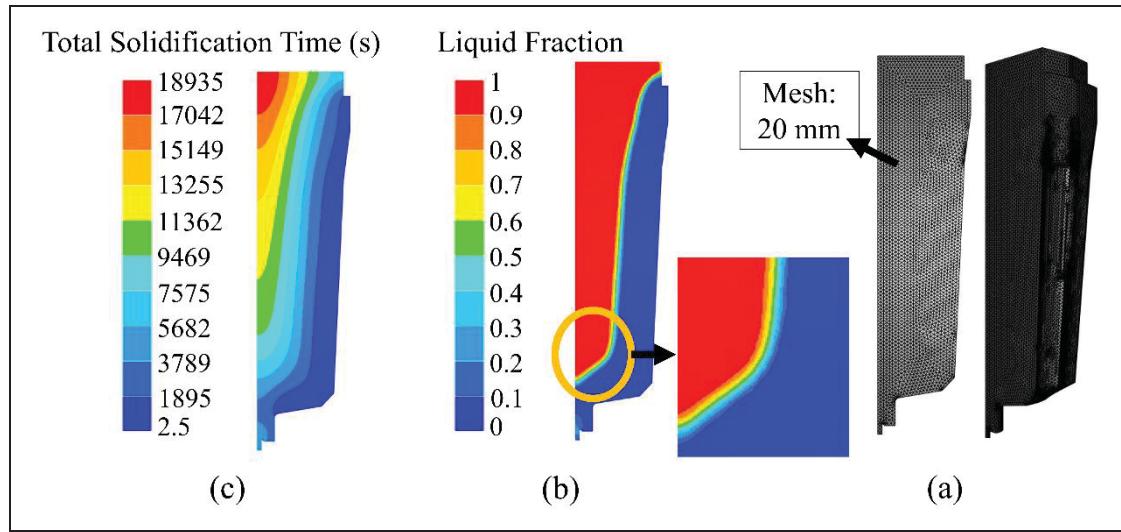


Figure 2.9 Modèle thermohydraulique à 90° (90°M5), (a) Image de maillage avec 4912171 éléments (taille de grille de 20 mm), (b) Motif de fraction liquide environ 1 heure après l'étape de coulée, (c) Temps total de solidification prévu à partir du calcul thermomécanique (5 h 15 min)

Il est important de reconnaître que l'augmentation du raffinement du maillage et la réduction de la taille du maillage entraînent une augmentation significative des coûts de calcul. Par conséquent, un compromis a été trouvé en adoptant une taille de maillage de 30 mm avec un raffinement moyen de 15 à 8 mm au bas de lingot et dans la section de montée afin de maintenir la précision pendant les opérations de remplissage.

De plus, des calculs de macroségrégation ont été effectués en mode thermomécanique, en tenant compte de la distribution des solutés, de la conduction thermique, de la convection naturelle et du retrait thermomécanique pour l'acier étudié. Les paramètres déterminés présentés dans les sections suivantes de ce chapitre ont été utilisés pour ces calculs. Ce modèle est appelé le Design Original (OD) et est représenté dans la Figure 2.10. Le système de coulée comprend un total de 746 196 éléments tétraédriques linéaires tridimensionnels et 154 907 nœuds. Le temps total de solidification prévu après la simulation du lingot de 12 MT était de 5 heures et 11 minutes, tandis que la simulation elle-même a duré 5 jours, 8 heures et 28 minutes.

Contrôler le temps de calcul pour la macroségrégation dans les 5 jours garantit la précision des résultats, tandis que l'utilisation de tailles de maille plus petites peut prolonger le temps de calcul à quelques semaines.

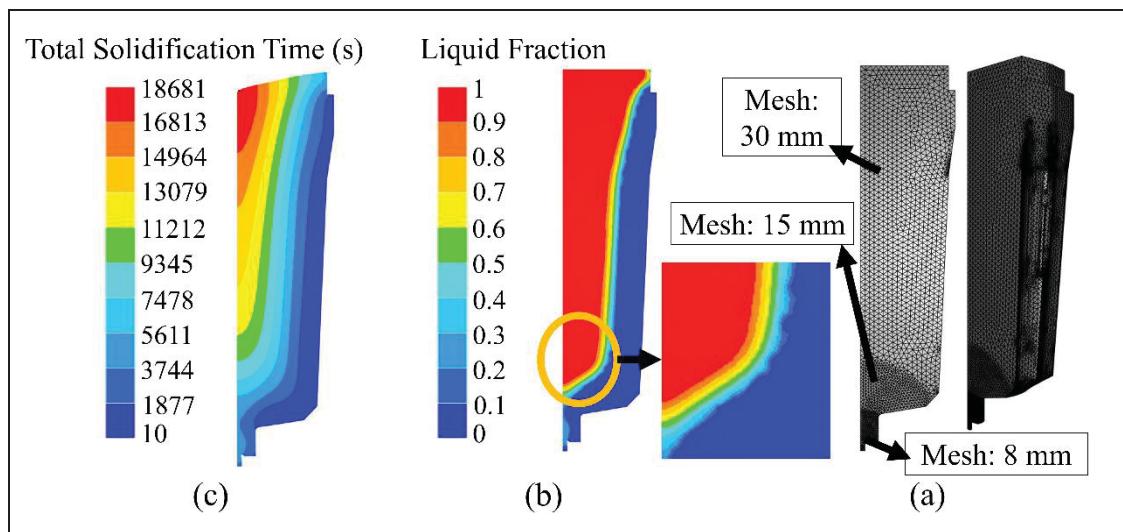


Figure 2.10 90° modèle thermomécanique (OD), (a) Image du maillage avec 235698 éléments (taille de maille de 30 mm avec un affinement moyen de 15 mm à 8 mm), (b) Motif de fraction liquide environ 1 heure après la phase de coulée, (c) Temps total de solidification prévu à partir du calcul thermomécanique (5 h 11 min)

2.3.6 Détermination des paramètres d'entrée

Les modèles de macroségrégation reposent largement sur des paramètres d'entrée pour améliorer la précision des résultats obtenus. Ces paramètres, généralement dépendants de la température, englobent divers comportements thermodynamiques, thermomécaniques et de thermodiffusion. Même de légères déviations dans ces valeurs ont été observées pour impacter notamment les résultats du modèle (Schneider & Beckermann, 1995b; Wu, Ludwig, et al., 2010; Chunping Zhang, 2020). Par conséquent, une attention méticuleuse a été accordée à la détermination ou à la sélection de toutes les propriétés de l'acier.

Les propriétés thermophysiques, thermomécaniques et de thermodiffusion ont été obtenues à partir du logiciel JMatPro® version 11.0 (Sente.Software.Ltd, 2005), de la base de données des matériaux THERCAST® (TherCast2.1®, 2021), de la littérature (Ge, Ren, Li, et al., 2018;

Chunping Zhang, 2020; C Zhang, Shahriari, Loucif, Melkonyan, & Jahazi, 2018), et de l'industrie (Finkl-Steel-Sorel).

Le système de coulée étudié implique différents matériaux distincts : acier AISI 4130 modifié, moule en fonte, anneau en ciment, planche latérale réfractaire isolante, montée réfractaire isolante et planche exothermique au sommet. Les propriétés thermophysiques de tous les matériaux sont répertoriées dans le Tableau 2.5.

Tableau 2.5 Les propriétés du système de coulée

Nom	Propriété	Unité	Valeur	Référence
Acier	Densité de référence	Kg/m ³	6.93e-6	(Sente.Software.Ltd, 2005; TherCast2.1®, 2021)
	Température de fusion du fer pur	°C	1540	(TherCast2.1®, 2021)
	Température de référence (liquidus)	°C	1502	(Sente.Software.Ltd, 2005)
	Coefficient de dilatation thermique	1/K	8.853e-5	(TherCast2.1®, 2021)
	Chaleur latente de fusion	kJ/kg	265	(TherCast2.1®, 2021)
	Émissivité	-	0.8	(TherCast2.1®, 2021; C Zhang et al., 2018)
Moule en fonte	Densité	Kg/m ³	7000	(TherCast2.1®, 2021)
	Conductivité thermique	W/(m.K)	30	(TherCast2.1®, 2021)
Panneaux latéraux réfractaires	Densité	kg/m ³	2353	(TherCast2.1®, 2021; C Zhang et al., 2018)
	Conductivité thermique	W/(m.K)	1.2	(TherCast2.1®, 2021; C Zhang et al., 2018)
Isolant réfractaire de riser	Densité	kg/m ³	868	(TherCast2.1®, 2021)
	Conductivité thermique	W/(m.K)	0.45	(TherCast2.1®, 2021)

Nom	Propriété	Unité	Valeur	Référence
Couverture exothermique	Densité	kg/m ³	500	(TherCast2.1®, 2021)
	Conductivité thermique	W/(m.K)	0.2	(Finkl-Steel-Sorel)
l'anneau (ring) en ciment	Densité	kg/m ³	1700	(TherCast2.1®, 2021)
	Conductivité thermique	W/(m.K)	1.23	(TherCast2.1®, 2021)

Les propriétés de thermodiffusion de l'acier utilisées dans les simulations sont décrites dans le Tableau 2.6. Le coefficient de partitionnement d'équilibre k et les pentes de la ligne liquidus m_l ont été calculés pour chaque élément sur la base des diagrammes de phase binaires linéarisés par rapport au fer (TherCast2.1®, 2021). De plus, le coefficient de dilatation solutale β_i et le coefficient de diffusion dans la phase liquide de chaque élément D_l ont été présentés dans le Tableau 2.6 (Ge, Ren, Li, et al., 2018; TherCast2.1®, 2021).

Tableau 2.6 Propriétés de thermodiffusion pour chaque élément solutal

Éléments	Symbole	Unité	C	Mn	Ni	Cr	Mo	Si	P	Référence
Ratio de partition du soluté	k	-	0.17	0.79	0.55	0.91	0.73	0.72	0.14	(TherCast 2.1®, 2021)
Pente de la liquidus	m_l	°C /wt. %	-81.1	-5	-3	-1.8	-2.9	-18.7	-33.5	(TherCast 2.1®, 2021)
Coefficient de diffusion	D_l	m ² /s	7.4e-9	3.8e-9	2.8e-9	3.15e-9	2.5e-9	1.2e-9	1.5e-9	(TherCast 2.1®, 2021)
Coefficient de dilatation du soluté	β_i	wt.% ⁻¹	0.0141	0.00141	-0.00141	0.000992	-0.00283	0.0123	0.113	(Ge, Ren, Li, et al., 2018; TherCast2.1®, 2021)

Le débit de métal liquide est resté constant tout au long du processus de remplissage, du début à la fin. L'énergie totale libérée lors de l'allumage des deux couvertures exothermiques avant l'achèvement du remplissage a été calculée, en tenant compte de la composition chimique des couvertures exothermiques. Les données initiales d'entrée, telles que le temps de versement et

le volume de la lingotière pour le calcul du débit, ainsi que la composition chimique des couvertures pour le calcul de l'énergie d'allumage, ont été obtenues auprès de notre partenaire industriel (Finkl-Steel-Sorel). Le Tableau 2.7 présente les paramètres d'entrée initiaux utilisés pour la simulation. Le logiciel de matériaux JMatPro® version 11.0 (Sente.Software.Ltd, 2005; TherCast2.1®, 2021) a été utilisé pour obtenir la température de liquidus (1502°C) du matériau étudié. Le surchauffe, représentant la température supplémentaire au-dessus du point de fusion, a été calculé sur la base de la température de liquidus et de la température de versement.

Tableau 2.7 Les paramètres d'entrée initiaux

Propriété	Unité	Valeur	Référence
Temps de remplissage	min	26	(Finkl-Steel-Sorel)
Température initiale du moule et des composants du moule	°C	60	(Finkl-Steel-Sorel)
Température environnementale extérieure	°C	20	(Finkl-Steel-Sorel)
Température de coulée	°C	1580	(Finkl-Steel-Sorel)
Température de surchauffe	°C	78	(Finkl-Steel-Sorel; Sente.Software.Ltd, 2005)
Température du liquidus	°C	1502	(Sente.Software.Ltd, 2005)
Débit pour le modèle à symétrie 90°	mm ³ /s	265,385	(Finkl-Steel-Sorel)
Énergie d'allumage de deux couvertures exothermiques	MJ	72	(Finkl-Steel-Sorel)

2.4 La validation du modèle

La solidification des alliages d'acier est connue pour être un processus complexe influencé par de nombreux facteurs, tels que les gradients de température, la composition de l'alliage et la dynamique d'écoulement. Ces complexités rendent impératif de valider minutieusement tout modèle numérique utilisé pour simuler les comportements de macroségrégation lors de la coulée de lingots. À cet égard, avant de mettre en œuvre des modifications à la configuration de la masselotte ou d'analyser les effets de différentes variables de processus, il est essentiel

de s'assurer de l'exactitude et de la fiabilité du modèle de macroségrégation grâce à une validation expérimentale.

Suite à la section précédente, le modèle de macroségrégation du lingot de 12 tonnes a été développé en utilisant les dimensions industrielles dans le système de coulée comme modèle de référence ou modèle original (OD). Pour valider les capacités prédictives du modèle, des enquêtes expérimentales approfondies ont été menées pour observer et quantifier la formation de macroségrégation, de cavités de rétraction et de porosités de rétraction. Ces résultats expérimentaux ont ensuite été méticuleusement comparés aux résultats de simulation obtenus à partir du modèle numérique. Les études expérimentales ont été détaillées dans la section 2.2 de ce chapitre.

Une fois la modélisation du design original (OD) du lingot de 12 tonnes terminée, sa validation a été réalisée selon l'approche suivante:

1. Les données des paramètres du processus, y compris la température de coulée, la température du moule, la durée de remplissage et les dimensions géométriques des composants du moule de lingot, ont été mesurées directement sur site pendant l'opération de coulée.
2. Comme précédemment mentionné, les paramètres de calcul initiaux ont été soigneusement sélectionnés à partir de diverses sources fiables, y compris les calculs de JMatPro® version 11.0 (Sente.Software.Ltd, 2005), la base de données des matériaux THERCAST® (TherCast2.1®, 2021), la littérature pertinente (Ge, Ren, Li, et al., 2018; Chunping Zhang, 2020; C Zhang et al., 2018), et l'industrie (Finkl-Steel-Sorel).
3. Le modèle numérique a été validé par l'évaluation des températures à la surface extérieure du moule tout au long de l'étape de coulée et de solidification. Les fluctuations temporelles prédictes de la température à l'extérieur du moule ont été comparées aux valeurs mesurées obtenues à partir des thermocouples (TC). Les résultats détaillés du processus de validation sont présentés dans le chapitre 5 de la thèse.

4. La mesure expérimentale du temps total de solidification a été effectuée, puis comparée aux résultats de la simulation. Les conclusions détaillées de ce processus de validation sont exposées dans le chapitre 3 de la thèse.

5. La profondeur de la cavité de rétraction au niveau de la masselotte a été mesurée expérimentalement, puis comparée aux résultats de la simulation. Les conclusions détaillées de ce processus de validation sont exposées dans le chapitre 3 de la thèse.

6. Les schémas de macrosegrégation simulés dans l'ensemble du corps de lingot et de la masselotte ont été comparés aux observations expérimentales obtenues à partir d'un lingot de 12 tonnes découpé dans un environnement industriel. Les rapports de ségrégation des atomes de carbone (C), l'élément le plus ségrégué, et de manganèse (Mn) ont été examinés à divers endroits, notamment la masselotte, le sommet, le milieu, le bas et la ligne médiane du lingot, à la fois par des analyses expérimentales et numériques. De plus, la taille et l'emplacement des ségrégations négatives et positives coniques ont été étudiés et comparés entre la simulation et l'expérimentation. Des détails supplémentaires sur ces résultats sont fournis dans les chapitres 3, 4 et 5 de cette thèse.

7. Après avoir terminé la simulation, la valeur de Niyama a été calculée pour évaluer la probabilité de formation de microporosité. La probabilité et la distribution spatiale de la microporosité, telles que déterminées à partir des résultats de la simulation, ont été comparées à celles obtenues à partir de l'inspection par ressuage (DPI). Les résultats détaillés de cette comparaison sont présentés dans le chapitre 5 de la thèse.

En conclusion, le modèle de conception originale (OD) a été vérifié en utilisant l'approche ci-dessus, et un bon accord a été observé à chaque étape. Avec la validation terminée, le moule était prêt à subir des variations dans la configuration de la masselotte, permettant l'analyse de la cinétique de solidification.

2.5 Étude de la masselotte

Dans cette étape, une série de modifications ont été explorées dans la configuration de la masselotte afin d'améliorer sa conception, dans le but d'évaluer les effets de ces modifications sur la cinétique de solidification. Cette évaluation comprenait des paramètres tels que le taux de refroidissement, la dynamique des fluides, le temps de solidification, le gradient thermique et le taux de solidification, avec un accent particulier sur la réduction des défauts de solidification, notamment la macroségrégation.

Ainsi, une revue de la littérature (Kermanpur et al., 2010; Kumar et al., Juin 2012; H.-c. Li et al., 2018; Tashiro et al., 1983; J. Wang et al., 2012; Y. N. Zhao, 2021) et l'examen des directives existantes pour la conception de la masselotte (M. C. Flemings, 1976; Scepi et al., 1981) ont été menés.

Dans le domaine de la conception de la masselotte, Flemings (M. C. Flemings, 1976) a jeté les bases sur la théorie du flux de chaleur et de masse, en définissant des directives pour la configuration idéale. Celles-ci incluent la minimisation du volume de la masselotte pour répondre aux besoins d'alimentation du lingot, le maintien de gradients de température négatifs de la masselotte à l'lingot, des propriétés thermiques uniformes dans toute la masselotte, et la maximisation de l'isolation avec un chauffage uniforme(Qian et al., 2015). Scepi (Scepi et al., 1981) a souligné un rapport de masselotte (rapport du poids de la masselotte fondu sur le poids total de la masse) d'au moins 23 % et un rapport de minceur (H/D : rapport de la hauteur du corps du lingot par rapport au diamètre moyen du corps du lingot) inférieur à 1,3 pour améliorer la qualité des lingots de forgeage lourds. Cependant, identifier les facteurs pour guider la conception de la masselotte pour minimiser les défauts internes reste un défi.

De plus, une évaluation de toutes les contraintes industrielles concernant la mise en œuvre de variations dans la conception de la masselotte a été réalisée. Par la suite, diverses nouvelles configurations de masselotte ont été testées, en tenant compte de facteurs tels que le rapport de masse, le rapport de minceur et l'isolation de la masselotte. Ces modifications ont été explorées

dans trois catégories différentes: des ajustements de géométrie de la masselotte, des modifications dans le régime thermique de la masselotte, et des combinaisons à la fois d'ajustements de régime thermique et de géométrie.

Ensuite, chaque nouvelle configuration a été appliquée à la conception de la masselotte, puis transférée au logiciel THERCAST®. Des simulations ont été menées pour chaque scénario en utilisant les paramètres d'entrée et les conditions aux limites du modèle validé (OD). De plus, l'influence de chaque nouveau changement dans la masselotte sur la cinétique de solidification, la formation de macroségrégation et d'autres défauts a été analysée.

2.5.1 Géométrie de la masselotte

La géométrie de la masselotte a été ajustée en augmentant et en diminuant sa hauteur. Une nouvelle configuration impliquait d'augmenter la hauteur de la masselotte de 381 mm à 546 mm à l'interface entre le corps de lingot et la masselotte vers le corps. Des modifications ont été apportées à la fois au rapport de masse et au rapport de minceur H/D, sur la base de données rapportées dans la littérature (Kermanpur et al., 2010; Scepi et al., 1981). Dans ce cas, le rapport de masse est passé de 21.35% à 31.25%, tandis que le rapport de minceur a diminué de 1.3 à 1.16. Les Figure 2.11a et b illustrent la conception d'origine et la nouvelle configuration. Des détails supplémentaires sont fournis dans le Tableau 2.8. accompagnant. L'impact de cette nouvelle conception sur la cinétique de solidification, y compris le taux de refroidissement, la vitesse du fluide, la température de liquidus locale et la macroségrégation, est discuté dans le chapitre 3 de cette thèse. De plus, les effets de cette nouvelle conception sur la microporosité et la cavité de retrait sont présentés dans l'annexe 1.

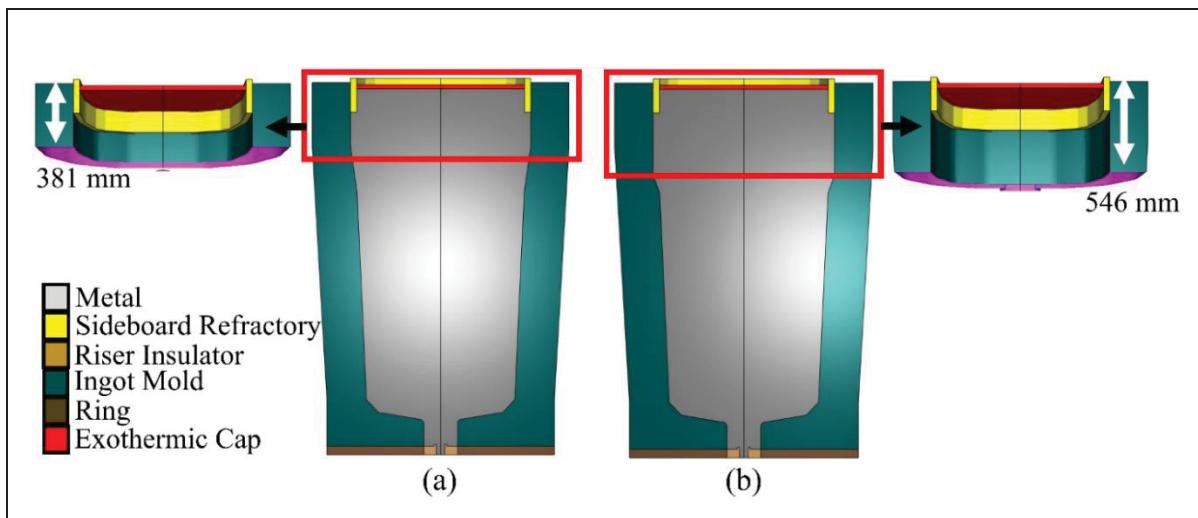


Figure 2.11 (a) Conception originale (OD) comme référence, la partie de la masselotte est présentée dans une image agrandie, (b) La nouvelle configuration implique une augmentation de la hauteur de la masselotte, la partie de la masselotte est présentée dans une image agrandie

Tableau 2.8 Le résumé des propriétés pour les configurations de masselotte analysées

Conceptions	Hauteur de la masselotte	Rapport de masse	Rapport de minceur (H/D)	Hauteur du panneau latéral	Conductivité thermique
Design original	381 mm	21.35%	1.3	203 mm	1.23 W/(m.K)
Augmentation de la hauteur de la masselotte	546 mm	31.25%	1.16	203 mm	1.23 W/(m.K)

Un autre scénario impliquant un changement de géométrie de la masselotte consistait en une réduction de sa hauteur. Dans ce cas, la hauteur de la masselotte a été réduite de 381 mm à 181 mm, entraînant une variation du rapport de masse de 21.35 % à 11.36 %. La Figure 2.12a illustrent la conception d'origine et la nouvelle configuration. Plus de détails sont fournis dans le Tableau 2.9. L'influence de cette conception sur la formation de la transition colonnaire-équiaxe (TCE) et sur la cinétique de solidification a été discutée dans le Chapitre 5 de cette thèse.

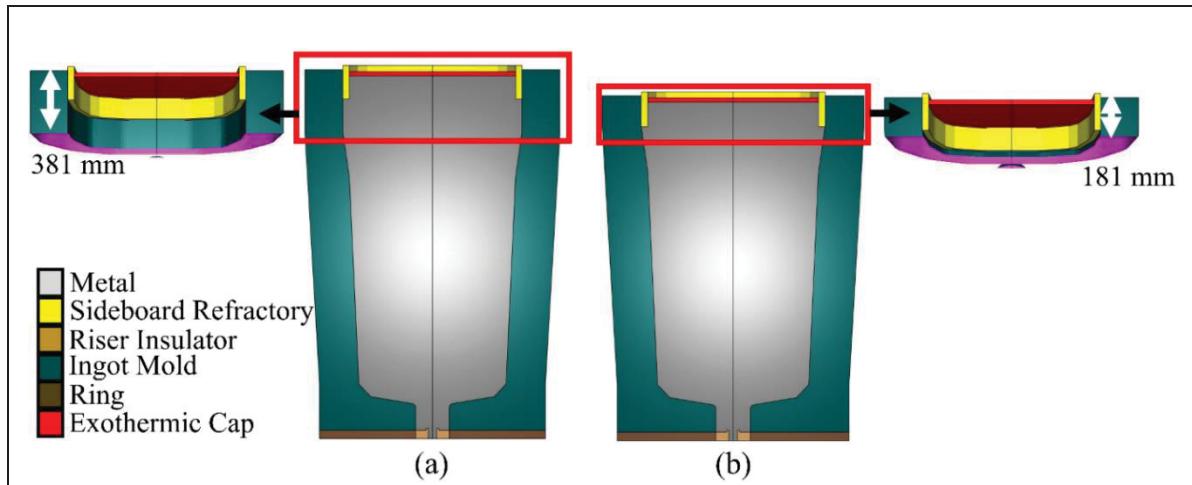


Figure 2.12 (a) Conception d'origine (OD) en tant que référence, la partie de la masselotte est présentée dans une image agrandie, (b) La nouvelle configuration implique une diminution de la hauteur de la masselotte, la partie de la masselotte est présentée dans une image agrandie

Tableau 2.9 Le résumé des propriétés pour les configurations de masselotte analysées

Conceptions	Hauteur de la masselotte	Rapport de masse	Rapport de minceur (H/D)	Hauteur du panneau latéral	Conductivité thermique
Design original	381 mm	21.35%	1.3	203 mm	1.23 W/(m.K)
Diminution de la hauteur de la masselotte	181 mm	11.36%	1.16	203 mm	1.23 W/(m.K)

2.5.2 Régime thermique de la masselotte

Le régime thermique de la masselotte fait référence à sa capacité thermique, représentant sa capacité à conserver le liquide chaud à des températures élevées. En conséquence, quatre conceptions différentes de masselottes ont été explorées en fonction de variations dans le régime thermique. Les caractéristiques clés de chaque nouvelle conception par rapport à l'originale sont résumées comme suit (Figure 2.13, Figure 2.14, Figure 2.15, et Figure 2.16).

1. La masselotte a été préchauffée à 200 °C (Figure 2.13b).
2. Le type de matériau réfractaire a été modifié pour réduire la conductivité thermique du matériau des panneaux latéraux à 0.45 W/(m.K) (Figure 2.14b).
3. Un panneau latéral supplémentaire (réfractaire supplémentaire) d'une hauteur de 177 mm et d'une conductivité thermique de 1.23 W/(m.K) a été introduit à l'intérieur de la masselotte. Ce nouveau panneau latéral a été positionné sous le panneau latéral existant (Figure 2.15).
4. Cependant, la conception numéro 3 a été modifiée en changeant le type de réfractaire supérieur et en réduisant sa conductivité thermique à 0.45 W/(m.K) (Figure 2.16b).

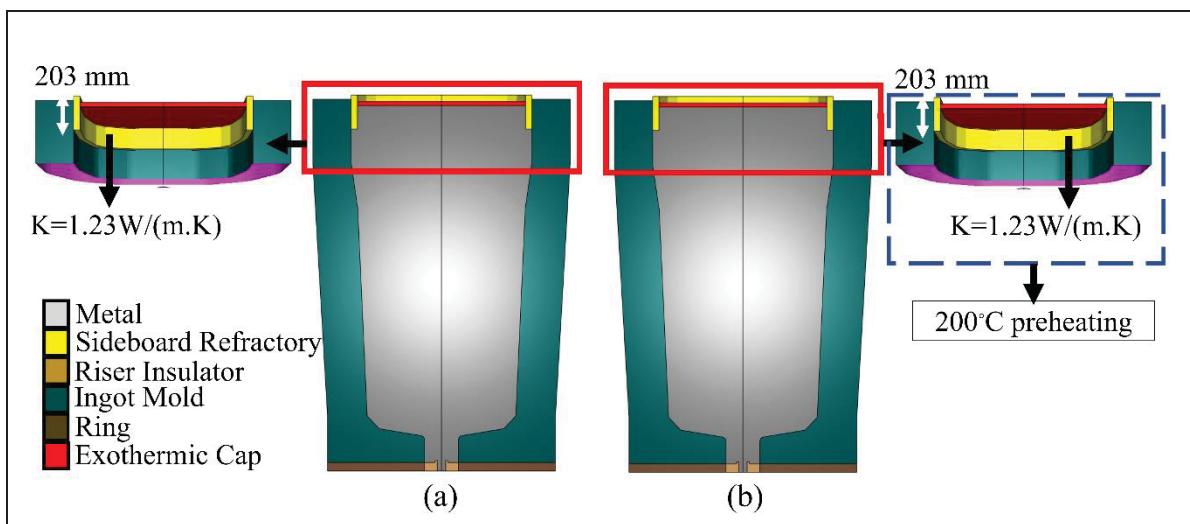


Figure 2.13 (a) Conception originale (OD) en tant que référence, la partie masselotte est présentée dans une image agrandie, (b) La nouvelle configuration implique un préchauffage (200 °C) dans la masselotte, la partie masselotte est présentée dans une image agrandie

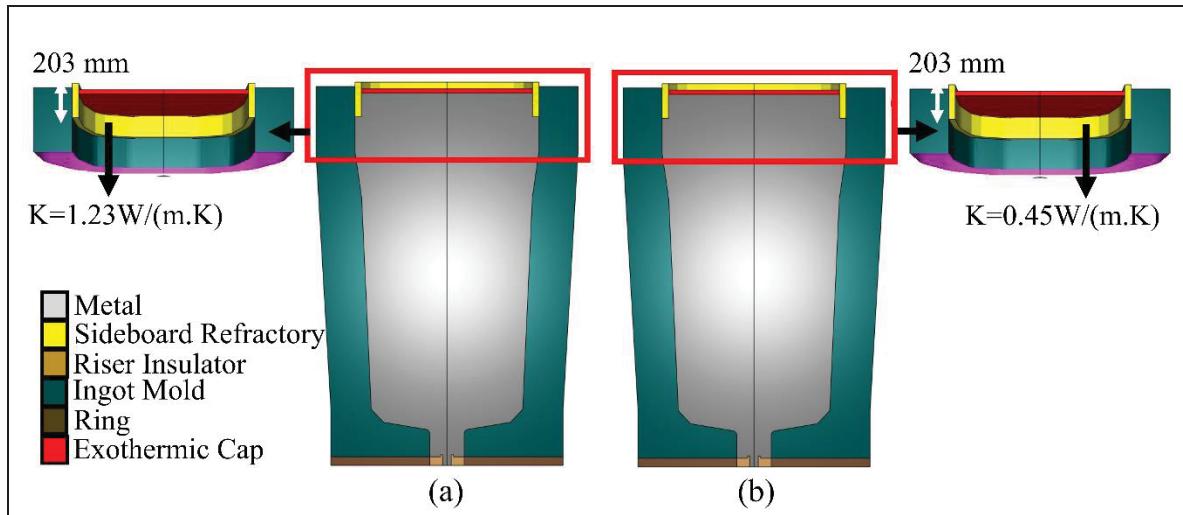


Figure 2.14 (a) Conception originale (OD) en tant que référence, la partie masselotte est présentée dans une image agrandie, (b) La nouvelle configuration implique la réduction de la conductivité thermique des panneaux latéraux, la partie masselotte est présentée dans une image agrandie

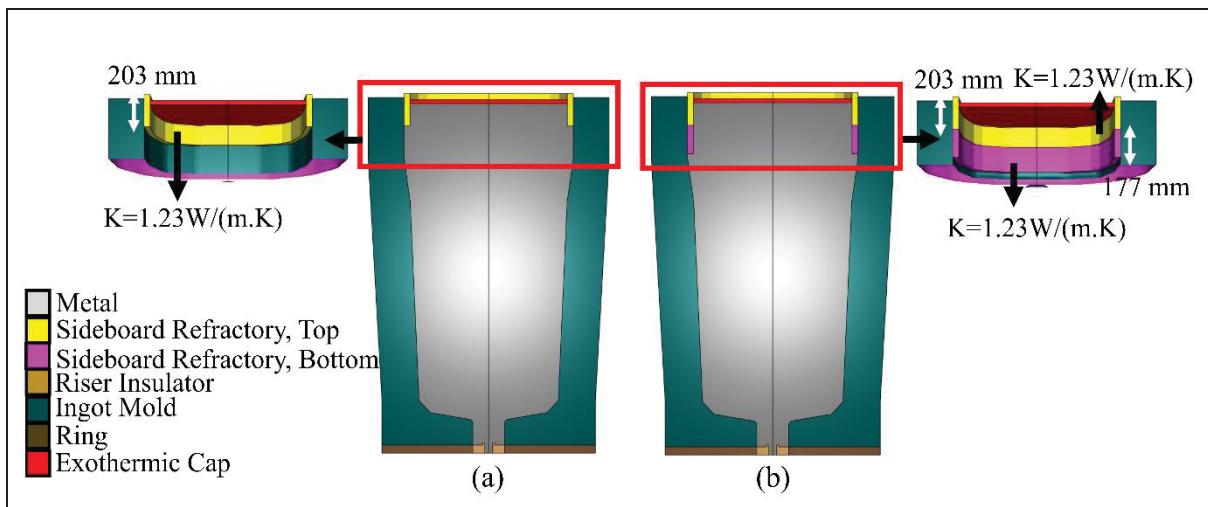


Figure 2.15 (a) Conception originale (CO) comme référence, la partie de la masselotte est présentée dans une image agrandie, (b) La nouvelle configuration implique l'insertion d'un panneau latéral supplémentaire avec le même matériau, la partie de la masselotte est présentée dans une image agrandie

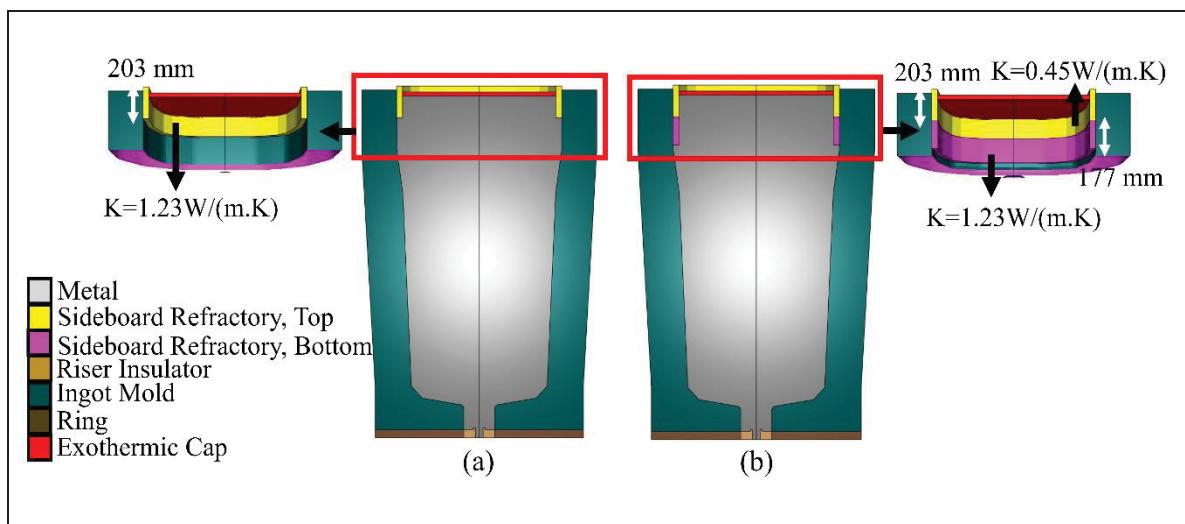


Figure 2.16 (a) Conception originale (CO) comme référence, la partie de la masselotte est présentée dans une image agrandie, (b) La nouvelle configuration implique l'insertion d'un panneau latéral supplémentaire et le changement du matériau réfractaire initial, la partie de la masselotte est présentée dans une image agrandie

Les détails des variations sont présentés dans le Tableau 2.10.

Tableau 2.10 Spécifications de la masselotte dans différents designs

Conceptions	Hauteur du panneau latéral	Conductivité thermique
Design original	203 mm	1.23 W/(m.K)
Préchauffage dans la masselotte jusqu'à 200°C	203 mm	1.23 W/(m.K)
Changement de matériau réfractaire	203 mm	0.45 W/(m.K)
Insertion d'un panneau latéral supplémentaire avec le même matériau	Haut: 203 mm	Haut: 1.23 W/(m.K)
	Bas: 177 mm	Bas: 1.23 W/(m.K)
Insertion d'un panneau latéral supplémentaire et changement de matériau réfractaire initial	Haut: 203 mm	Haut: 0.45 W/(m.K)
	Bas: 177 mm	Bas: 1.23 W/(m.K)

L'influence du régime thermique de la masselotte, pour les configurations ci-dessus, a été analysée sur le temps de solidification, le gradient de température, le flux de chaleur et la macroségrégation dans le chapitre 4 de cette thèse.

2.5.3 Le régime thermique et la géométrie de la masselotte

L'influence de la géométrie de la masselotte et des conditions thermiques pour deux scénarios distincts a été étudiée, comme suit:

1. Une stratégie de modification hybride a impliqué des changements à la fois dans la géométrie et le régime thermique. Cela a impliqué d'augmenter la hauteur de la masselotte de 381 mm à 546 mm, d'augmenter le rapport de masse de 21.35% à 29%, et d'élever la hauteur du panneau latéral de 203 mm à 368 mm. Importamment, la taille du corps de lingot est restée inchangée. L'amélioration du régime thermique de la masselotte a été obtenue en augmentant la hauteur du panneau latéral (Figure 2.17b).
2. La masselotte a été surélevée de 381 mm à 546 mm, tout en réduisant simultanément la taille du corps, ce qui a entraîné une augmentation du rapport de masse de 21.35% à 29.5%. Cette modification a été renforcée en améliorant davantage le régime thermique, grâce à une augmentation de la hauteur du panneau latéral de 203 mm à 406 mm (Figure 2.18b).

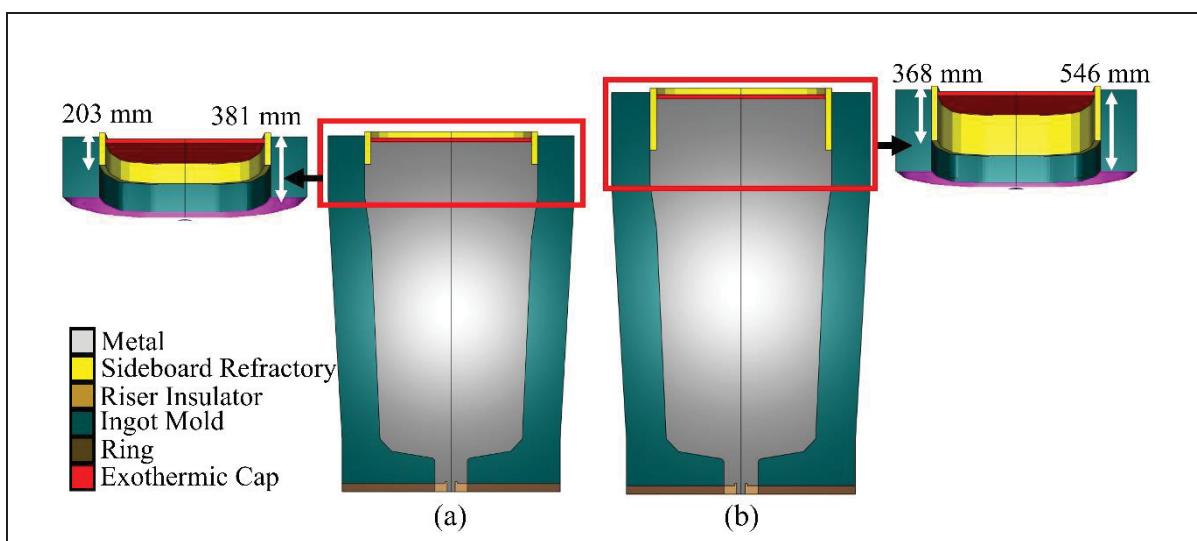


Figure 2.17 (a) Design d'origine (OD) comme référence, la partie de la masselotte est présentée dans une image agrandie, (b) La nouvelle configuration implique une augmentation de la hauteur de la masselotte et de la hauteur du panneau latéral, la partie de la masselotte est présentée dans une image agrandie

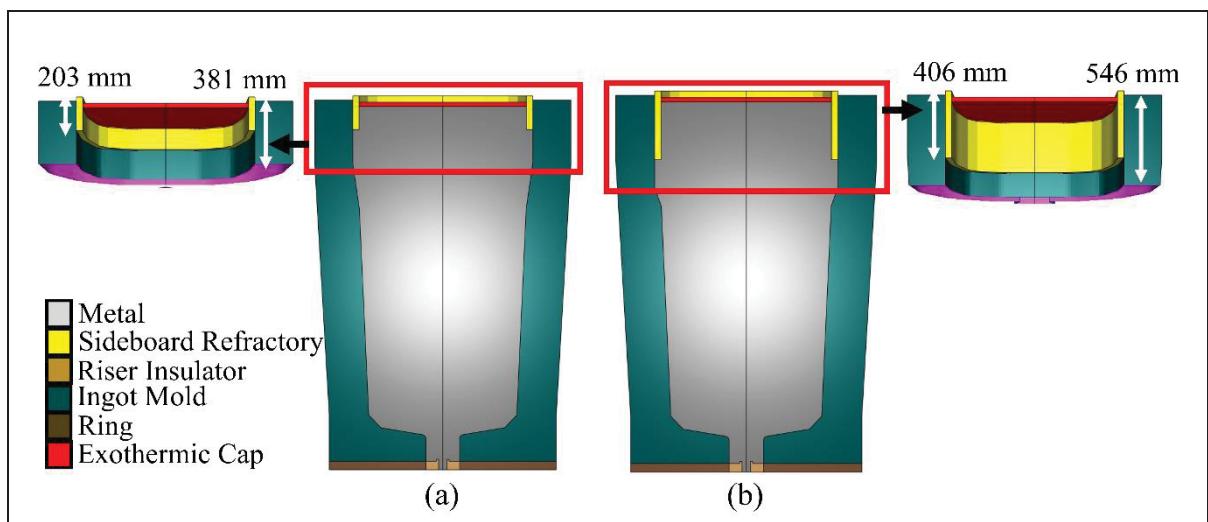


Figure 2.18 (a) Design original (OD) comme référence, la partie de la masselotte est présentée dans une image agrandie, (b) La nouvelle configuration implique une augmentation de la hauteur de la masselotte vers le corps de la lingotière et de la hauteur du panneau latéral, la partie de la masselotte est présentée dans une image agrandie

Les spécificités des variations sont compilées dans le Tableau 2.11.

Tableau 2.11 Spécifications de la masselotte dans différents designs

Conceptions	Hauteur de la masselotte	Rapport de masse	Hauteur du panneau latéral	Rapport de minceur (H/D)	Conductivité thermique
Original design	381 mm	21.35%	203 mm	1.31	1.23 W/(m.K)
Augmentation de la hauteur de la masselotte et de la hauteur du panneau latéral	546 mm	29%	368 mm	1.31	1.23 W/(m.K)
Augmentation à la fois de la hauteur de la masselotte vers le corps de lingot et de la hauteur du panneau latéral	546 mm	29.5%	406mm	1.16	1.23 W/(m.K)

L'impact des changements de conception susmentionnés sur la cinétique de solidification, le point de transition de colonnaire à équiaxe (TCE), la macroségrégation, la microporosité et la formation de microcavités a été minutieusement examiné et discuté dans le chapitre 5, ainsi que dans les annexes I et II de cette thèse. La discussion sur la mise en œuvre des résultats obtenus sur une taille de lingot plus grande a eu lieu dans l'annexe III.

CHAPITRE 3

INFLUENCE OF HOT TOP HEIGHT ON MACROSEGREGATION AND MATERIAL YIELD IN A LARGE SIZE CAST STEEL INGOT USING MODELING AND EXPERIMENTAL VALIDATION

Neda Ghodrati¹, Mounir Baiteche¹, Abdelhalim Loucif², Paloma Isabel Gallego², Jean-Benoit Morin² et Mohammad Jahazi¹

¹Département de génie mécanique, École de technologie supérieure, 1100, rue Notre-Dame Ouest, Montréal, QC H3C 1K3, Canada

² Finkl Steel—Sorel, 100 McCarthy, Saint-Joseph-de-Sorel, QC J3R 3M8, Canada

Cet article a été publié dans *Metals*, Novembre 2022

3.1 Résumé

L'effet de la hauteur de la masselotte sur la formation de motifs de macroségrégation positive et négative, la qualité du lingot et le rendement matériau lors de la solidification d'un lingot coulé de 12 tonnes en acier allié Cr-Mo a été étudié. Une simulation numérique 3D du processus a été réalisée en utilisant la modélisation par éléments finis. Un lingot de 12 tonnes a été coupé en son centre dans la direction longitudinale, et une grande section transversale a été tranchée en petits échantillons. La cartographie chimique de tous les éléments de la composition de l'acier a été obtenue pour tous les échantillons et comparée aux prédictions du modèle à des fins de validation. L'influence de l'augmentation de la hauteur de la masselotte sur le champ de vitesse du métal liquide, la taille et la forme des vortex, la vitesse de refroidissement du liquide et la température du liquidus ont été déterminées. Les résultats ont montré qu'une augmentation de la hauteur de la masselotte de 165 mm a augmenté le temps de solidification, la vitesse du fluide dans des régions comprenant la masselotte et le fond du lingot, et a diminué la température locale du liquidus. La combinaison de tous ces facteurs a entraîné une diminution globale de la macroségrégation positive et négative de plus de 6% et une augmentation de la qualité du lingot. Les résultats sont interprétés sur la base des

interactions entre le transport de soluté et de chaleur couplé avec l'écoulement induit par la thermo-solutal convection et l'écoulement induit par la rétraction.

Mots-clés: masselotte, macroségrégation, simulation numérique, coulée d'lingots, qualité du lingot, rendement matériau

3.2 Introduction

La coulée de lingots est le processus principal utilisé pour produire des aciers de forgeage monoblocs lourds à haute résistance. Les industries de l'énergie, du transport et de la machinerie sont les principaux utilisateurs de ces blocs lourds, qui sont finalement usinés en arbres de transmission de puissance ou en matrices pour des processus de formage (El-Bealy & Fredriksson, 1996; Chunping Zhang et al., 2017). Typiquement, les produits coulés en lingots souffrent de divers défauts survenant pendant les processus de coulée et de solidification (Ge, Li, Han, Xia, & Li, 2016; Samanta & Zabaras, 2006; V Suri, 2002). La macroségrégation, définie comme la distribution non uniforme des éléments d'alliage sur plusieurs centimètres, est l'un des principaux défauts pouvant survenir pendant la solidification. Les hétérogénéités microstructurales qui résultent de la macroségrégation peuvent être si graves qu'il devient impossible de les éliminer, même après de longs traitements thermiques d'homogénéisation, et elles détériorent les propriétés mécaniques du produit final (Ge, Ren, Li, et al., 2018; Edward John Pickering, 2013; E. J. Pickering et al., 2015). Identifier les sources possibles de macroségrégation, telles que la composition de l'alliage, la géométrie du moule à lingot, les paramètres de coulée et leur optimisation, peut aider à minimiser sa gravité. Cela permet ensuite de produire des lingots de grande taille avec des zones macroségrégeées minimales, qui peuvent être éliminées à l'aide d'opérations de traitement thermique appropriées. En raison des coûts significatifs et des complications associées aux essais expérimentaux sur les lingots lourds, la plupart des efforts lors de l'étude de la macroségrégation dans les lingots de grande taille ont jusqu'à présent été consacrés au développement de modèles numériques (Merton C Flemings, 1974; Ge, Ren, Cai, et al., 2018; Edward John Pickering, 2013). De plus, en raison du processus de formation multiphasé et des

interactions compliquées au sein des différentes phases, le mécanisme de formation employé lors de la coulée de défauts est extrêmement complexe. La recherche en modélisation et les simulations numériques de coulée de gros lingots sont reconnues comme la méthode la plus économique à cet égard (Ge et al., 2017). De plus, la plupart des données disponibles dans le domaine concernent l'influence des paramètres de coulée sur la gravité de la macroségrégation. Cette influence se décompose davantage en fonction de la manière dont le débit de remplissage affecte la macroségrégation positive (Chunping Zhang et al., 2018), l'influence du surchauffage initial de la fusion sur le motif de macroségrégation (C. Zhang et al., 2020), et l'influence de la composition de l'alliage, notamment du Mn, sur la macroségrégation du carbone (Loucif, Zhang, Morin, & Jahazi, 2022). Cependant, dans les publications mentionnées ci-dessus, l'influence des caractéristiques du moule à lingots sur la gravité de la macroségrégation, la qualité du lingot et le rendement en matériau n'est pas traitée conjointement. Les configurations de lingots coulés comprennent généralement différentes parties distinctes, à savoir le moule, la masselotte, les panneaux latéraux, le riser, le coureur et la trompette. Parmi ceux-ci, la masselotte joue le rôle le plus important. Elle est située sur la partie supérieure du moule et comprend des panneaux latéraux sur les parois latérales et une couverture ou une planchette en haut du lingot. La masselotte sert principalement à assurer une alimentation continue pendant la coulée, à contrôler le flux de chaleur en haut du lingot pendant la solidification et à fournir une zone où les produits de la ségrégation et les inclusions non métalliques peuvent se rassembler (Hurtuk, 2008). Ainsi, tout changement dans les caractéristiques de la masselotte affectera considérablement l'alimentation du corps du lingot (J. Wang et al., 2012), la redistribution du liquide interdentritique enrichi en soluté (Tashiro et al., 1983), et, par conséquent, la sévérité de la macroségrégation pendant la solidification. En raison de son importance, des recherches approfondies ont été menées sur l'impact des caractéristiques de la masselotte sur la qualité du lingot. Plus précisément, Kumar et al. (Kumar et al., Juin 2012) ont étudié l'influence du matériau réfractaire isolant présent dans la masselotte d'un lingot de 6.2 MT sur le transfert de chaleur, la macrostructure et la macroségrégation d'un acier avec une composition nominale en carbone de 1.01 (wt.%). Ils ont constaté qu'en utilisant un matériau réfractaire exothermique, le nombre de noyaux augmentait et affectait le transfert de chaleur dans le moule, dans le lingot adjacent au matériau réfractaire, et sous la zone de haut de la

lingotière. Cela a conduit à une structure de grain axiale plus fine avec une morphologie de grain plus globulaire et une macroségrégation axiale plus importante. De plus, Tashiro et al. (Tashiro et al., 1983) ont étudié l'influence de la conception du moule et de la masselotte sur le taux de solidification et la formation de porosité centrale dans de grands lingots d'acier à l'aide de la modélisation par éléments finis. Ils ont rapporté que l'isolation ou la réduction de la capacité thermique de la masselotte n'améliore pas en soi les caractéristiques de solidification, et que la forme du corps du lingot a un effet plus significatif. Kermanpur et al. (Kermanpur et al., 2010) ont étudié l'influence de la forme et de la hauteur du matériau isolant dans la masselotte sur le comportement de solidification d'un lingot de 6 MT en acier Cr-Mo à faible teneur en carbone. Ils ont proposé une forme circulaire de masselotte. Ils ont en outre suggéré qu'un rapport de minceur plus faible (le rapport de la hauteur du corps du lingot par rapport au diamètre moyen du corps du lingot) augmente la solidification verticale et réduit la solidification transversale dans la région de la masselotte, ce qui entraîne une efficacité accrue du masselottage. Wang et al. (J. Wang et al., 2012) ont rapporté que l'élimination de la porosité de rétraction dans un lingot d'acier 30Cr2Ni4MoV de 100 MT était influencée par une augmentation du rapport de masse de la masselotte, une réduction du cône de la masselotte, un meilleur matériau isolant thermique dans la masselotte, le préchauffage de la masselotte, et l'ajout de briques isolantes dans la masselotte. Scepi (Scepi et al., 1981) a rapporté que le rapport de masse de la masselotte du lingot ne devrait pas être inférieur à 23% et que le rapport de minceur H/D devrait être inférieur à 1.3 pour améliorer la qualité des lingots de forgeage lourd. En revanche, Zhao (Y. N. Zhao, 2021) a rapporté une augmentation de la macroporosité en ligne centrale, une réduction de la ségrégation A, et un déplacement vers le haut de la position de la porosité de rétraction en augmentant le rapport de minceur H/D. L'auteur a proposé un rapport de minceur H/D de 1.4 pour un lingot de 96 MT et a rapporté que la relation entre le rapport de minceur H/D et la qualité du lingot n'est pas linéaire. Comme mentionné ci-dessus, la plupart des recherches se sont concentrées sur l'influence des caractéristiques de la masselotte sur le degré de porosité et les défauts de rétraction de la solidification. Un corpus de travail beaucoup plus restreint a été consacré à l'examen des effets de la masselotte sur la macroségrégation. Encore moins d'études ont analysé l'influence des caractéristiques de la

masselotte sur le rendement en matière, en se concentrant sur la macroségrégation, la porosité et la cavité de rétraction.

Dans le présent travail, l'influence de la hauteur de la masselotte et du rapport de masse (rapport entre le poids du métal de la masselotte et le poids total du métal) sur la qualité et le rendement en matière d'un lingot de 12 MT en acier haute résistance utilisé dans les industries de l'énergie et des transports a été étudiée. Une modélisation par éléments finis (MEF) en 3D a été utilisée pour prédire l'influence des changements de hauteur de la masselotte sur le taux de refroidissement, le temps de solidification et la macroségrégation. Des travaux expérimentaux examinant la composition chimique et l'évolution de la micro et macrostructure à la fois de la masselotte et du corps du lingot ont été réalisés pour valider le modèle de simulation. De plus, les résultats de la coulée industrielle, tels que le temps de solidification et la profondeur de la cavité de rétraction, ont été comparés à ceux prédictifs pour vérifier davantage la validité du modèle.

3.3 Procédure expérimentale

Un lingot d'acier de forme polygonale de 12 tonnes a été produit à l'aide d'un système de coulée par le bas dans un moule en fonte. Le lingot mesurait environ 2000 mm de hauteur et avait un diamètre supérieur de 1266 mm et un diamètre inférieur de 1000 mm. La masselotte mesurait 381 mm de haut et était doublée de carreaux isolants de 177 mm de haut (Figure 3.1). Dans le processus de fabrication, de l'acier fondu de l'alliage sélectionné (modified AISI 4130), avec la composition chimique initiale indiquée dans le Tableau 3.1, a été fourni en faisant fondre une charge de déchets de matériau d'acier solide dans un four à arc électrique et raffiné à l'aide d'un four de métallurgie en poche et de la technique de dégazage sous vide. Ensuite, le métal fondu préparé a été coulé par le bas pendant 26 minutes dans le moule à 1580 °C à travers la trompette et le coureur jusqu'à ce que le moule soit complètement rempli jusqu'au sommet des carreaux isolants. Le logiciel de matériaux JMatPro® version 11.0 (Sente.Software.Ltd, 2005) a été utilisé pour obtenir la température de liquidus (1502 °C) du matériau étudié. La surchauffe, la température supplémentaire au-dessus du point de fusion, était de 78 °C. Deux couvertures exothermiques ont été utilisées comme source de génération de chaleur.

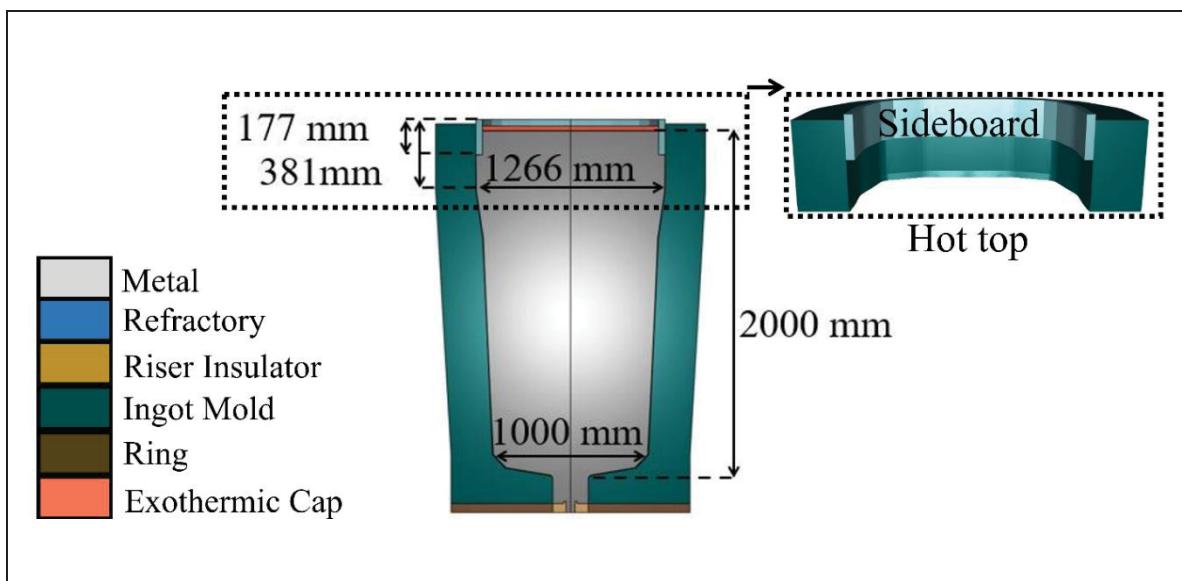


Figure 3.1 Image d'assemblage du lingot de 12 tonnes, du moule et de la masselotte (mode 180°)

Tableau 3.1 Composition chimique initiale du lingot en acier Cr-Mo, tous en wt.%

C	Mn	P	S	Si	Ni	Cr	Mo	Cu	Fe
0.32	0.57	0.015	0.001	0.27	0.23	1.08	0.34	0.16	Équilibre

Lorsque la solidification était terminée, une section longitudinale de l'ensemble du lingot (comprenant à la fois le corps et la masselotte) a été coupée du centre (Figure 3.2a), et deux tranches ont été découpées de chaque côté (Figure 3.2). L'une des plaques a été découpée en 10 blocs plus petits, et leur face axiale a été gravée dans une solution de 50 % HCl-50 % H₂O à 50 °C pour révéler les motifs de macroségrégation (Figure 3.2c). Une autre plaque a été divisée en 370 échantillons espacés à des distances régulières (Figure 3.2d), et tous les échantillons ont ensuite été poncés. Le spectromètre d'émission optique (Thermo Fisher Scientific Inc., Waltham, MA, USA) a été utilisé pour déterminer la composition chimique de tous les échantillons. Chaque spécimen a été mesuré chimiquement dans 3 emplacements sélectionnés au hasard, et la valeur moyenne a été utilisée pour calculer les ratios de ségrégation en utilisant la formule suivante (Z. Duan, Tu, Shen, Shen, & Liu, 2016; Chunping Zhang et al., 2018):

$$R^i = (\omega^i - \omega_0^i) / \omega_0^i$$

Où R^i représente le ratio de ségrégation de l'élément soluté i , ω^i est la concentration locale de soluté, et ω_0^i est sa concentration initiale. Une valeur positive de R^i indique une ségrégation positive, et inversement, une valeur négative de R^i indique une ségrégation négative. Il était difficile de mener des analyses chimiques exactes dans les régions proches du bord de la paroi du lingot en raison de la découpe des échantillons et de l'effet de bord dans le spectromètre. Par conséquent, la composition chimique mesurée au bord des échantillons peut ne pas être aussi précise que dans d'autres points. MATLAB® (The MathWorks Inc., Natick, MA, USA) (MATLAB, 2012b) a été utilisé pour reconstruire les motifs du ratio de ségrégation des éléments variant sur l'ensemble de la section longitudinale. Cela a été fait en appliquant des couleurs fixes dans les zones entre les isolignes, selon les intensités de ségrégation locales.

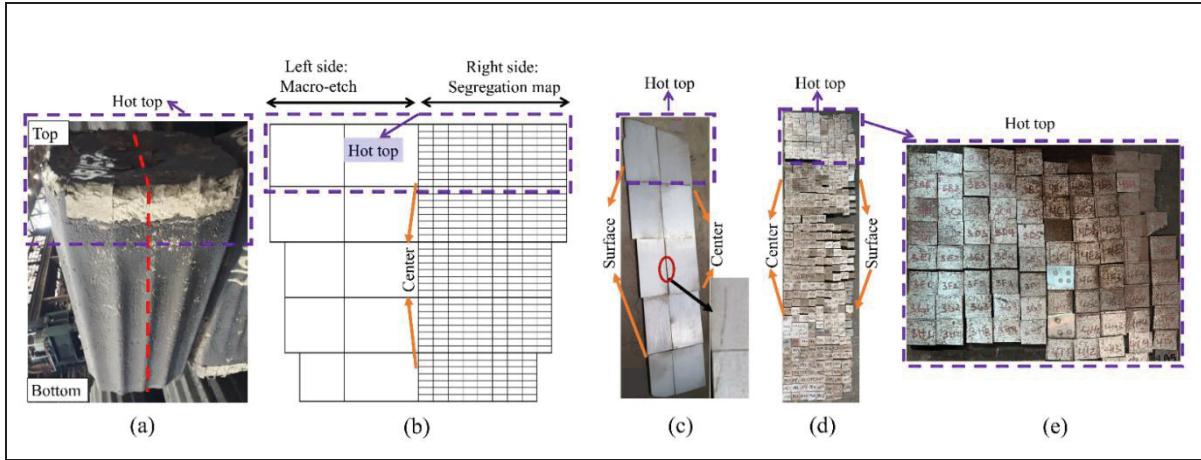


Figure 3.2 (a) Lingot de 12 MT après coulée, la ligne en pointillés rouges présente la position de la section de découpe, (b) Section longitudinale centrale, le côté droit a été utilisé pour la cartographie de la macroségrégation et le côté gauche a été utilisé pour la macro-attaque, (c) Blocs de découpe du lingot pour la macro-attaque, (d) Échantillons de découpe du lingot pour la cartographie chimique et (e) Image agrandie montrant la masselotte coupée en petits échantillons pour l'analyse

3.4 Établissement du modèle

Dans cette étude, les processus de remplissage du moule et de solidification du lingot de 12 MT ont été simulés en trois dimensions à l'aide du logiciel commercial de simulation de coulée par MEF THERCAST®, basé sur le modèle de solidification biphasique volumique moyen (Transvalor, 2017). Le modèle de solidification est basé sur une décomposition multidomaine du système de solidification. Chaque sous-domaine (moule, masselotte, lingot, etc.) est décrit par un maillage d'éléments finis indépendant (P. Patil, Marje, Balachandran, & Balasubramanian, 2015). Pour la modélisation de la solidification, des modèles thermiques et thermomécaniques sont utilisés dans le code MEF. Pendant la solidification, le métal passe par trois états distincts, à savoir l'état liquide, l'état pâteux et l'état solide (P. Patil et al., 2015; Prafull Patil et al., 2017; Transvalor, 2017). Par conséquent, un modèle constitutif hybride, composé d'un comportement thermo-newtonien (équation de Navier-Stokes avec des termes dépendant de la température) pour la phase liquide, d'un fluide non newtonien obéissant à un comportement thermo-viscoplastique pour la zone pâteuse, et d'un comportement thermo-élasto-viscoplastique pour la phase solide doit être considéré à des fins de simulation par MEF (P. Patil et al., 2015; Prafull Patil et al., 2017). Plus précisément, l'équation de Navier-Stokes et les équations de continuité avec transfert de chaleur associé à tous les trois modes de transfert de chaleur sont résolues pour évaluer le comportement de l'écoulement du fluide, le taux de chute de température et la croissance de la fraction solide. Dans la zone pâteuse, approximée comme un continuum unique, une température de cohérence à laquelle les contraintes de soutien de la formation solide sont utilisées comme une limite distincte entre les comportements liquide et solide. L'équilibre thermodynamique est supposé à l'interface solide-liquide, et un comportement thermo-viscoplastique de type Norton-Hoff (Transvalor, 2017) a été considéré pour les plages de température au-dessus de la température de cohérence. En dessous de la température de cohérence, un comportement constitutif thermo-élasto-viscoplastique basé sur la loi de Perzyna (Transvalor, 2017) a été considéré. Aux interfaces des différents sous-domaines, une équation de type Fourier a été utilisée avec une évaluation appropriée de la résistance de contact. La résolution thermique consiste à résoudre l'équation de la chaleur pour chacun des sous-domaines avec des conditions aux limites telles que la

convection, le rayonnement, la température imposée, les échanges d'interface et le flux imposé. La contraction primaire ou secondaire est estimée sur la base d'une perte de volume dans le métal lors d'un incrément dans le calcul thermique. Le calcul thermomécanique est effectué dans le métal en train de se solidifier à la suite du calcul thermique (P. Patil et al., 2015). Une formulation Arbitraire Lagrangien-Eulerien (ALE) est utilisée pour le solveur thermomécanique en éléments finis en 3D (Bellet & Fachinotti, 2004; Prafull Patil et al., 2017). La convection thermique dans le bassin de métal fondu et l'état pâteux, le volume de métal et le changement de masse dans le moule pendant la phase de remplissage sont calculés par une formulation ALE. Enfin, une approche purement lagrangienne est employée pour calculer la déformation dans les régions solidifiées (Transvalor, 2017; C Zhang et al., 2018). Pour réduire le coût de calcul, la sédimentation et la déformation du moule n'ont pas été prises en compte dans la modélisation. Cependant, comme rapporté dans (Transvalor, 2017; Wu et al., 2018; Chunping Zhang et al., 2017), ces hypothèses simplificatrices n'ont pas affecté la précision du modèle dans la prédition de l'intensité de la macroségrégation. Le modèle géométrique du moule et de la masselotte a été construit en utilisant ANSYS WORKBENCH®. En raison de la symétrie, une géométrie de 90° du modèle a été utilisée pour les simulations FEM afin de réduire le temps de simulation. Pour la discréétisation spatiale du lingot et des composants du moule, 746,196 éléments tétraédriques linéaires en trois dimensions ont été utilisés. Une taille de maillage moyenne de 30 mm avec un affinement de maillage de 15 mm et 8 mm a été choisie en fonction d'une analyse préliminaire d'optimisation de la taille du maillage (Figure 3.3a). Le débit du métal fondu était constant du début à la fin du remplissage et a été calculé à 265,385 mm³/s pour la symétrie de 90°. L'énergie totale libérée après l'allumage des deux couvertures exothermiques avant la fin du remplissage était de 72 MJ. Les données d'entrée initiales, telles que le temps de coulée et le volume du lingot pour le calcul du débit, ainsi que la composition chimique de la couverture pour le calcul de l'énergie d'allumage, ont été obtenues auprès du partenaire industriel (Finkl-Steel-Sorel).

Figure 3.3b illustre l'évolution de la température (côté gauche) et de la vitesse du métal liquide (côté droit) à la fin du processus de remplissage. Les résultats montrent qu'une fois le remplissage du moule terminé, la couverture exothermique entre en contact avec le métal en

fusion. Cela entraîne l'allumage de la couverture et induit une augmentation de la température. Plus précisément, la température du métal en fusion à 53 mm sous la surface de la masselotte a augmenté jusqu'à 1696 °C.

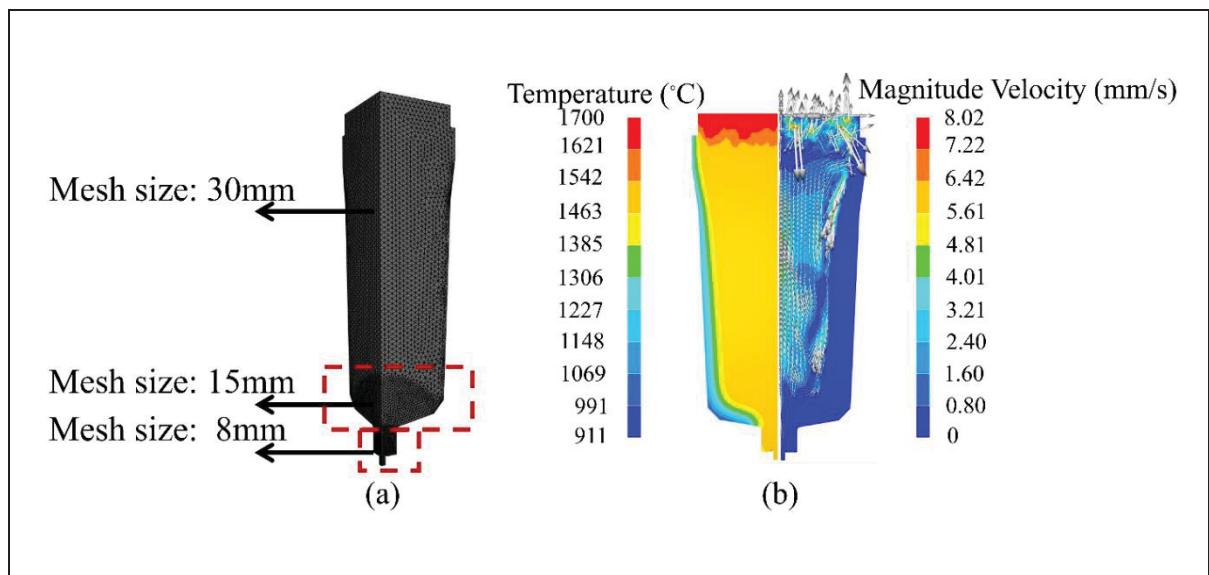


Figure 3.3 (a) Distribution du maillage du modèle à 90°, (b) Schéma de température à gauche et schéma de vitesse à droite après l'allumage des couvertures exothermiques à la fin du remplissage

Enfin, il convient de noter que pour augmenter la précision des résultats obtenus, toutes les caractéristiques thermomécaniques, thermodynamiques et de thermodiffusion utilisées en tant que paramètres d'entrée dans le modèle de macroségrégation étaient dépendantes de la température. Les propriétés thermophysiques et les conditions initiales de tous les autres matériaux sont présentées dans le Tableau 3.2. Elles ont été obtenues à partir du logiciel JMatPro® version 11.0 (Sente.Software.Ltd, 2005; Transvalor, 2017), de la base de données matérielle THERCAST® (TherCast2.1®, 2021), de la littérature (C Zhang et al., 2018), ou de l'industrie (Finkl-Steel-Sorel). Les propriétés thermomécaniques et les calculs de thermodiffusion ont été obtenus à partir de la base de données matérielle THERCAST® (TherCast2.1®, 2021).

Tableau 3.2 Paramètres d'entrée pour la simulation

Nom	Propriété	Unité	Valeur	Référence
Acier	Densité de référence	Kg/m ³	6.93e-6	(Sente.Software.Ltd, 2005; TherCast2.1®, 2021)
	Température de fusion du fer pur	°C	1540	(TherCast2.1®, 2021)
	Température de référence (liquidus)	°C	1502	(Sente.Software.Ltd, 2005)
	Coefficient de dilatation thermique	1/K	8.853e-5	(TherCast2.1®, 2021)
	Chaleur latente de fusion	kJ/kg	265	(TherCast2.1®, 2021)
	Émissivité	-	0.8	(TherCast2.1®, 2021; C Zhang et al., 2018)
Moule en fonte	Densité	kg/m ³	7000	(TherCast2.1®, 2021)
	Conductivité thermique	W/(m.K)	30	(TherCast2.1®, 2021)
Panneaux latéraux réfractaires	Densité	kg/m ³	2353	(TherCast2.1®, 2021; C Zhang et al., 2018)
	Conductivité thermique	W/(m.K)	1.2	(TherCast2.1®, 2021; C Zhang et al., 2018)
Isolant réfractaire de riser	Densité	kg/m ³	868	(TherCast2.1®, 2021)
	Conductivité thermique	W/(m.K)	0.45	(TherCast2.1®, 2021)
Couverture exothermique	Densité	kg/m ³	500	(Finkl-Steel-Sorel)
	Conductivité thermique	W/(m.K)	0.2	(TherCast2.1®, 2021)
Initial condition	Temps de remplissage	min	26	(Finkl-Steel-Sorel)
	Température initiale du moule et des composants du moule	°C	60	(Finkl-Steel-Sorel)
	Température environnementale extérieure	°C	20	(Finkl-Steel-Sorel)

Nom	Propriété	Unité	Valeur	Référence
Initial condition	Température de coulée	°C	1580	(Finkl-Steel-Sorel)
	Température de surchauffe	°C	78	(Finkl-Steel-Sorel; Sente.Software.Ltd, 2005)
	Température liquidus	°C	1502	(Sente.Software.Ltd, 2005)
	Débit pour le modèle de symétrie à 90°	mm ³ /s	265,385	(Finkl-Steel-Sorel)
	Énergie d'allumage de deux couvertures exothermiques	MJ	72	(Finkl-Steel-Sorel)
	Nombre de maillages du lingot et des composants du moule	-	746,196	-
	Taille de maillage	mm	30	-
	Affinement de maillage	mm	15 et 8	-

3.5 Résultats et discussions

3.5.1 Validation du modèle

La solidification des alliages d'acier est un phénomène complexe, et de nombreux paramètres influent sur le processus de solidification et les comportements de macrosegrégation lors de la coulée des lingots. Par conséquent, il est extrêmement important de valider le modèle de macrosegrégation numérique avant d'analyser l'influence des différentes variables de processus. Dans cette étude, l'approche suivante a été utilisée pour valider le modèle de lingot de 12 MT : (i) Les données d'information sur le processus telles que la température de coulée, la température du moule, le temps de remplissage et les dimensions géométriques des composants du moule du lingot ont été mesurées sur site pendant l'opération de coulée ; (ii) Comme mentionné précédemment, les paramètres de calcul initiaux précis ont été obtenus à partir de calculs de JMatPro® version 11.0, de la base de données matérielle THERCAST®, de la littérature ou de l'industrie ; (iii) Le temps total de solidification et la profondeur de la cavité de retrait au niveau de la masselotte ont été mesurés expérimentalement et comparés

aux résultats de la simulation ; (v) Le modèle de macrosegrégation simulé a été comparé aux résultats expérimentaux obtenus pour le lingot de 12 MT découpé dans l'industrie. Le temps de solidification prédict était de 5 heures et 11 minutes après la simulation du lingot de 12 MT, tandis que le temps de solidification réel dans l'industrie était rapporté à moins de 6 heures. Ainsi, il y avait un accord acceptable entre les résultats prédicts et réels. Pendant la solidification, il y a une diminution de la température, une augmentation de la densité et une diminution du volume du métal. La diminution de volume la plus importante se produit sur le dessus du lingot sous forme de cavité de retrait (Baghani, 2019). La profondeur de la cavité de retrait par rapport au bord le plus élevé du mur du lingot a été mesurée expérimentalement et numériquement. Comme le montre la Figure 3.4a, le résultat de la simulation a donné une valeur de 80 mm, tandis que les mesures sur un lingot réel dans l'industrie ont donné 76.4 mm (Figure 3.4b). Le pourcentage d'erreur entre les résultats de la simulation et les résultats expérimentaux pour la profondeur de la cavité de retrait était inférieur à 5 %, démontrant un accord étroit entre la prédiction du modèle et le résultat industriel.

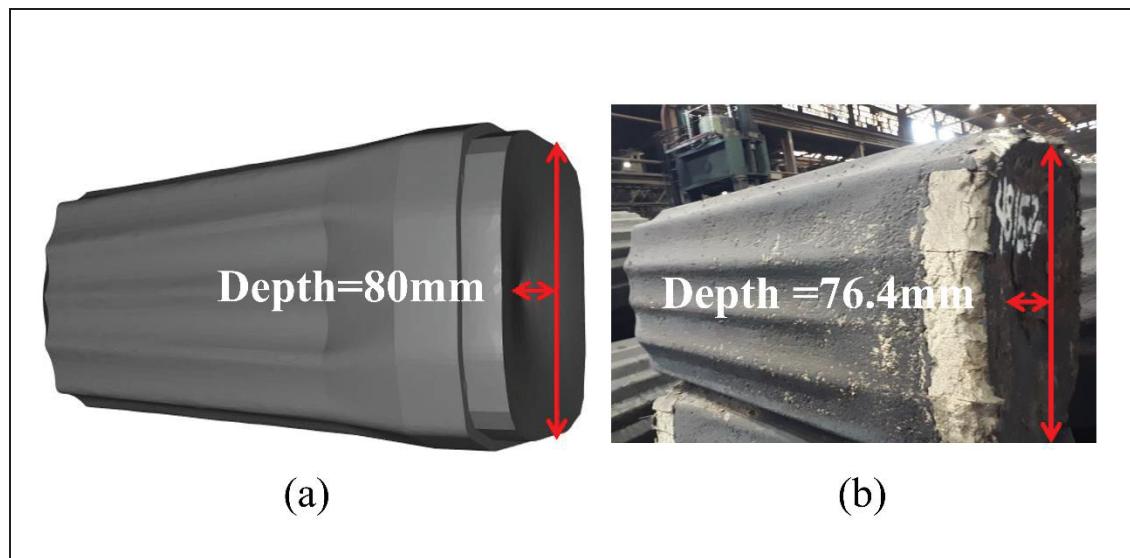


Figure 3.4 Cavité de retrait du lingot de 12 MT à la fin de la solidification : (a) Résultat prédict, (b) Résultat d'un lingot réel

De plus, le modèle de solidification à deux phases, moyenné en volume, a été vérifié en comparant les résultats de simulation et expérimentaux des schémas de macroségrégation en carbone du lingot d'acier de 12 MT étudié. Comme le montre la Figure 3.5a, le schéma de

macroségrégation typique prédit, comprenant la macroségrégation négative conique dans la zone inférieure, la macroségrégation positive dans la zone supérieure et la zone enrichie en solutés entre le centre et la paroi du lingot, correspond bien aux résultats expérimentaux (Figure 3.5b).

Le ratio de macroségrégation du carbone a été mesuré dans la direction radiale au sommet du lingot (Figure 3.6a), à la base du lingot (Figure 3.6b), le long de l'axe central du lingot à 300 mm sous la masselotte, et à 600 mm au-dessus du fond du lingot (Figure 3.6c,d), et comparé aux résultats de simulation (Figure 3.6). Les résultats montrent que la variation du ratio de macroségrégation au sommet, au bas, et au centre (emplacements spécifiés dans les Figure 3.6a-d) a été prédictive entre (-0.12 à 0.41), (-0.12 à 0.04), (0.17 à 0.56), et (-0.12 à -0.03), respectivement. Cette variation a été mesurée expérimentalement entre (-0.094 à 0.5), (-0.12 à 0.03), (0.17 à 0.57), et (-0.09 à -0.04) au sommet, au bas, au centre (zone supérieure), et au centre (zone inférieure), respectivement. Encore une fois, une bonne concordance peut être observée entre les distributions de macroségrégation expérimentales et numériques. Certaines différences mineures entre les résultats de simulation et expérimentaux ont été observées à certains endroits près de la paroi du lingot, de l'axe central, et de la zone située à l'extrémité centrale de la masselotte (Figure 3.5 et Figure 3.6). Ces différences sont dues aux difficultés de mesurer la composition chimique des bords de l'échantillon ou aux hypothèses du modèle de solidification actuel (négligeant la sédimentation des grains équiaxes). Il convient de noter que lors du processus de solidification réel du lingot en industrie, la couverture exothermique sur le dessus de la masselotte s'allume lorsqu'elle entre en contact avec le métal fondu. De plus, de la poudre et de la poussière s'accumulent toujours à la surface de la masselotte, ce qui affecte certainement la vitesse de refroidissement ; cependant, sa quantification est assez difficile et n'a donc pas pu être prise en compte dans le modèle. Ces "perturbations" sont probablement à l'origine des différences entre les résultats de simulation et expérimentaux dans la région centrale supérieure à l'extrémité de la masselotte (la petite région rouge, 100 mm dans la direction radiale et 50 mm de profondeur, dans la Figure 3.5b).

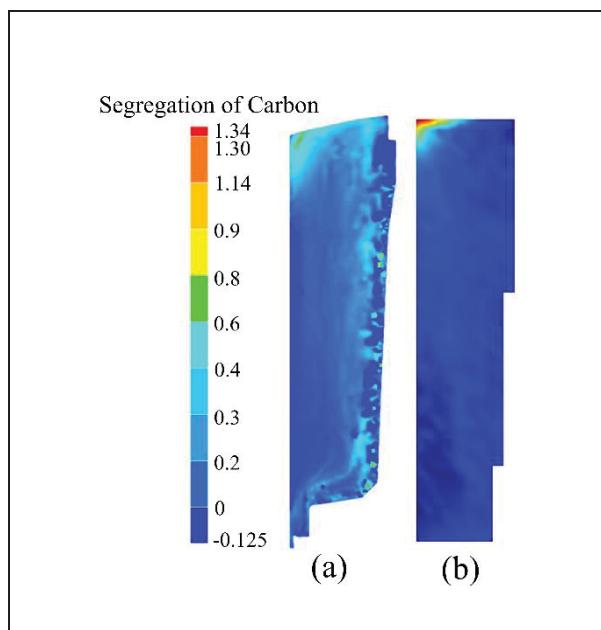


Figure 3.5 Carte de la macroségrégation de carbone : (a) Résultat prédict (modèle à 90°), (b) Résultat expérimental

Sur la base des comparaisons ci-dessus, on peut dire que le modèle numérique prédit de manière fiable les résultats expérimentaux et peut donc être utilisé pour analyser l'effet des caractéristiques de la masselotte sur les paramètres du processus de solidification et la macroségrégation, comme discuté ci-après.

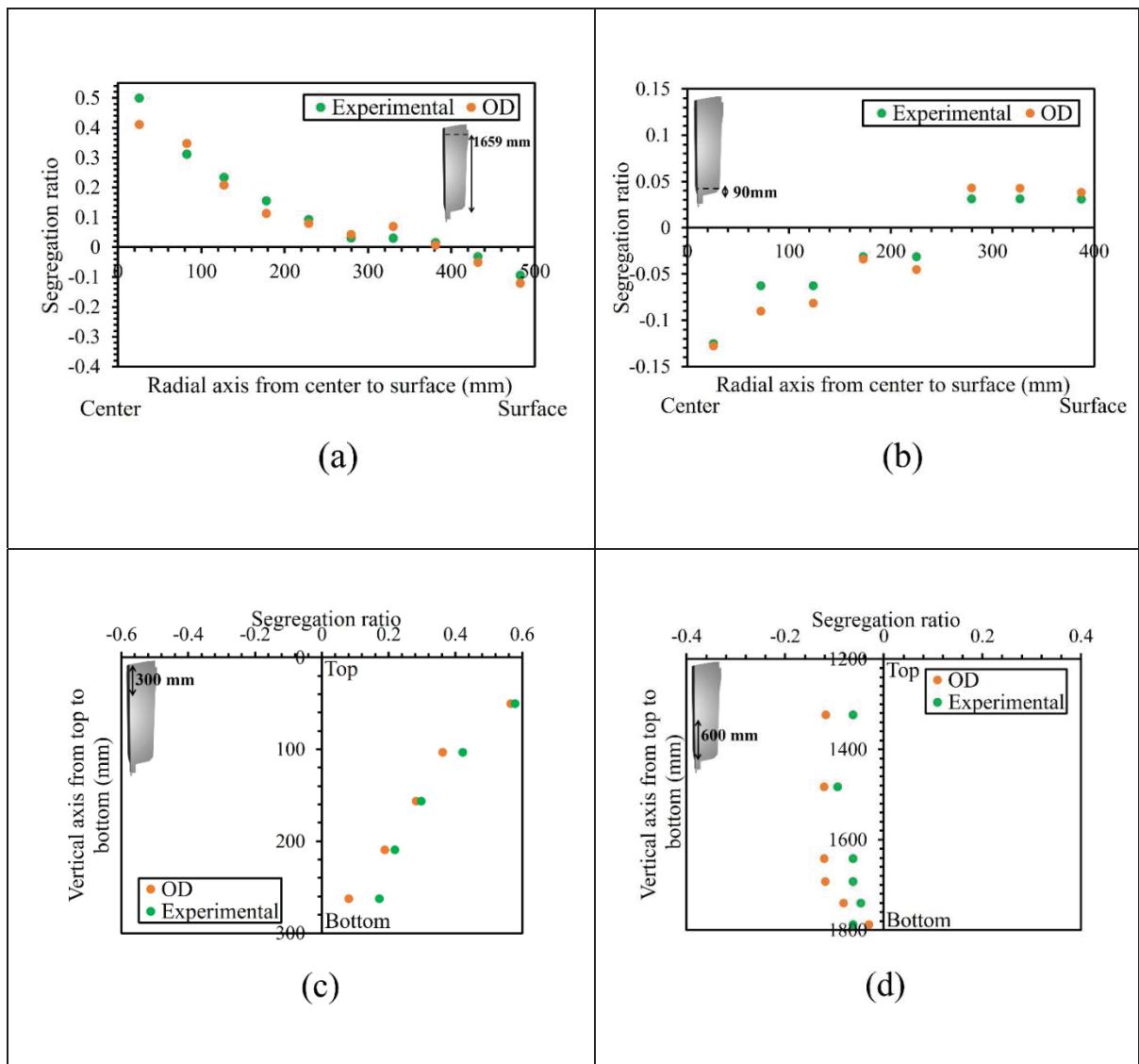


Figure 3.6 Ratio de macroségrégation du carbone à la fin de la solidification : (a) Le long de l'axe radial au niveau de la masselotte (hauteur de 1659 mm à partir du bas), (b) Le long de l'axe radial en bas (hauteur de 90 mm à partir du bas), (c) Le long de l'axe central, du bas vers le haut à une distance de 300 mm sous la masselotte, et (d) Le long de l'axe central, du bas vers le haut à une distance de 600 mm au-dessus du bas du lingot

3.5.2 Caractéristiques de la masselotte et macroségrégation

Dans la nouvelle conception, la hauteur de la masselotte a été augmentée de 381 mm à 546 mm à l'interface entre le corps de lingot et la masselotte vers le bas. Par conséquent, à la fois la masse et le rapport de minceur H/D ont été modifiés, conformément à d'autres données

rapportées dans la littérature (Kermanpur et al., 2010; Scepi et al., 1981). Le Tableau 3.3 montre les paramètres de la conception existante, désignée par la suite comme conception originale (OD) et de la nouvelle conception (ND), proposée dans le présent travail. Une simulation a été menée en considérant les mêmes paramètres de coulée avec le modèle validé, OD, la seule différence étant le débit. La capacité volumétrique totale de l'ensemble du moule a légèrement changé, passant de 1.66×10^9 mm³ to 1.68×10^9 mm³ en augmentant la hauteur de la masselotte. Le débit de OD était de 265,385 mm³/s, tandis que celui de ND était de 267,949 mm³/s (pour une symétrie à 90°).

Tableau 3.3 Caractéristiques de la masselotte dans la conception originale et dans la nouvelle conception

Type	Symbole	Hauteur de la masselotte	Rapport de masse	Rapport de minceur (H/D)	Hauteur du panneau latéral
Conception Originale	OD	381 mm	21.35%	1.3	203 mm
Nouvelle Conception	ND	546 mm	31.25%	1.16	203 mm

Parce qu'une très petite modification a été apportée au volume total du lingot avec le nouveau design, on s'attendait à ce que le temps de solidification ne change pas beaucoup. Cela a été confirmé par les résultats obtenus, car le temps de solidification était de 5 heures et 11 minutes pour l'OD et de 5 heures et 19 minutes pour le ND (Figure 3.7).

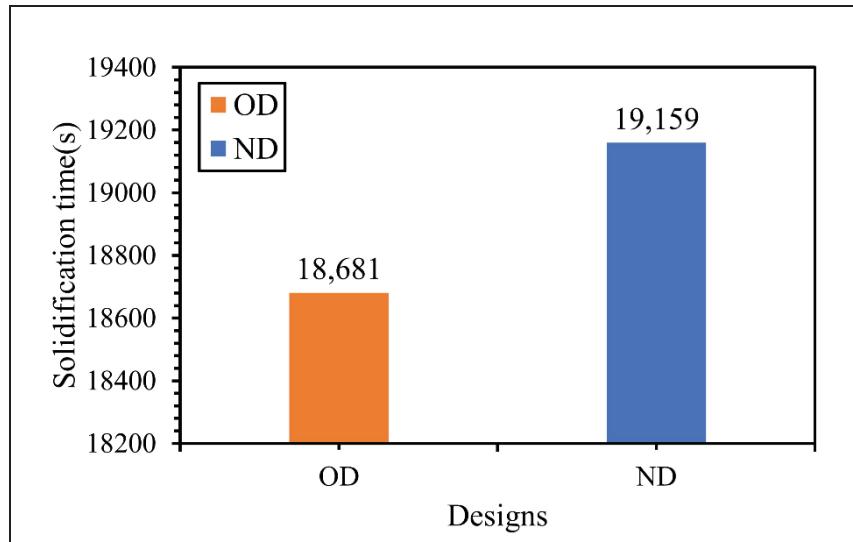


Figure 3.7 Temps de solidification à la fin de la solidification dans OD et ND

De plus, une comparaison entre la contraction sur la surface supérieure de la masselotte dans l'OD et le ND a respectivement montré une profondeur de rétraction de 80 mm et 63 mm par rapport au bord le plus élevé de la paroi du lingot, ce qui est une différence mineure qui confirme le temps de solidification mentionné ci-dessus. Cependant, l'analyse du rejet supérieur en raison de la cavité de rétraction a montré que le ND avait un rendement plus élevé en termes de découpe supérieure que l'OD. Le rejet du dessus du lingot était d'environ 5,4 % et 4,9 % dans l'OD et le ND, respectivement.

Après la simulation thermomécanique, les nouveaux résultats de macroségrégation (ND) ont été comparés avec les résultats précédents de la conception originale (OD). La Figure 3.8 montre les résultats de distribution de la macroségrégation du carbone obtenu dans ND et OD. Plus précisément, on peut observer qu'à 1691 mm du bas du lingot (position indiquée dans la Figure 3.8a), le ratio de macroségrégation du carbone a été réduit d'environ 6.5 %, indiquant clairement l'impact du nouveau design. Un comportement similaire a été observé sur le motif de macroségrégation négative, où, comme le montre la Figure 3.8b à une hauteur de 170 mm du bas du lingot, la macroségrégation négative a été réduite de 6.25 %. Ainsi, la qualité du lingot a été améliorée en termes d'intensité de macroségrégation. La variation des ratios de

macroségrégation pourrait provenir de différentes sources, comme le discuteront les prochaines sections.

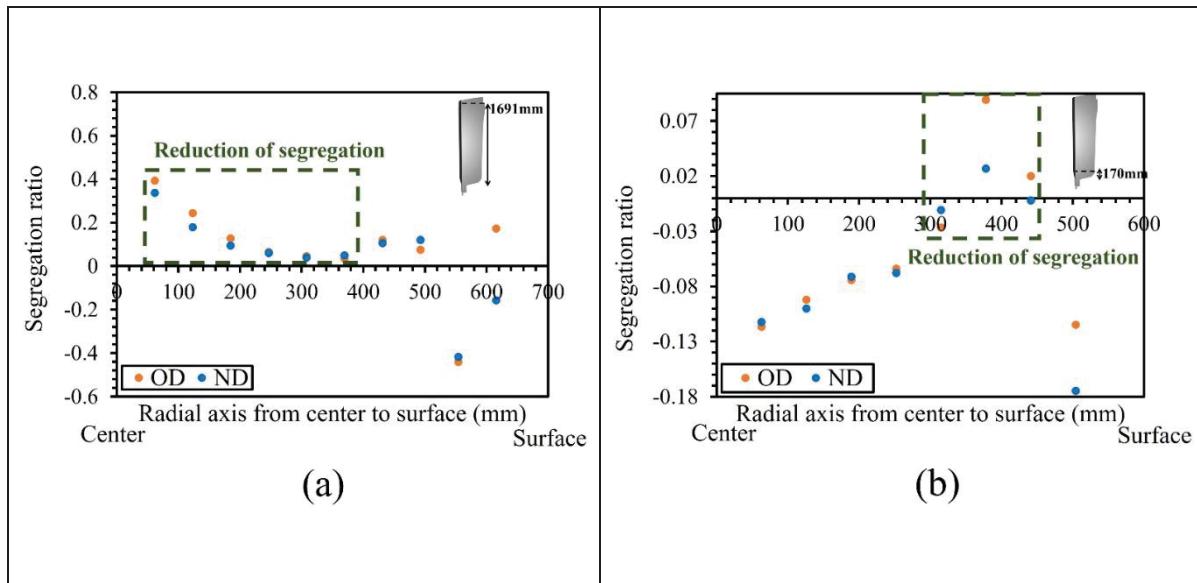


Figure 3.8 Ratio de macroségrégation du carbone lorsque la solidification est terminée dans l'OD et le ND : (a) le long de l'axe radial au niveau de la masselotte (hauteur de 1691 mm depuis le bas) et (b) le long de l'axe radial au fond (hauteur de 170 mm depuis le bas)

3.5.3 Pression du liquide et écoulement du fluide

Une modification de la hauteur de la masselotte et du rapport de masse influence également la pression liquide, la vitesse du fluide et la redistribution des atomes solutés dans le bain de métal en fusion pendant la solidification. Les résultats présentés dans la Figure 3.9 indiquent que la pression liquide relative statique au bas de lingot a augmenté de 5800 Pa à 8000 Pa dans ND par rapport à OD. Comme le rapporté par Wang et al.(J. Wang et al., 2012), une pression liquide accrue influe sur l'alimentation en liquide des parties centrale et inférieure du lingot, lissant le canal d'alimentation et facilitant la solidification continue du lingot.

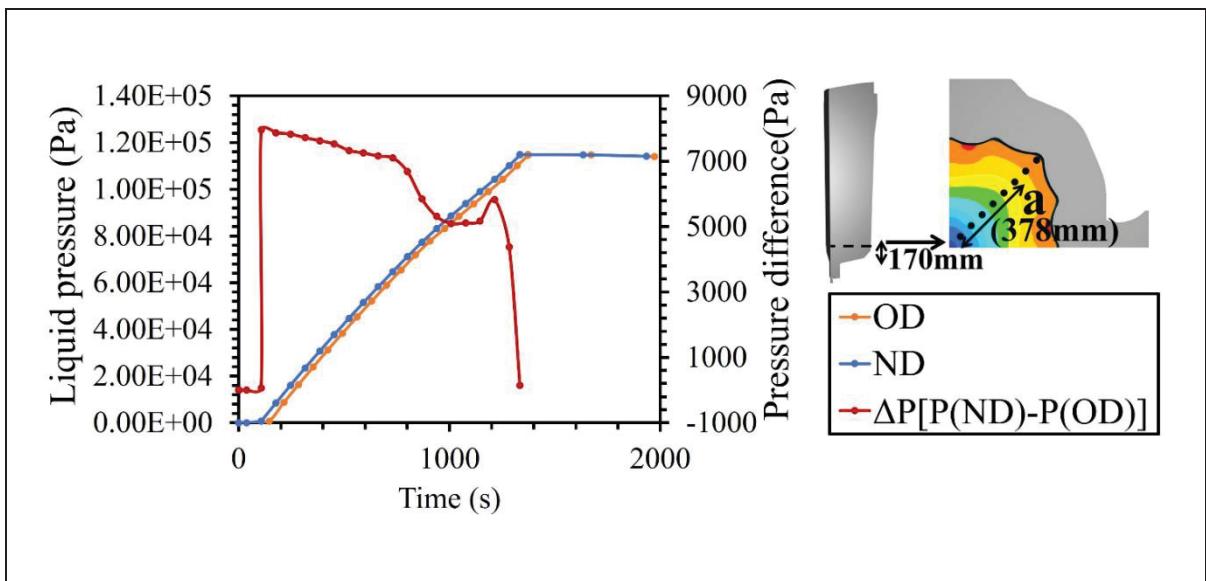


Figure 3.9 Pression liquide statique dans OD et ND au point a, à une hauteur de 170 mm depuis le bas et à 378 mm dans la direction radiale depuis le centre

Ainsi, il y avait plus d'alimentation dans les régions inférieures du corps de lingot pour compenser la contraction, et donc, il y avait plus d'écoulement de fluide vers le fond du lingot. La formation d'une structure colonnaire de la surface de la paroi vers le centre pendant la solidification du lingot entraîne le rejet des éléments de soluté des bras des dendrites (Edward John Pickering, 2013). Par conséquent, un écoulement de fluide accru devant le front solide, résultant d'une pression liquide plus élevée, entraîne l'emport des éléments de soluté rejetés des dendrites en croissance et les transfère vers d'autres emplacements dans le bain de métal en fusion. Les résultats présentés dans la Figure 3.10 montrent que la vitesse du fluide dans ND était généralement plus élevée que dans OD. La fraction liquide et les vecteurs de vitesse liquide à 33 % de formation solide sont illustrés dans la Figure 3.10a. L'amplitude de la vitesse du fluide a été tracée à différents emplacements et est indiquée comme ligne1 (L1), ligne2 (L2), ligne3 (L3) et ligne4 (L4) au fond, au milieu, en haut et au centre du lingot, respectivement (Figure 3.10b, , c, d et e, respectivement). Par exemple, une augmentation de la vitesse du fluide dans ND par rapport à OD a été observée jusqu'à 3.39 mm/s et 3.54 mm/s dans l'axe central du lingot (L4) à une hauteur de 500 mm et 1800 mm (Figure 3.10e). De plus, une alimentation en liquide élevée du haut vers le bas du corps de lingot à L4 dans ND (Figure 3.10e) pourrait réduire le risque de formation de micro-porosités, comme rapporté également

dans la littérature (J. Wang et al., 2012). Selon les résultats, un fluide avec une vitesse plus élevée a été observé dans ND devant le front solide et l'axe central du lingot dans L2, L3 et L1, respectivement. Ce processus aboutit finalement à une distribution plus homogène des éléments de soluté dans le liquide en vrac dans le corps de lingot.

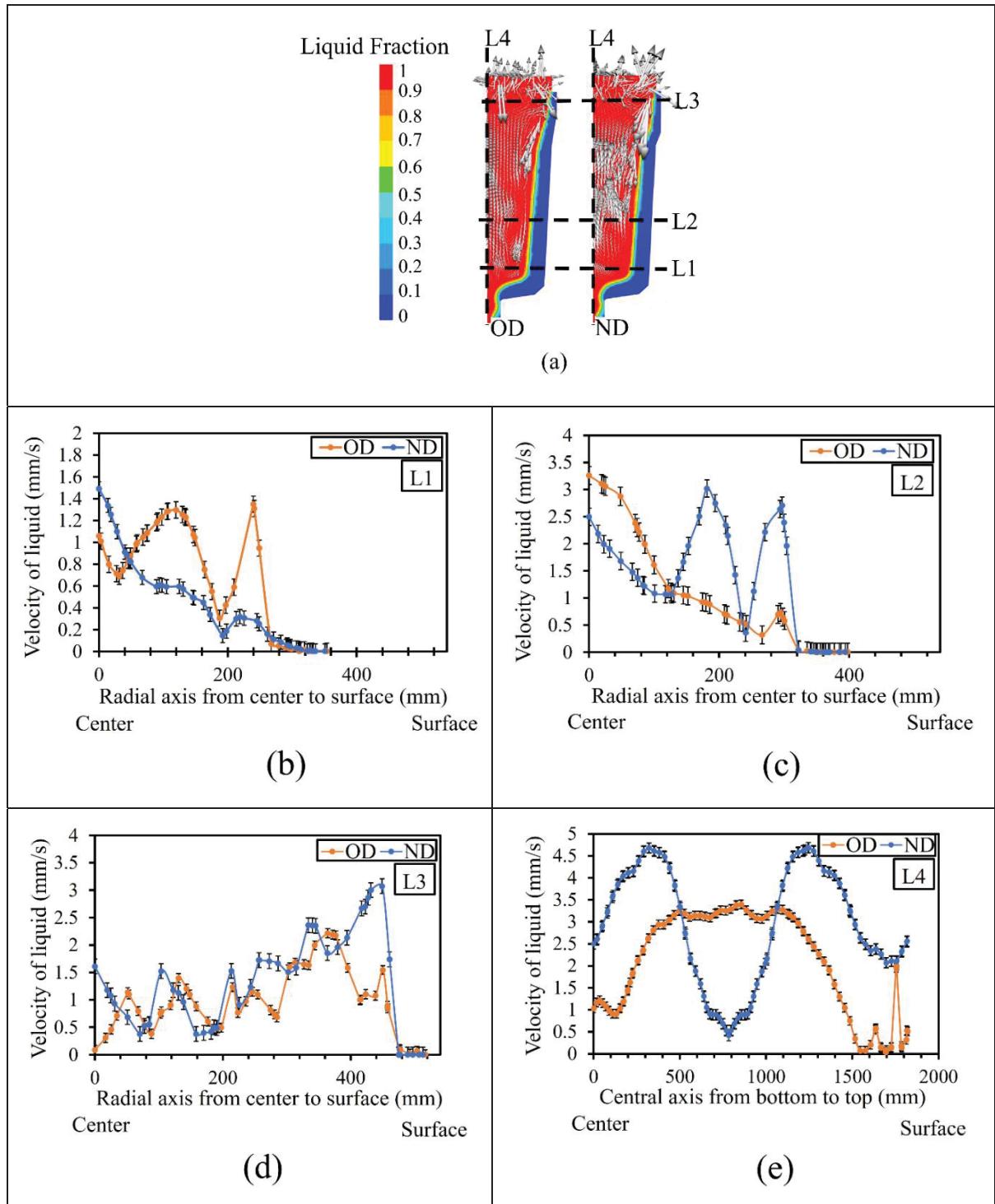


Figure 3.10 Fraction liquide et vecteurs de vitesse du fluide de OD et ND à une fraction solide de 33 %, (b) Évolution de l'amplitude de la vitesse du liquide dans OD et ND en L1, (c) L2, (d) L3, (e) L4

De plus, comme l'ont rapporté Darning et al. (Xu & Li, 1991a), lorsque la pression du liquide augmente, le nombre de tourbillons produits dans le liquide est également réduit. Par conséquent, moins d'éléments solutés sont piégés dans les tourbillons et une meilleure homogénéité du liquide est attendue. Les résultats présentés dans la Figure 3.11 montrent que, pour le ND, lorsque la fraction solide atteint 45 %, des instabilités ainsi que des courants fluides plus intenses sont produits devant le front solide dans la région de la masselotte. En revanche, pour OD, lorsque la fraction solide est de 45 %, deux grands tourbillons sont produits dans la région de la masselotte. Comme l'ont rapporté Campbell et al. (Campbell, 2015), une instabilité fluide plus élevée n'est pas appropriée pour la formation des premières particules. Zhang et al. (Chunping Zhang et al., 2018) ont rapporté que l'augmentation de l'instabilité du flux de fluide lors du versage retarde le développement de la convection thermosolutale et réduit la macroségrégation dans le corps de coulée. La présence d'un tourbillon dans la masse liquide accumule les éléments solutés dans leur cercle. Parfois, il y a un manque d'éléments solutés liquides à l'intérieur des tourbillons devant le front solide. Le résultat de tout cela est une ségrégation sévère en développant le front solide. Enfin, comme l'ont rapporté Patil et al. (Prafull Patil et al., 2017), une vitesse de liquide plus élevée entraîne une flottaison accrue des inclusions dans le laitier, et donc une réduction de leur présence dans l'ingot solidifié. Sur la base de l'analyse ci-dessus, on pourrait dire qu'en augmentant la vitesse du liquide dans la condition ND, plusieurs mécanismes deviennent opérationnels, chacun contribuant à une meilleure homogénéité chimique du métal liquide.

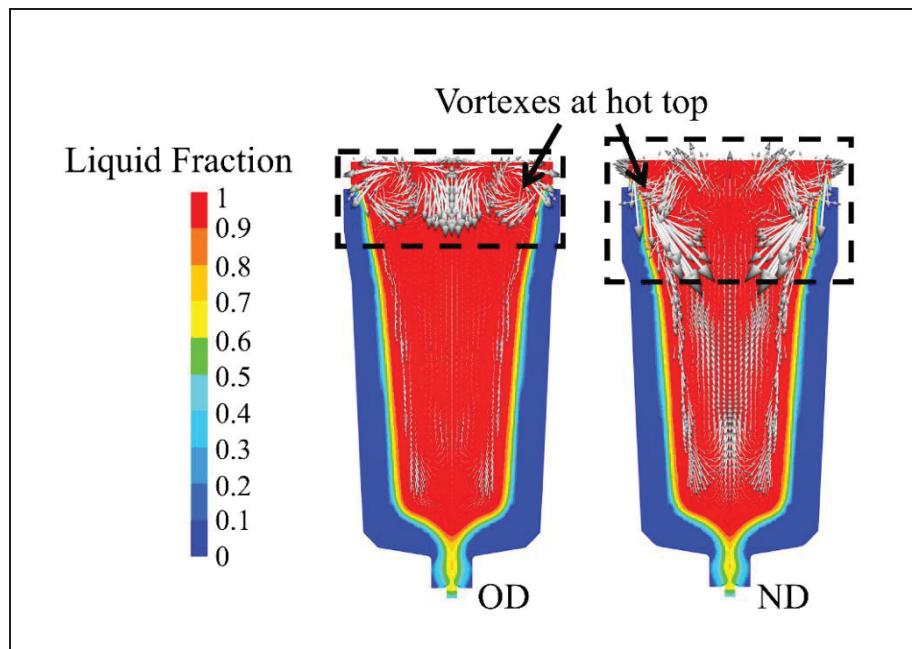


Figure 3.11 Fractions liquides et vecteurs de vitesse des fluides de OD et ND à 45% de fractions solides

3.5.4 Taux de refroidissement

Comme indiqué dans la Figure 3.7, le temps de solidification a été augmenté de 8 minutes lorsque la hauteur de la masselotte et le volume de masse ont été augmentés. De plus, comme indiqué dans la Figure 3.8 et discuté ci-dessus, une réduction des ratios de macroségrégation positive et négative jusqu'à 6.5% et 6.25% respectivement, a été obtenue dans des emplacements spécifiés. L'augmentation du temps de solidification influence dans une certaine mesure la vitesse de refroidissement du liquide dans la zone pâteuse. La Figure 3.12 montre la vitesse de refroidissement du liquide dans la zone pâteuse à des points sélectionnés : 61 mm (Figure 3.12a) et 123 mm (Figure 3.12b) dans l'axe radial à partir du centre dans la masselotte et 378 mm (Figure 3.12c) et 441 mm (Figure 3.12d) dans l'axe radial à partir du centre dans le fond du lingot. Selon les résultats, une réduction de la vitesse de refroidissement a été observée dans ND par rapport à OD. Une différence entre la vitesse de refroidissement de OD et ND a été atteinte jusqu'à 0.008 °C/s (Figure 3.12a, point a), et 0.003 °C/s (Figure 3.12b, point b) dans la masselotte. En revanche, ces valeurs étaient de 0.03 °C/s (Figure 3.12c, point c) et 0.028 °C/s (Figure 3.12, point d) dans le fond du corps du lingot. La légère réduction de la vitesse de

refroidissement du liquide dans la zone pâteuse pour le cas ND crée des conditions plus favorables pour que les éléments solutés diffusent davantage dans la partie solide de l'état pâteux. L'augmentation de la diffusion des éléments solutés dans l'état solide entraîne moins d'éléments solutés rejetés de la partie solide vers l'état liquide et un plus petit gradient soluté. Hultgren (Ge, Ren, Cai, et al., 2018; Hultgren, 1973) a proposé que la macroségrégation puisse se former lorsqu'un mouvement relatif tel qu'une flottabilité solutale apparaît entre un solide et le liquide environnant. Le gradient soluté est réduit lorsque le temps de diffusion de l'élément soluté augmente. Il semble que les temps de diffusion dans des points avec moins de macroségrégation observée dans ND étaient suffisants. Comme indiqué par Duan et al. (Z. Duan et al., 2016), une diminution de la vitesse de refroidissement due à la doublure réfractaire réduit la macroségrégation dans ces régions. Honghao et al. (Ge, Ren, Cai, et al., 2018) ont proposé une solidification à refroidissement graduel qui atténue la macroségrégation. Ainsi, la réduction de la macroségrégation positive et négative observée à des emplacements spécifiés pourrait être liée à une vitesse de refroidissement plus lente du liquide dans l'état pâteux et au fait qu'il y a suffisamment de temps pour la diffusion des éléments solutés. Il convient également de noter qu'une diminution de la vitesse de refroidissement du liquide a également un effet croissant sur le temps de solidification du lingot, même si cet impact peut être mineur.

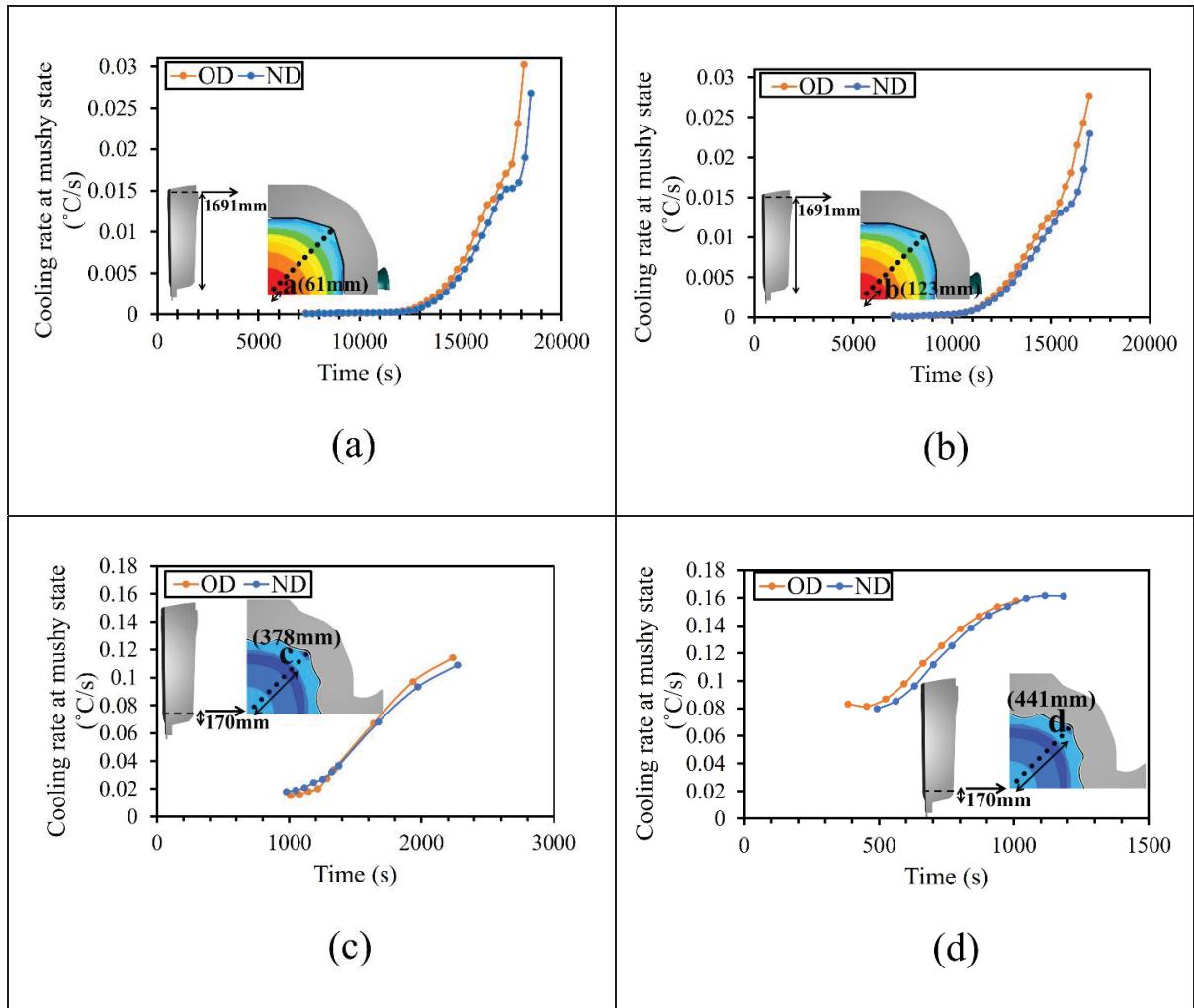


Figure 3.12 aux de refroidissement du liquide à l'état pâteux dans OD et ND : (a) à 61 mm dans la direction radiale à partir du centre dans la zone de la masselotte (hauteur de 1691 mm à partir du bas), (b) à 123 mm dans la direction radiale à partir du centre dans la zone de la masselotte (hauteur de 1691 mm à partir du bas), (c) à 378 mm dans la direction radiale à partir du centre du lingot au bas du corps du lingot (hauteur de 170 mm à partir du bas) et (d) à 441 mm dans la direction radiale à partir du centre du lingot au bas du corps du lingot (hauteur de 170 mm à partir du bas)

3.5.5 Température du liquidus

La température liquide locale est un autre facteur modifié par les variations de la hauteur de la masselotte. La température liquide locale a été déterminée en examinant la température et la fraction liquide dans le modèle de macroségrégation. La température liquide locale a été

définie à chaque emplacement comme la température la plus basse à laquelle le métal en fusion était entièrement liquide. Les résultats rapportés dans la montrent une différence entre la température liquide locale et la température liquide nominale à la moitié de la distance radiale par rapport à la paroi du lingot (surtout près de la surface en raison de l'échange de chaleur plus élevé avec la paroi du moule). Plus précisément, ces résultats montrent que dans le cas de ND, approximativement dans la direction radiale à une demi-distance de la paroi du lingot, la température liquide locale a changé d'environ 14.5 °C dans la zone de la masselotte (Figure 3.13a) et de 7.5 °C dans la zone inférieure du lingot (Figure 3.13b). Le rapport de ségrégation du carbone était compris entre (-0.07, 0.25) et (-0.04, 0.185) dans OD et ND, respectivement dans les zones mentionnées ci-dessus de la masselotte. En revanche, dans les zones inférieures du lingot, ces valeurs étaient dans les plages (-0.06, 0.12) et (-0.06, 0.08) dans OD et ND, respectivement.

L'impact des résultats ci-dessus sur l'intensité finale de la macroségrégation pourrait être interprété en termes d'influence des concentrations locales de carbone: en augmentant la hauteur de la masselotte (cas ND), le métal liquide refroidissait plus lentement de la température locale à la température liquide locale que celui dans OD. Cela a résulté en une différence plus petite entre la température liquide locale et la température liquide nominale car la concentration locale d'atomes de carbone est plus proche de la concentration nominale. En plus des effets ci-dessus, comme rapporté par Loucif et al. (Loucif et al., 2018), la concentration d'atomes de carbone affecte également la quantité et le type de la première phase solide formée (c'est-à-dire, la ferrite delta ou l'austénite), et influence donc le niveau de macroségrégation car la solubilité du carbone est différente dans chacune de ces phases solides. Selon la Figure 3.14, l'intervalle de solidification a diminué dans ND à la moitié de la distance radiale par rapport à la paroi du lingot dans la zone de la masselotte (Figure 3.14a) et dans la zone inférieure du lingot (Figure 3.14b). La combinaison d'une réduction de l'intervalle de solidification et d'une diffusion suffisante des atomes de carbone dans l'état solide dans la zone pâteuse (comme mentionné ci-dessus) dans la phase de ferrite delta maintient la concentration d'atomes de carbone près de celle nominale, et par conséquent, il y a moins de macroségrégation du carbone sévère.

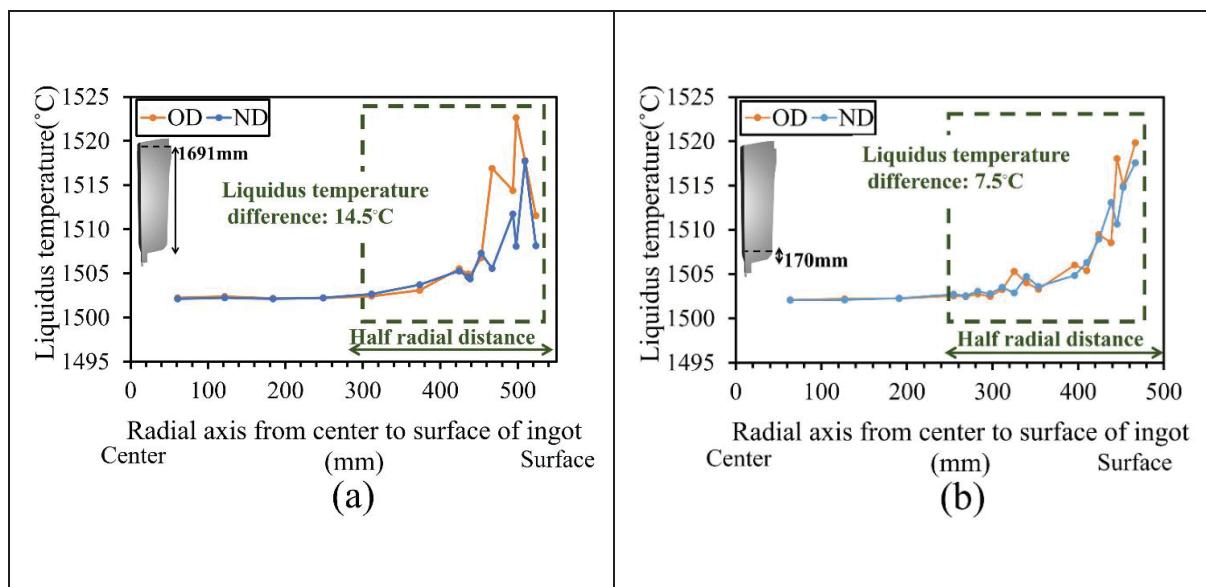


Figure 3.13 Température liquidus en °C dans OD et ND à : (a) Dans la direction radiale, à une hauteur de 1691 mm depuis le bas dans la zone de la masselotte, (b) Dans la direction radiale, à une hauteur de 170 mm depuis le bas dans la zone du corps du lingot

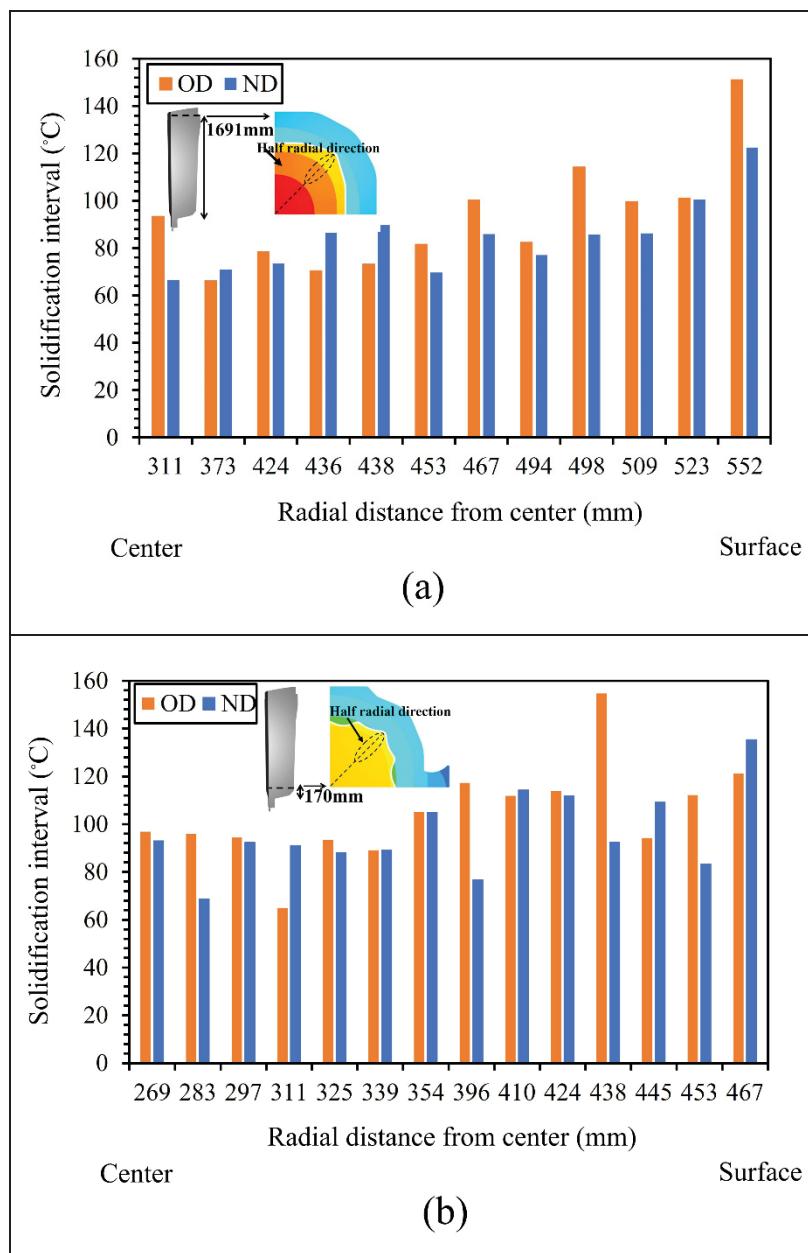


Figure 3.14 Intervalle de solidification en °C dans OD et ND à : (a) À une demi-distance radiale du mur du lingot dans la zone de la masselotte (à une hauteur de 1691 mm depuis le bas), (b) À une demi-distance radiale du mur du lingot dans la zone du corps du lingot (à une hauteur de 170 mm depuis le bas)

3.6 Conclusion

L'effet de l'augmentation de la hauteur de la masselotte sur le rapport de macroségrégation positif et négatif, la qualité du lingot et le rendement matériel ont été étudiés dans un lingot de coulée de 12 MT en acier à haute résistance. Un modèle FE 3D a été développé et initialement validé avec des résultats expérimentaux obtenus à partir de toute la surface d'une section longitudinale du lingot brut. Les principales conclusions de ces recherches sont les suivantes:

1. L'augmentation de la hauteur de la masselotte a réduit la macroségrégation négative et positive aux hauteurs de 170 mm et 1691 mm à partir du bas du lingot jusqu'à 6.25 % et 6.5 %, respectivement.
2. L'augmentation de la hauteur de la masselotte a augmenté le temps de solidification jusqu'à 8 minutes par rapport à la conception initiale et a légèrement diminué le taux de refroidissement à l'état pâteux.
3. Une alimentation plus importante en liquide depuis la masselotte vers le fond de la poche et une distribution plus homogène des éléments solutés dans le liquide en vrac ont été identifiées comme les principales sources de la plus faible intensité de macroségrégation observée à des emplacements spécifiques.

Ces résultats peuvent contribuer à la conception de nouvelles géométries de masselottes pour des lingots de plus grande taille (100 tonnes ou plus), où le risque de macroségrégation est encore plus élevé.

3.7 Contributions des auteurs

Conceptualisation, Neda Ghodrati et Mohammad Jahazi ; Curatelle des données, Neda Ghodrati ; Analyse formelle, Neda Ghodrati ; Acquisition de financement, Mohammad Jahazi ; Investigation, Neda Ghodrati ; Méthodologie, Neda Ghodrati, Abdelhalim Loucif et Paloma Gallego ; Administration de projet, Mohammad Jahazi ; Ressources, Morin Jean-Benoit et

Mohammad Jahazi ; Logiciel, Neda Ghodrati et Mounir Baiteche ; Supervision, Mohammad Jahazi ; Validation, Mohammad Jahazi ; Visualisation, Neda Ghodrati ; Rédaction - brouillon original, Neda Ghodrati ; Rédaction - révision et édition, Mounir Baiteche, Abdelhalim Loucif et Mohammad Jahazi.

3.8 Remerciements

Les auteurs remercient Finkl Steel-Sorel Co, le Conseil de recherches en sciences naturelles et en génie du Canada (CRSNG) et l'École de technologie supérieure, qui leur ont fourni des données techniques, des installations de coulée et des matériaux, ainsi qu'un soutien financier.

3.9 Financement

Cette recherche a été financée dans le cadre de la subvention CRDDPJ 536444-18 du CRSNG.

3.10 Conflits d'intérêts

Les auteurs déclarent qu'ils n'ont pas d'intérêts financiers concurrents connus ou de relations personnelles qui auraient pu sembler influencer le travail présenté dans cet article.

CHAPITRE 4

INFLUENCE OF THE HOT TOP THERMAL REGIME ON THE SEVERITY AND EXTENT OF MACROSEGREGATION IN LARGE-SIZE STEEL INGOTS

Neda Ghodrati ¹, Henri Champliaud ¹, Jean-Benoit Morin ² et Mohammad Jahazi ¹

¹Département de génie mécanique, École de technologie supérieure, 1100, rue Notre-Dame Ouest, Montréal, QC H3C 1K3, Canada

² Finkl Steel—Sorel, 100 McCarthy, Saint-Joseph-de-Sorel, QC J3R 3M8, Canada

Cet article a été publié dans *Manufacturing and Materials Processing* en Avril 2024.

4.1 Résumé

L'influence de conceptions de masselottes avec différentes capacités thermiques sur la distribution de la macroségrégation positive et négative a été étudiée sur une lingotière de 12 tonnes métriques (MT) en acier allié faiblement en Cr-Mo. Le code de modélisation par éléments finis tridimensionnel THERCAST® a été utilisé pour simuler les phénomènes thermomécaniques associés au processus de solidification, depuis le remplissage du moule jusqu'à la solidification complète. Le modèle a été validé sur une lingotière à l'échelle industrielle, puis utilisé pour évaluer l'influence de l'historique thermique de la masselotte, composant crucial de l'installation de la lingotière. Cette évaluation visait à comprendre les changements de temps de solidification, de température et de flux de chaleur, tous contribuant à la détermination de la sévérité de la macroségrégation. Les résultats ont montré que le préchauffage de la masselotte avait un effet mineur sur le temps de solidification, tandis que les modifications de la conductivité thermique dans la région de la masselotte augmentaient le temps de solidification de 31 %, affectant ainsi significativement les schémas de macroségrégation. Les résultats sont discutés et interprétés en termes des mécanismes fondamentaux gouvernant la cinétique de solidification et les phénomènes de macroségrégation.

Mots-clés: masselotte ; modélisation par éléments finis ; coulée de lingot ; macroségrégation ; capacité thermique

4.2 Introduction

La coulée de lingots, suivie du forgeage, est la seule voie disponible pour la production de composants de grande taille en aciers spéciaux, tels que les cylindres de laminoir, les rotors de turbine, les arbres de centrale électrique et les matrices de fromage de métaux (Pola, Gelfi, & La Vecchia, 2016; Yu et al., 2022). La composition de ces aciers se caractérise par un grand nombre d'éléments d'alliage, souvent jusqu'à 10. Ceux-ci fournissent les propriétés mécaniques et de résistance à la corrosion requises. Pendant le processus de solidification du lingot, la chaleur est évacuée du moule et, en raison des différents coefficients de diffusion des différents éléments, des microségrégations et macroségrégations se produisent. Alors que la microségrégation indique la présence d'éléments d'alliage au-dessus de la composition nominale à l'interface des bras de dendrites, la macroségrégation correspond à la distribution hétérogène des éléments d'alliage sur des distances de plusieurs centimètres en largeur et jusqu'à des mètres en longueur. Cette qualité détériore les propriétés mécaniques des produits finis car elle ne peut être éliminée, même après un long traitement thermique d'homogénéisation. Les interactions complexes et le couplage entre les éléments d'alliage, les caractéristiques du moule de coulée (par exemple, les géométries du moule et de la masselotte, les isolations, etc.) et les paramètres de coulée (par exemple, la température de verser, le débit, etc.) entraînent des interactions très complexes. Les expériences à l'échelle du laboratoire ne sont souvent pas représentatives de la réalité industrielle, et les essais empiriques à l'échelle industrielle sont extrêmement coûteux et chronophages. Par conséquent, des approches numériques sont nécessaires pour aborder ces phénomènes physiques complexes qui se produisent tout au long du processus de coulée, permettant une optimisation plus rapide des conditions de coulée ainsi que la quantification des interactions et des influences mutuelles des différents paramètres (Ch Beckermann, 2002; Ghodrati, Baiteche, et al., 2022; Isobe, 2021; Lesoult, 2005; Jun Li et al., 2022; Ludwig et al., 2015; Maduriya & Yadav, 2018; Tveito, Pakanati, M'hamdi, Combeau, & Založník, 2018).

Parmi les différents composants de la configuration de la coulée de lingots, la masselotte est identifiée comme le plus important (Ghodrati, Baiteche, et al., 2022). Cependant, d'autres composants tels que le moule, le matériau réfractaire, le coureur et la trompette impactent également la solidification du lingot. Plus précisément, la géométrie du moule affecte les taux de transfert de chaleur, le refroidissement et les dynamiques d'écoulement pendant la coulée, tandis que la conception du système de coureur influence l'écoulement du métal en fusion, l'uniformité du remplissage du moule et la distribution de la température, ce qui façonne finalement les propriétés du lingot. Comme son nom l'indique, la masselotte est située sur la partie supérieure du moule. Sa structure externe est faite du même matériau que le moule du lingot (c'est-à-dire en fonte), et ses parois intérieures sont revêtues de briques réfractaires, appelées panneaux latéraux. La surface supérieure de la masselotte est couverte par deux couvertures exothermiques, qui sont faites de composés d'Al, de SiO₂ et d'Al₂O₃ produisant une grande quantité de chaleur une fois que la surface des couvertures exothermiques entre en contact avec le métal en fusion. La réaction exothermique principale, dictée par la composition chimique de la couverture exothermique, peut être décrite par une équation chimique spécifique ($2\text{Al} + \text{Fe}_2\text{O}_3 = 2\text{Fe} + \text{Al}_2\text{O}_3 + \text{Q}$) (Hurtuk, 2008; Yadong et al., 2019). La masselotte joue un rôle crucial dans le processus de solidification et influence par conséquent la sensibilité à la macroségrégation du lingot car elle fournit le flux de chaleur au sommet du lingot et alimente continuellement le lingot en métal liquide pendant sa solidification. Ainsi, contrôler l'échange de chaleur et le régime thermique de la masselotte est d'une importance cruciale pour diminuer les défauts de solidification tels que la macroségrégation (Ghodrati, Baiteche, et al., 2022; Ghodrati, Loucif, et al., 2022a; Tashiro et al., 1983).

Les premières recherches sur la conception des masselottes ont été menées dans une étude pionnière par Flemings, qui a proposé des lignes directrices pour atteindre le volume minimal suffisant nécessaire pour alimenter le lingot, déterminé un gradient de température descendant de la masselotte au corps du lingot qui doit être atteint, etc. (M. C. Flemings, 1976; Qian et al., 2015; Scepi et al., 1981). Tashiro et al. (Tashiro et al., 1983) ont étudié expérimentalement et numériquement la condition de conception de la masselotte dans des lingots de 100 MT et 135 MT dans un produit en acier Ni-Cr-Mo-V. Ils ont proposé que la géométrie de la masselotte et

du moule joue un rôle crucial dans la production de grands lingots de haute qualité. Ils ont rapporté que les conditions thermiques de la masselotte avaient un impact moindre que les paramètres géométriques (le rapport du diamètre de la masselotte au diamètre du lingot et le rapport de la hauteur du corps du lingot au diamètre moyen du corps) sur le temps et le taux de solidification du lingot. Ils ont signalé que le type de ségrégation "A" peut se produire lorsque le taux de solidification tombe en dessous de 0.8 mm/min dans la zone interne des lingots en acier Ni-Cr-Mo-V contenant 0.25 % de C. Cependant, l'impact du régime thermique de la masselotte sur la ségrégation positive et négative, le transfert de chaleur et la température dans le lingot n'a pas été rapporté dans leur travail. Les effets de la condition d'isolation de la masselotte dans un lingot d'acier de 6.2 MT avec une concentration nominale de carbone de 1.01 (wt.%) ont été étudiés expérimentalement par Kumar et al. (Kumar et al., Juin 2012). Ils ont rapporté que l'utilisation de matériau isolant exothermique entraîne une réaction chimique, qui augmente le nombre de noyaux. Cela impacte la microstructure, la macroségrégation et l'échange de chaleur dans le moule, dans le lingot adjacent au matériau réfractaire et en dessous de la zone de la masselotte. Ils ont produit des structures de grains globulaires axiaux plus fines et observé une macroségrégation axiale plus significative par rapport au cas où aucun matériau isolant exothermique n'était utilisé dans les parois intérieures de la masselotte. Cependant, l'influence de l'utilisation de différents scénarios pour modifier le régime thermique de la masselotte sur la macroségrégation n'a pas été étudiée. De plus, l'impact du régime thermique de la masselotte sur le transfert de chaleur et la température dans l'ensemble du lingot n'a pas été quantifié. Kermanpur et al. (Kermanpur et al., 2010) ont étudié l'influence de la forme et de la hauteur de l'isolation de la masselotte et du rapport de minceur (hauteur/diamètre moyen du corps du lingot) sur le comportement de la solidification dans un acier bas carbone Cr-Mo de 6 MT; cependant, ils n'ont pas discuté de l'impact des caractéristiques de la masselotte sur l'étendue et la gravité de la macroségrégation.

La présente investigation explore quantitativement comment le régime thermique de la masselotte influence différents éléments, tels que l'étendue et la gravité de la macroségrégation, le temps de solidification, l'évolution de la température et l'échange de chaleur dans l'ensemble du corps du grand lingot. Plus précisément, quatre scénarios différents de capacité thermique

de la masselotte sont étudiés. L'étude de cas porte sur un lingot de 12 MT coulé par le bas en acier à haute résistance utilisé dans les systèmes énergétiques et de transport nécessitant des niveaux très élevés d'homogénéité de la microstructure. Le modèle MEF développé a d'abord été validé expérimentalement sur un lingot de taille industrielle (Ghodrati, Baiteche, et al., 2022) puis utilisé pour évaluer l'impact des quatre scénarios de régime thermique étudiés.

4.3 Matériaux et méthodes

L'acier faiblement allié à teneur moyenne en carbone, dont la composition est fournie dans le Tableau 4.1, a été versé par le bas dans un moule de forme polygonale d'une capacité de 12 MT. Le métal en fusion a été produit dans un four à arc électrique, après quoi le métal en fusion a été nettoyé à l'aide d'un traitement en poche et d'un dégazage sous vide. Ensuite, le métal en fusion a été versé à 1580 °C par le bas dans le moule en fonte pendant 26 minutes.

Figure 4.1a et b montrent les composants du lingot coulé et les dimensions de la masselotte. La partie supérieure des parois latérales de la masselotte était doublée de matériau réfractaire et la surface supérieure de la masselotte était couverte par deux couvertures exothermiques.

Tableau 4.1 Composition chimique nominale de l'acier étudié (wt.%)

C	Mn	P	S	Si	Ni	Cr	Mo	Cu	Fe
0.32	0.57	0.015	0.001	0.27	0.23	1.08	0.34	0.16	Équilibre

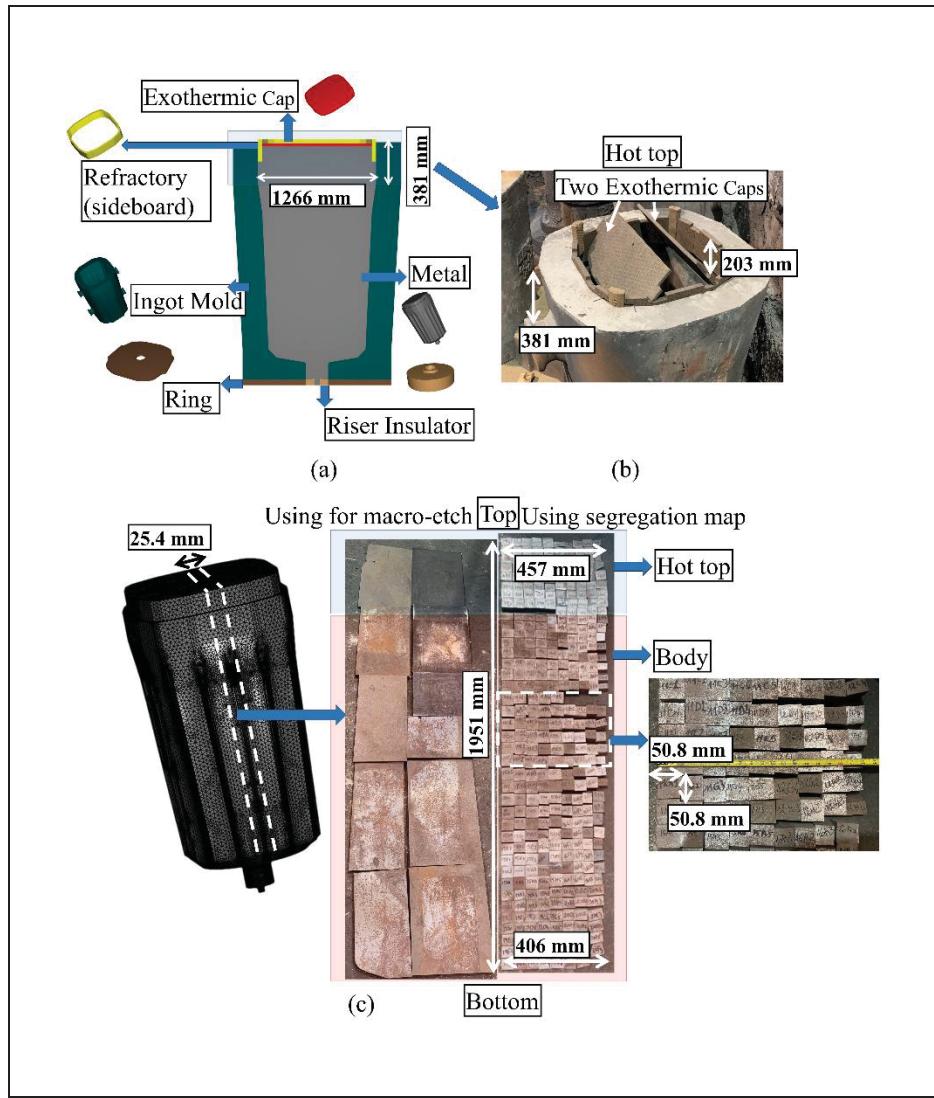


Figure 4.1 (a) La configuration du lingot coulé de 12 MT (modèle à 180°) ; (b) Partie supérieure de la masselotte en industrie ; et (c) L'approche de préparation des échantillons

Après avoir terminé la solidification et refroidi jusqu'à la température ambiante, une tranche de 25.4 mm d'épaisseur du lingot a été coupée depuis le centre dans la direction longitudinale, comme indiqué dans la Figure 4.1c. La tranche a ensuite été coupée le long de sa longueur. Ensuite, une des demi-tranches a été coupée en 370 spécimens qui ont été utilisés pour la cartographie chimique. L'autre demi-tranche a été coupée en 10 plaques qui ont été utilisées pour la macro-attaque. La Figure 4.1c montre schématiquement l'approche utilisée pour la découpe et la préparation des échantillons. L'analyse chimique des échantillons a été réalisée à l'aide d'un spectromètre d'émission optique ARLTM 4460 de Thermo Scientific (Thermo

Fisher Scientific Inc., Waltham, MA, USA), puis les rapports de ségrégation de chaque échantillon ont été calculés à l'aide de l'équation suivante: $R^i = (\omega^i - \omega_0^i) / \omega_0^i$ (Z. Duan et al., 2016; Ghodrati, Baiteche, et al., 2022; Ghodrati, Loucif, et al., 2022a; Chunping Zhang et al., 2018). Ici, R^i est le rapport de ségrégation de l'élément soluté i , ω^i est la concentration locale de soluté, et ω_0^i est sa concentration initiale. Une valeur positive ou négative de R^i représente une ségrégation positive ou négative, respectivement. Ensuite, des motifs de macroségrégation des éléments sur la partie totale de la section longitudinale ont été construits en utilisant MATLAB® version 2012 (MathWorks Inc., Natick, MA, USA) (MATLAB, 2012b). Ces surfaces des 10 autres plaques ont été attaquées chimiquement en utilisant une solution à 50 % HCl - 50 % H₂O à 50 °C pour révéler les motifs de macroségrégation (Ghodrati, Baiteche, et al., 2022).

Cette étude expérimentale a été menée pour obtenir des insights sur l'intensité et l'évolution de la ségrégation pour tous les éléments d'alliage. Il est également important de noter que l'analyse microstructurale n'était pas l'objet principal de ce travail, mais qu'elle avait été précédemment réalisée par notre groupe de recherche et les résultats avaient été publiés (Chunping Zhang et al., 2018). Dans cette étude, la modélisation de la macroségrégation du lingot de 12 MT a été simulée à l'aide du code éléments finis (MEF), THERCAST®. Le modèle établi a été validé par une comparaison des résultats prédictifs et expérimentaux des schémas de distribution chimique des éléments d'alliage. Les détails concernant la validation du modèle FEM ont été présentés dans une publication récente des auteurs de la présente étude (Ghodrati, Baiteche, et al., 2022). Les données de validation sont rapportées dans le Tableau 4.7, Tableau 4.8, Figure 4.14 et Figure 4.15 de l'Appendice II.

4.4 Formulation du modèle de solidification

Une simulation MEF tridimensionnelle du processus de solidification a été réalisée à l'aide du code éléments finis, THERCAST®. Les phénomènes thermomécaniques associés aux différentes phases de remplissage du moule et au processus de refroidissement dans et hors du moule ont été décrits à l'aide d'une formulation arbitraire Lagrangienne-Eulerienne (ALE) basée sur le modèle biphasique à volume moyen (Transvalor, 2017; Wu, Ludwig, & Kharicha,

2019). L'écoulement du fluide, la température et la distribution du soluté dans le matériau en solidification ont été analysés en utilisant les solutions couplées des équations dénotant la conservation de la masse, de la quantité de mouvement, de l'énergie et du soluté, comme indiqué dans le Tableau 4.2. Les équations de transfert de chaleur ont été résolues pour chaque sous-domaine (moule, masselotte, lingot, panneaux latéraux, etc.) en utilisant des conditions aux limites appropriées, comprenant la convection moyenne, le rayonnement, la température imposée externe et le flux de chaleur imposé externe. Une équation de type Fourier a été utilisée pour l'évaluation de la résistance au contact aux interfaces des composants en métal et en moule. Les équations de convection et de rayonnement sont également rapportées dans le Tableau 4.2. Initialement, le calcul thermique a été effectué en utilisant un pas de temps spécifié, qui était basé sur le taux de refroidissement pendant la solidification, suivi du calcul mécanique. Le problème thermique a été traité par la résolution de l'équation de transfert de chaleur (conservation de l'énergie), l'équation de conservation du soluté régissait la redistribution de chaque élément soluté, et l'équation de conservation de la quantité de mouvement régissait l'équilibre mécanique. La détermination des macroségrégations impliquait, en partie, la résolution des équations de conservation de l'énergie et de conservation du soluté pour chaque élément d'alliage. De plus, un modèle de microségrégation a été incorporé dans ces équations, permettant la caractérisation de la distribution non uniforme des éléments chimiques entre les phases solide et liquide. Le modèle de microségrégation utilisé dans cette étude était le modèle Brody-Flemings (Transvalor, 2017; Chunping Zhang, 2020). Le modèle était basé sur un modèle de redistribution du soluté unidimensionnel. Cela suivait un motif parabolique décroissant basé sur une redistribution du soluté unidimensionnelle. Le transfert transitoire du soluté dans le solide, qui se produisait en raison de la diffusion, dépendait du nombre de Fourier sans diffusion α (Tableau 4.2). Dans cette étude, les températures nominales du liquidus et du solidus ont été déterminées à l'aide du logiciel JMatPro® software version 11.0 (Ghodrati, Baiteche, et al., 2022; Transvalor, 2017; Chunping Zhang, 2020), en tenant compte de la composition chimique nominale de l'alliage. Ces valeurs calculées ont servi de paramètres d'entrée pour les simulations, définissant les propriétés de l'alliage. Néanmoins, il était crucial de reconnaître que la température, la fraction liquide et la composition en soluté des éléments de l'alliage n'étaient pas statiques ; elles variaient à chaque

pas de temps pendant le processus de solidification. Ce modèle calculait de manière itérative la composition chimique locale, la fraction liquide locale et la température locale à chaque nœud tout au long de la progression du temps de solidification. La température locale était exprimée en fonction de la composition liquide et de la pente du liquidus (voir le Tableau 4.2). La détermination de la température liquide locale pour chaque nœud a été réalisée en analysant la fraction liquide et la température à la fin du processus de solidification. Dans la phase liquide, des boucles de convection naturelle entraînées par la gravité étaient formées en raison des variations locales de densité. Comme rapporté par Ludwig et al. (Ludwig et al., 2015), Lesoult et al. (Lesoult, 2005), et Beckermann et al. (Ch Beckermann, 2002), de telles variations locales de densité induisaient des boucles de convection naturelle locales dans la phase liquide, entraînées par la gravité. Ces écoulements de convection se composent principalement de deux types: (i) des écoulements de convection thermique, déclenchés par l'expansion thermique et les gradients de température, et (ii) des écoulements de convection solutale, induits par l'expansion solutale et les gradients de concentration (Ch Beckermann, 2002; Lesoult, 2005; Ludwig et al., 2015; Transvalor, 2017). En fait, le métal passe par trois phases distinctes pendant la solidification: l'état liquide, l'état boueux et l'état solide. Un modèle constitutif hybride est ensuite utilisé pour simuler la transition de l'état liquide à l'état boueux, puis à l'état solide (Ghodrati, Baiteche, et al., 2022; Gouttebroze, Fachinotti, Bellet, & Combeau, 2005; Kim et al., 2020; P Patil, Puranik, Balachandran, & Balasubramanian, 2016; Transvalor, 2017; Chunping Zhang, 2020). Le comportement du métal liquide (au-dessus de la température du liquidus) nécessite un traitement thermo-newtonien avec l'équation de Navier-Stokes en utilisant une approche Lagrangienne-Eulerienne arbitraire. En dessous de la température du solidus, une formulation lagrangienne thermo-élasto-viscoplastique est utilisée pour traiter le comportement du métal solide. L'état boueux, une transition entre solide et liquide, est supposé être un fluide non-newtonien à continuum unique et est caractérisé par une soi-disant 'température de cohérence', qui correspond au moment où un squelette solide est formé et soutient les contraintes de solidification (Jaouen, Costes, & Lasne, 2011; Transvalor, 2017; Chunping Zhang, 2020). Au-dessus de la température de cohérence, une loi de type Norton-Hoff est utilisée avec une prolongation newtonienne utilisée lorsque le scénario est au-dessus de la température du liquidus (Bellet, Jaouen, & Poitroult, 2005; Transvalor, 2017; Chunping

Zhang, 2020). En dessous de la température de cohérence, le comportement du matériau est modélisé sur la base de l'approche proposée par Perzyna, qui a supposé que le métal semi-solide avait un comportement constitutif thermo-élasto-viscoplastique (TEVP). Enfin, à l'interface solide-liquide, on suppose un équilibre thermodynamique. Cela rend nécessaire de supposer la continuité de la contrainte d'écoulement à la température de cohérence (c'est-à-dire la cohérence entre le comportement du matériau pour les conditions viscoplastiques et élasto-viscoplastiques). Dans le présent travail, la zone pâteuse est conceptualisée comme un milieu solide poreux isotrope saturé de liquide et caractérisé par la condition $f_s + f_l = 1$, où f_s et f_l représentent respectivement les fractions volumiques de solide et de liquide. Les composantes de la perméabilité dépendent du modèle qui établit la connexion entre les équations macroscopiques et les effets microscopiques. La perméabilité isotrope (K_{perm}) est définie en utilisant l'analyse de Carman-Kozeny (Transvalor, 2017; Chunping Zhang, 2020) (Tableau 4.2), qui dépend de la valeur de l'espacement secondaire des bras (SDAS) et de la fraction liquide locale. Il convient également de noter que, dans l'équation de Carman-Kozeny, l'hypothèse est faite qu'une fraction liquide est toujours présente, correspondant à une valeur de K_{perm} qui est un nombre réel. Lorsque la fraction liquide est nulle et que le matériau est complètement solidifié, sa perméabilité est négligeable ou nulle, ce qui indique qu'il n'y a pas d'écoulement de fluide à travers le matériau solide. À mesure que la solidification progresse, l'épaisseur de la zone pâteuse évolue en fonction de l'interaction entre divers facteurs tels que les conditions thermiques et la cinétique de solidification. L'épaisseur de la zone pâteuse est calculée à chaque pas de temps en fonction du calcul de la fraction volumique des liquides et des solides, de la température, de la composition en soluté et du temps local de solidification. À la suite de la simulation de la conception initiale, la largeur de la région pâteuse a été calculée dans la direction radiale aux positions inférieure, moyenne et supérieure du lingot dans le modèle à 90°. La Figure 4.2 illustre l'épaisseur moyenne de la zone pâteuse à différents moments de solidification. Les largeurs moyennes de la zone pâteuse ont été déterminées à 48 mm, 83 mm, 112 mm, 117 mm et 45 mm à la fin du remplissage, 1 heure après le versement, 2 heures après le versement, 3 heures après le versement et 4 heures après le versement, respectivement (Figure 4.2). Comme le montre la Figure 4.2, l'épaisseur de la zone pâteuse varie de manière dynamique pendant la solidification. Initialement, à la fin du remplissage, la

zone pâteuse est plus mince en raison du taux de refroidissement plus élevé et de la solidification plus rapide. À mesure que le processus de solidification progresse de 1 heure à 3 heures après le versement, le taux de solidification diminue et la zone pâteuse devient plus épaisse. Après 3 heures, l'épaisseur de la zone pâteuse diminue alors que la chaleur est continuellement extraite du métal en fusion, provoquant le rétrécissement de la zone pâteuse à mesure que plus de matériau se solidifie. Le modèle a la capacité de prédire la formation de cavités de rétraction. Cette prédiction est basée sur l'analyse de la variation de la fraction liquide dans les zones liquide et pâteuse. Le principe sous-jacent de cette estimation implique le calcul de la perte de volume de métal encourue lors de chaque incrément de simulation. Cette perte de volume est attribuée à la fois à la contraction thermique et à la transition de l'état liquide à l'état solide. La distribution de cette perte de volume est déterminée par la progression du front de solidification (Transvalor, 2017; Chunping Zhang, 2020; X. Zhao, Zhang, Lei, & Wang, 2014).

Tableau 4.2 Équations du modèle de solidification

Nom	Équations de conservation	Référence
Énergie	$\rho \frac{\partial H}{\partial T} \frac{dT}{dt} - \nabla \cdot (\lambda(T) \nabla T) = 0$ $\frac{\partial H}{\partial T} = C_p(T) + L_f \frac{\partial f_l(T)}{\partial T}$	(Transvalor, 2017; Chunping Zhang, 2020)
Modèle de Brody-Flemings	$\omega_s = k \omega_0 \{1 - (1 - 2\alpha k) f_s\}^{(k-1)/(1-2\alpha k)}$	(Transvalor, 2017; Chunping Zhang, 2020)
	$f_s = \left[\frac{1}{(1 - 2\alpha k)} \right] \left\{ 1 - \left[(T_f - T) / (T_f - T_l) \right]^{(1-2\alpha k)/(k-1)} \right\}$	(Transvalor, 2017; Chunping Zhang, 2020)
Formule de Carman-Kozeny	$K_{perm} = \frac{d_2^2 f_l^3}{180(1 - f_l)^2}$	(Transvalor, 2017; Chunping Zhang, 2020)
Conservation du soluté	$\frac{\partial \omega^i}{\partial t} + \nu \cdot \nabla \omega_l^i - \nabla \cdot (f_l D_l^i \nabla \omega_l^i) = 0$	(Transvalor, 2017; Chunping Zhang, 2020)

Nom	Équations de conservation	Référence
Momentum	$\nabla \cdot s - \nabla p + \rho g = \rho \frac{dv}{dt}$	(Transvalor, 2017; Chunping Zhang, 2020)
Terme de flottabilité (buoyancy) de l'équation de la quantité de mouvement	$\rho_l = \rho_0 \left(1 - \beta_T (T - T_{ref}) - \sum_{i=1}^n \beta_i (\omega_l^i - \omega_0^i) \right)$	(Transvalor, 2017; Chunping Zhang, 2020)
Température locale	$T = T_m + \sum_{i=1}^N m_l^i \omega_l^i$	(Transvalor, 2017; Chunping Zhang, 2020)
Navier-Stokes	$\bar{\sigma} = \eta_l(T) \sqrt{3}^2 \dot{\varepsilon}$	(Transvalor, 2017; Chunping Zhang, 2020)
Loi II de Kozlowski	$\bar{\sigma} = K_s(T) \bar{\varepsilon}^{n(T)} \dot{\varepsilon}^{m(T)}$	(Transvalor, 2017; Chunping Zhang, 2020)
Loi de Norton-Hoff	$\bar{\sigma} = K^{vp}(T) \sqrt{3}^{m(T)+1} \dot{\varepsilon}^{m(T)}$	(Transvalor, 2017; Chunping Zhang, 2020)
Loi de Perzyna	$\bar{\sigma} = \sigma_s + K^{evp}(T) \sqrt{3}^{m+1} \bar{\varepsilon}^n \dot{\varepsilon}^m$	(Transvalor, 2017; Chunping Zhang, 2020)
Convection et rayonnement	$q = -\lambda \nabla T \cdot n = h(T - T_{ext})$ $h = h_{cv} + \varepsilon_r \sigma_r (T + T_{ext}) (T^2 + T_{ext}^2)$	(Transvalor, 2017; Chunping Zhang, 2020)
Transfert de chaleur aux interfaces entre les composants métal/moule	$-\lambda \Delta T n = \frac{1}{R_{eq}} (T - T_{mold})$ $R_{eq} = \frac{1}{\min(\frac{1}{R_0}, \frac{1}{R_{air}}, \frac{1}{R_{rad}})} + R_s \text{ if } e_{air} > 0$	(Transvalor, 2017; Chunping Zhang, 2020)

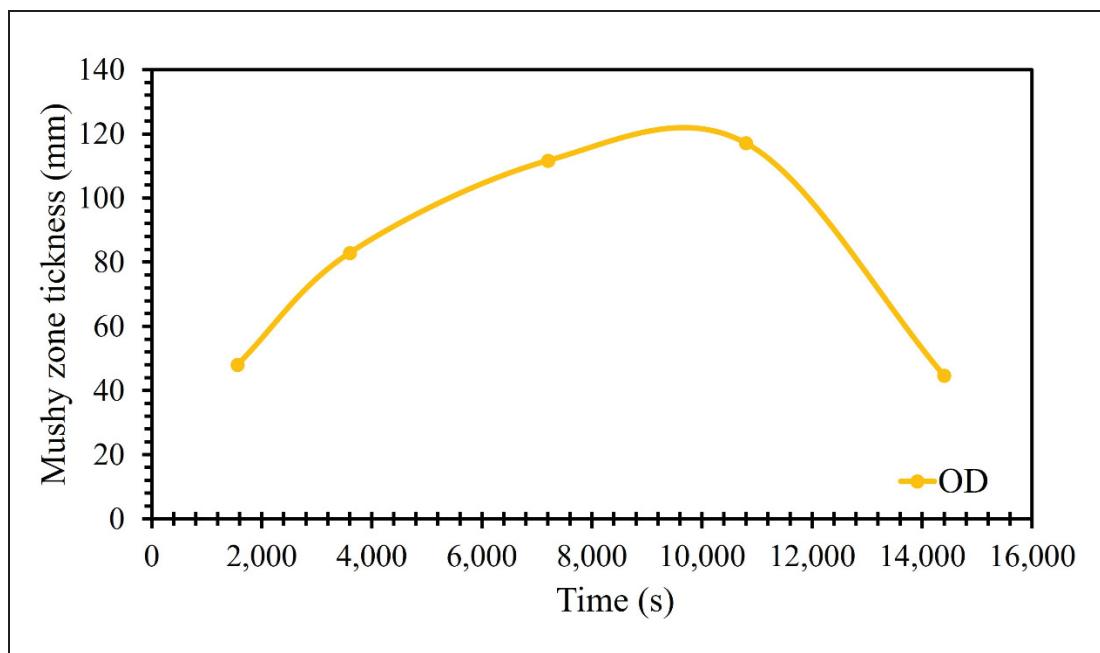


Figure 4.2 La largeur de la zone pâteuse dans la conception initiale pendant la solidification

Pour étayer la précision des calculs numériques, une évaluation de l'équilibre de concentration des éléments a été réalisée à différents pas de temps suivant la solidification. La présentation du bilan de masse pendant la simulation impliquait le calcul de la somme cumulative des concentrations locales et nominales pour tous les éléments au nœud total après la période de simulation. Les résultats, en particulier ceux concernant l'équilibre de concentration pour le chrome (Cr), le manganèse (Mn) et le molybdène (Mo), sont systématiquement présentés dans le Tableau 4.3. De plus, la Figure 4.3 illustre graphiquement l'évolution temporelle de la concentration en carbone (C) pendant le processus de solidification à l'emplacement indiqué par un cercle rouge. Comme le montre la Figure 4.3, le liquide chaud atteint l'emplacement indiqué dans le lingot environ 1000 secondes après le versement. À partir de ce moment, des fluctuations de la concentration des atomes de carbone sont observées jusqu'à environ 14,000 secondes après le versement. À ce stade, la courbe représentant la concentration en carbone se stabilise, ce qui indique la solidification complète du liquide. Le front solide atteint un point spécifique (comme indiqué dans la Figure 4.3) à 5800 s secondes après le versement, coïncidant avec la température locale atteignant la température locale de liquidus. Après ce point, la solidification débute. La concentration en carbone au point indiqué (Figure 4.3) est

influencée par l'interaction complexe entre la cinétique de solidification, les phénomènes de ségrégation et la dynamique de l'écoulement du fluide dans le métal en fusion. L'écoulement du fluide dans le métal en fusion pendant la solidification, tel que la convection naturelle ou le mélange turbulent, peut influencer la distribution des éléments de soluté. Les variations dans les schémas d'écoulement du fluide peuvent entraîner un mélange non uniforme du carbone dans tout le lingot, contribuant aux différences de concentration en carbone au niveau du point indiqué. De plus, dans l'état pâteux, l'épaisseur augmente à mesure que le taux de refroidissement ralentit. Selon la Figure 4.2, elle commence ensuite à diminuer. Dans l'état pâteux, en raison du mouvement du liquide interdendritique dans la zone pâteuse, du transfert de soluté et de la diffusion des éléments de soluté à l'état solide à chaque pas de temps, il existe une distribution non uniforme des atomes de carbone entre les phases solide et liquide, entraînant des fluctuations de concentration en carbone.

Tableau 4.3 Somme cumulative des concentrations élémentaires dans les nœuds totaux après la solidification

Éléments	La somme de la concentration nominale (wt.%) dans tous les nœuds	La somme de la concentration locale (wt.%) dans tous les nœuds
Cr	45,555.62	45,440.51
Mn	24,496.89	24,343.84
Mo	14,612.18	14,492.20

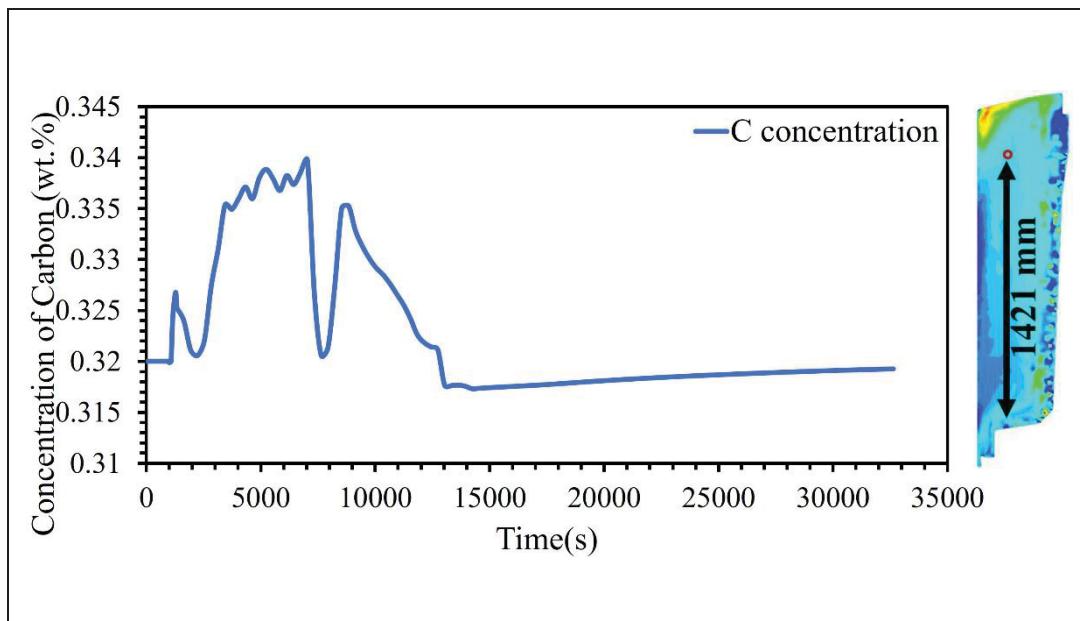


Figure 4.3 Évolution de la concentration en carbone pendant la solidification à l'emplacement indiqué par un cercle rouge

4.5 Conditions limites et paramètres d'entrée

Dans cette étude, un quart de la géométrie autour de l'axe vertical a été utilisé pour effectuer des simulations basées sur la symétrie du lingot. Le matériau utilisé dans cette étude était de l'acier au carbone moyen AISI 4130 de qualité faiblement alliée. Les propriétés thermo-physiques dépendant de la température telles que la densité, la chaleur spécifique et les températures de solidus et de liquidus ont été calculées à l'aide du logiciel d'analyse des matériaux JMatPro®, version 11.0 (Sente.Software.Ltd, 2005). Les équations de transfert de chaleur sont résolues pour chaque sous-domaine avec des conditions aux limites appropriées. Les conditions aux limites pour l'assemblage du lingot comprennent ce qui suit : (i) isolation à la surface libre de la couverture exothermique, (ii) isolation au niveau de la masselotte et du puits, (iii) convection et rayonnement au niveau de la paroi externe du moule, (iv) convection et rayonnement initiaux après la formation de l'espace d'air, suivis de la résistance au contact entre le métal solide et la paroi du moule, et (v) résistance au contact entre les composants du moule. Les conditions aux limites thermiques sont indiquées dans le Tableau 4.4.

Tableau 4.4 Conditions aux limites thermiques(TherCast2.1®, 2021)

Conditions aux limites thermiques		
1	Coefficient de transfert de chaleur entre métal/moule	$h = 5 \times 10^3 \text{ W/m}^2\cdot\text{K}$
2	Coefficient de transfert de chaleur entre moule en fonte/extérieur	$h_{cv} = 12 \text{ W/m}^2\cdot\text{K}$ $T_{ext} = 20^\circ\text{C}$
3	Coefficient de transfert de chaleur entre métal/réfractaire et métal/riser	$h = 1 \times 10^2 \text{ W/m}^2\cdot\text{K}$
4	Résistance thermique à l'interface entre métal/couverture	$R = 1 \times 10^{-5} \text{ m}^2\cdot\text{K/W}$
5	Résistance thermique entre composants du moule	$R = 1 \times 10^{-6} \text{ m}^2\cdot\text{K/W}$
6	Résistance thermique entre moule/réfractaire et moule/riser	$R = 1 \times 10^{-2} \text{ m}^2\cdot\text{K/W}$
7	Émissivité	0.8
8	Conductivité thermique du moule	30 W/(m.K)
9	Conductivité thermique de l'isolant du riser	0.45 W/(m.K)

4.6 Conceptions de masselotte

Quatre conceptions différentes de masselottes (Tableau 4.5), étiquetées ND1 à ND4, ont été étudiées en fonction de la variation du régime thermique de la masselotte par rapport à la conception originale, désignée OD. La conception originale est caractérisée par un panneau latéral partiel (réfractaire) qui couvre la partie supérieure de la masselotte avec une conductivité thermique de 1.23 W/(m.K) (Figure 4.4a). Les principales caractéristiques de chacune des nouvelles conceptions par rapport à l'original peuvent être résumées comme suit : dans ND1, la masselotte est préchauffée à 200 °C (Figure 4.4b); dans ND2 illustré à la Figure 4.4c, le type de matériau réfractaire est changé pour réduire la conductivité thermique du matériau du panneau latéral à 0.45 W/(m.K); et pour ND3 et ND4 (Figure 4.4d et Figure 4.4e, respectivement), un panneau latéral supplémentaire (réfractaire supplémentaire) d'une hauteur de 177 mm et d'une conductivité thermique de 1.23 W/(m.K) est ajouté à l'intérieur de la masselotte. Le nouveau panneau latéral est placé en dessous du panneau latéral précédent.

Cependant, pour ND4, le type de réfractaire supérieur est changé et la conductivité thermique est réduite à 0.45 W/(m.K).

Figure 4.4 illustre la version originale et les quatre nouvelles conceptions proposées.

Tableau 4.5 Specifications de la masselotte dans différentes conceptions

Désignations	Symbol	Hauteur du panneau latéral	Conductivité thermique
Conception originale	OD	203 mm	1.23 W/(m.K)
Préchauffage dans la masselotte jusqu'à 200 °C	ND1	203 mm	1.23 W/(m.K)
Changement du matériau réfractaire	ND2	203 mm	0.45 W/(m.K)
Insertion d'un panneau latéral supplémentaire avec le même matériau	ND3	Haut: 203 mm	Haut: 1.23 W/(m.K)
		Bas: 177 mm	Bas: 1.23 W/(m.K)
Insertion d'un panneau latéral supplémentaire et changement du matériau réfractaire initial	ND4	Haut: 203 mm	Haut: 0.45 W/(m.K)
		Bas: 177 mm	Bas: 1.23 W/(m.K)

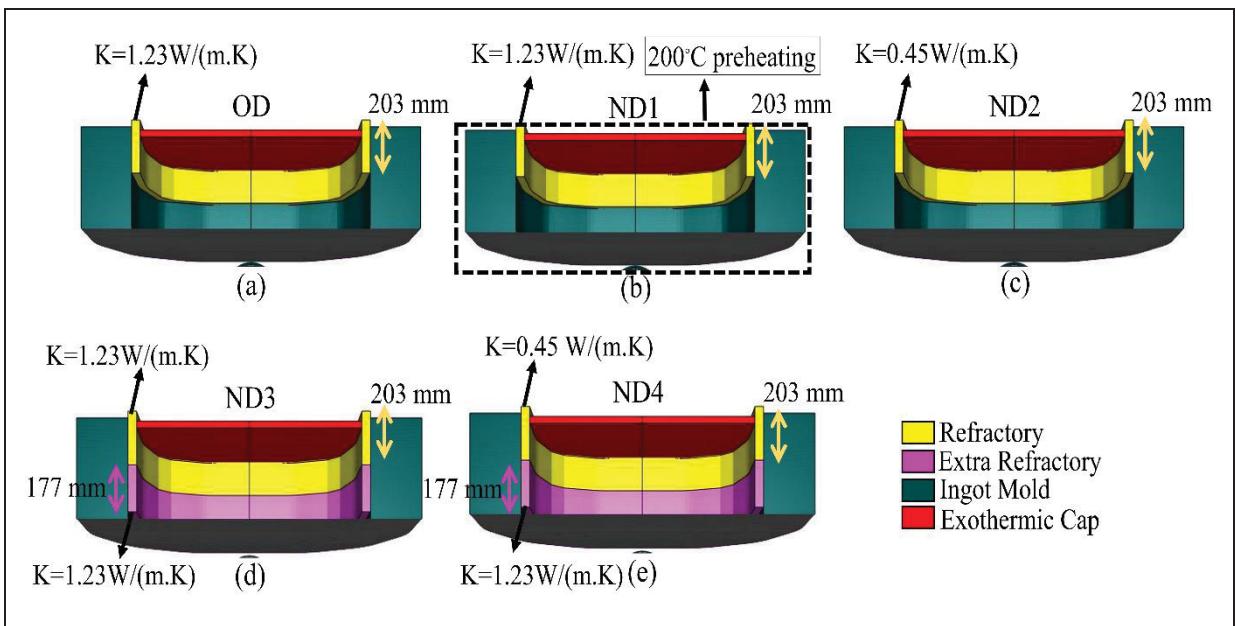


Figure 4.4 (a) Conception originale : OD, (b) ND1, (c) ND2, (d) ND3, et (e) ND4

4.7 Résultats et discussions

Dans cette section, nous explorons l'impact profond des changements dans le régime thermique de la masselotte sur des paramètres cruciaux de solidification, couvrant le temps de solidification (Section 4.7.1), la température et l'échange thermique (Section 4.7.2). Le champ thermique régit le processus de solidification (Lesoult, 2005; Ludwig et al., 2015; Chunping Zhang, 2020), et l'interaction des gradients de température, des écoulements de fluides et de la redistribution des solutés contribue à la formation de zones macro-ségréguées dans les pièces coulées ou les structures métalliques solidifiées (Lesoult, 2005; Ludwig et al., 2015; Chunping Zhang, 2020). Ainsi, une compréhension complète des variations du temps de solidification, du gradient de température et du flux de chaleur à l'intérieur du corps du lingot, résultant des modifications du régime thermique de la masselotte, est impérative. En conclusion, la section suivante, Section 4.7.3, rend compte des variations observées en termes de macroségrégation. Comprendre et contrôler ces facteurs est crucial dans la production de pièces coulées de haute qualité et homogènes.

4.7.1 Temps de solidification

Si le temps de solidification, qui est un paramètre crucial dans la coulée des lingots, est trop court, il y aura une alimentation insuffisante vers la partie centrale du lingot et une porosité accrue ; inversement, un temps de solidification plus long aggrave les niveaux de ségrégation (Qian et al., 2015). Il est crucial de comprendre comment le temps de solidification varie avec les changements dans la conception de la masselotte (Abootorabi, Korojy, & Jabbareh, 2020; Kermanpur et al., 2010; Qian et al., 2015).

Figure 4.5 illustre le temps total de solidification du côté gauche et le temps de solidification local du côté droit, montrant à la fois la conception originale et les nouvelles conceptions de la masselotte. Dans cette étude, le temps total de solidification fait référence au temps local nécessaire pour atteindre la température de solidus à partir de la température initiale à un endroit spécifique à l'intérieur du métal. D'autre part, le temps de solidification local représente la durée écoulée entre l'atteinte des températures de liquidus et de solidus à l'intérieur de la zone pâteuse (Transvalor, 2017). La Figure 4.5 présente les résultats de la simulation obtenus à la fin de la solidification et révèle que le temps total de solidification est très sensible aux variations du régime thermique de la masselotte. De plus, la Figure 4.5 illustre que la quantité et la progression du temps de solidification local changent notablement, notamment dans les cas de ND3 et ND4. Comme le montrent les résultats, une partie significative du temps total de solidification est consacrée à l'état pâteux, et le temps de solidification local augmente avec l'avancement des processus de solidification totale. Le temps de solidification local est corrélé au degré de microségrégation trouvé à l'intérieur d'un cristal en croissance. Lorsque le temps de solidification local augmente, cela a un impact double, induisant une augmentation du temps de diffusion des éléments de soluté à l'état solide et une augmentation de la valeur de l'espacement des bras de dendrite.

Figure 4.6 montre les différences de temps total de solidification en pourcentage pour chacune des conceptions par rapport à la conception originale. Le simple préchauffage de la masselotte jusqu'à 200 °C ou l'utilisation d'un matériau réfractaire avec une conductivité thermique plus

faible ($0.45 \text{ W}/(\text{m.K})$) entraîne une augmentation moins importante du temps total de solidification que lorsque la masselotte est entièrement recouverte de matériau réfractaire.

Figure 4.5d, e illustre également comment le profil du temps total de solidification a changé dans la masselotte et la partie centrale de la lingotière. Il convient de noter que le profil du temps de solidification local a considérablement changé sur presque toute la lingotière. L'augmentation du temps total de solidification de chaque nouvelle conception par rapport à la OD dans les régions centrales et de la masselotte (du contour rouge au contour vert) est montrée dans la Figure 4.7. La plus grande augmentation du temps total de solidification a été observée dans les profils rouges, verts et jaunes, respectivement, tant pour la masselotte que pour la ligne centrale. Ainsi, le métal liquide placé dans la région de la masselotte (en particulier dans ND3 et ND4) est resté dans un état liquide et pâteux pendant un temps plus long, ce qui a entraîné un apport de liquide plus important de la masselotte vers les parties centrales du lingot. Le profil de solidification a été modifié en raison d'un taux de solidification plus faible, en particulier dans la ligne centrale et la masselotte. Les résultats de la Figure 4.7 montrent que les variations dans le régime thermique de la masselotte ont créé une tendance uniforme à augmenter le temps total de solidification par rapport à l'OD. La variation en termes d'échange de chaleur dans le métal en fusion avec le front solide a été la source de changements dans le temps de solidification. La Figure 4.8 montre le flux de chaleur à la fin de la solidification dans la direction radiale du centre à la surface à une hauteur de 1679 mm et 820 mm du bas du lingot (dans la masselotte et au milieu du lingot, respectivement). Comme indiqué dans la Figure 4.8a, en général, ND3 et ND4 montrent un flux de chaleur moins important par rapport à OD. Par exemple, à une distance de 140 mm du centre vers la paroi dans la direction radiale (de $r = 140 \text{ mm}$ à $r = 480 \text{ mm}$), cette réduction était de jusqu'à $11,319 \text{ W}/\text{m}^2$ et $10,650 \text{ W}/\text{m}^2$ pour ND3 et ND4, respectivement, par rapport à OD. De plus, une augmentation du flux de chaleur à $3338 \text{ W}/\text{m}^2$ et $3912 \text{ W}/\text{m}^2$ pour ND3 et ND4 a été observée, respectivement, par rapport à OD dans une direction radiale jusqu'à 140 mm du centre (de $r = 0$ (centre) à $r = 140 \text{ mm}$). Cependant, la direction des vecteurs de flux de chaleur était dirigée vers la partie centrale inférieure du lingot. Par conséquent, l'extension du temps total de solidification dans la zone de la masselotte et la partie centrale du lingot s'est produite en raison du taux de transfert de

chaleur plus faible. Le métal est resté dans l'état liquide ou pâteux pendant plus longtemps, ce qui a entraîné une alimentation continue en métal liquide depuis la masselotte vers le centre pendant une période prolongée en raison d'une augmentation du régime thermique (capacité thermique) de la masselotte. La réduction de la ségrégation positive, observée dans la région de la masselotte et dans la moitié supérieure du lingot comme présenté dans la section 4.7.3, coïncidait avec des variations à la fois dans les temps de solidification total et local, en particulier dans les zones mentionnées, comme le montrent les données de la Figure 4.5. De plus, comme illustré dans la Figure 4.8a, il y avait une diminution notable du flux de chaleur d'environ 140 mm du centre vers la paroi dans la direction radiale. C'était particulièrement visible dans les configurations ND3 et ND4. Cette réduction du flux de chaleur, qui a prolongé le temps de solidification local, semblait être corrélée avec les régions présentant une ségrégation positive réduite. La tendance à la baisse de la ségrégation positive pourrait être attribuée au temps de solidification local plus long, en particulier le long de la paroi latérale du lingot. Le temps de séjour prolongé à l'état pâteux a permis une diffusion accrue des éléments de soluté dans la phase solide, entraînant une microségrégation réduite entre les espacements des bras des dendrites. De plus, dans les stades ultérieurs de la solidification, lorsque la région de la ligne centrale de la masselotte se solidifiait, une augmentation du temps de solidification local a conduit à une plus grande ségrégation en raison de l'augmentation des espaces des bras des dendrites des grains équiaxes et du grossissement des grains équiaxes.

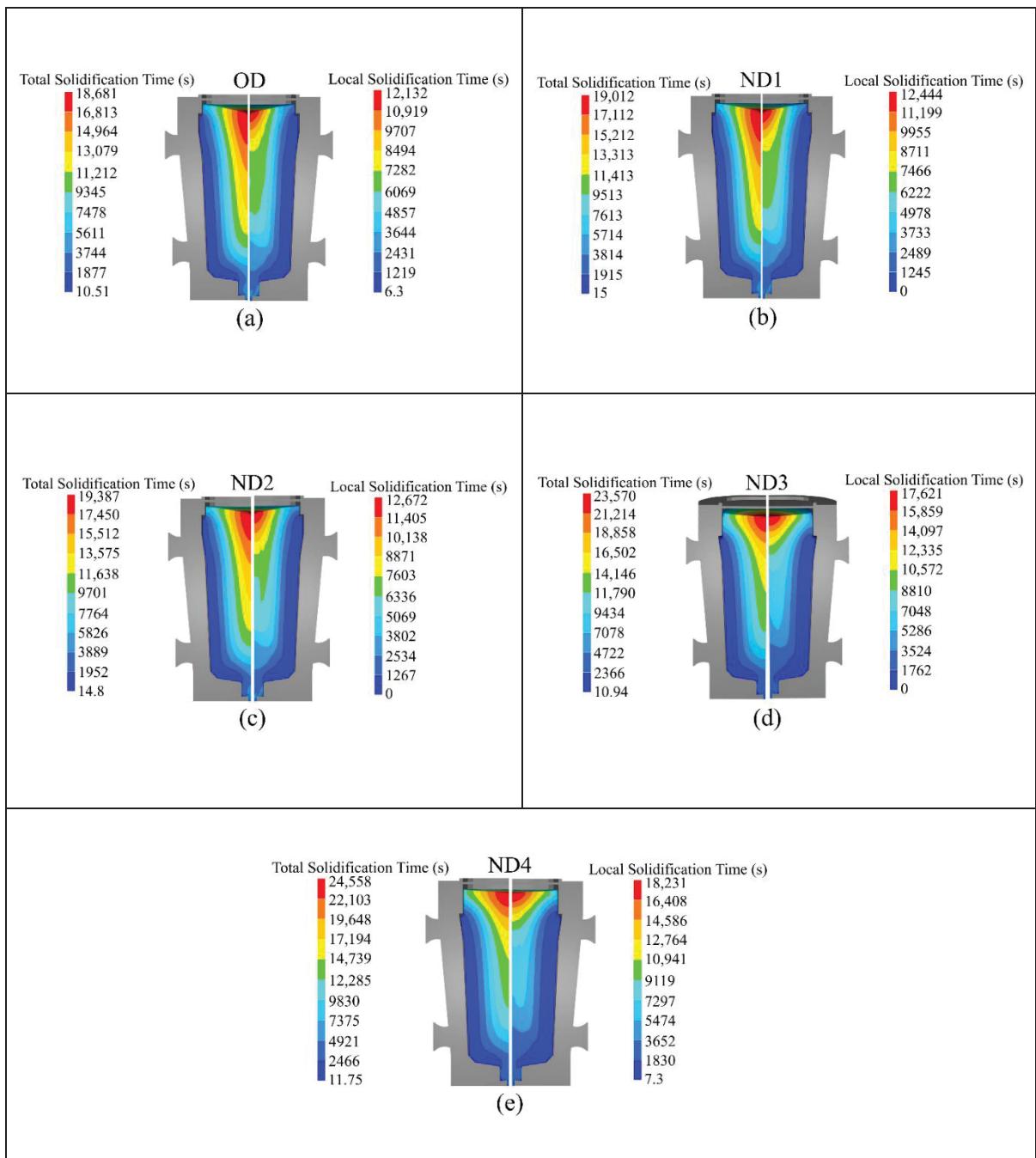


Figure 4.5 Le temps total de solidification est indiqué du côté gauche et le temps local de solidification du côté droit. (a) OD, (b) ND1, (c) ND2, (d) ND3 et (e) ND4

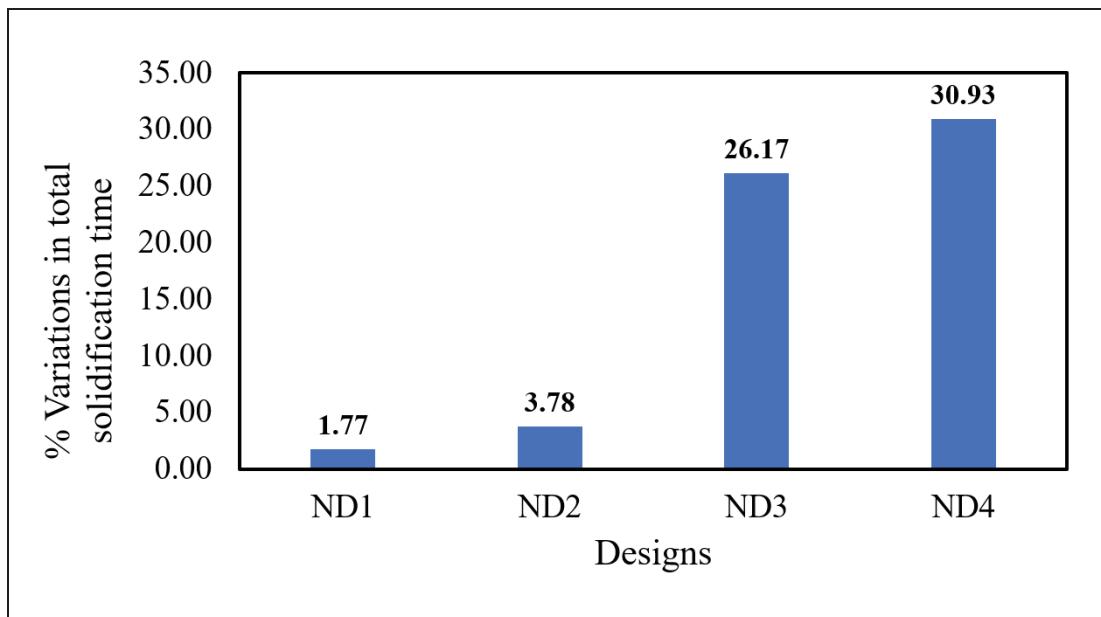


Figure 4.6 Différences en pourcentage du temps total de solidification pour chaque conception par rapport à la conception originale

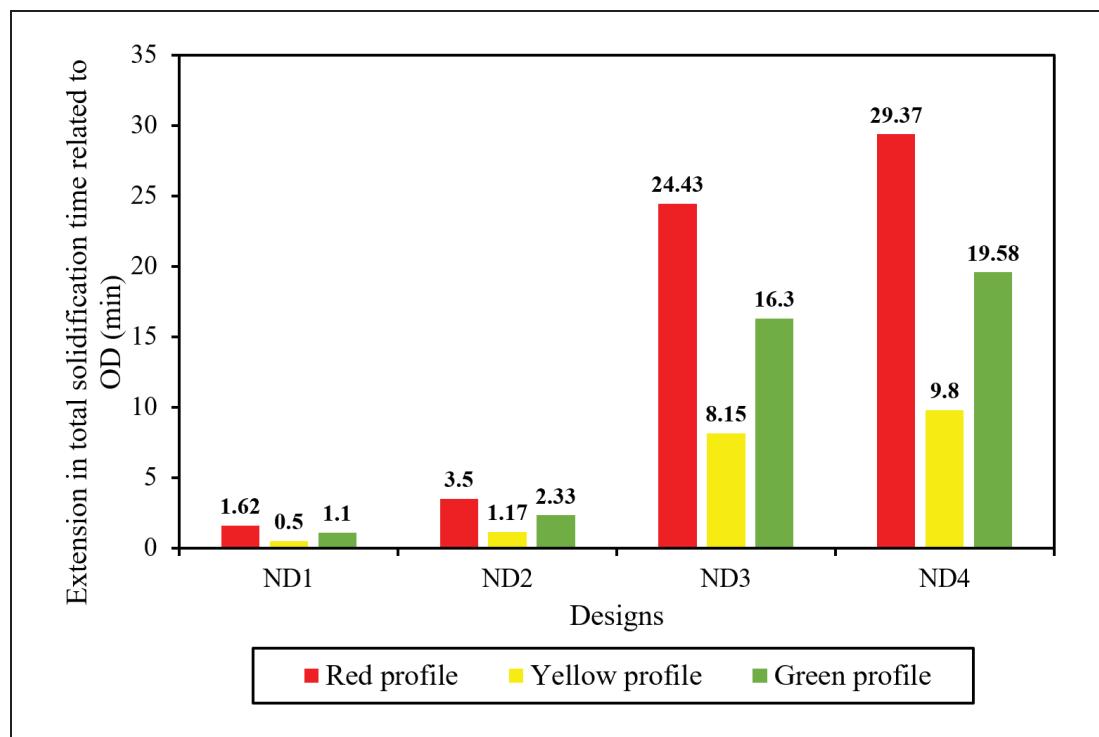


Figure 4.7 L'extension du temps total de solidification par rapport à OD dans les zones centrale et supérieure (contours rouges, jaunes et verts dans la Figure 4.5) pour chacune des conceptions

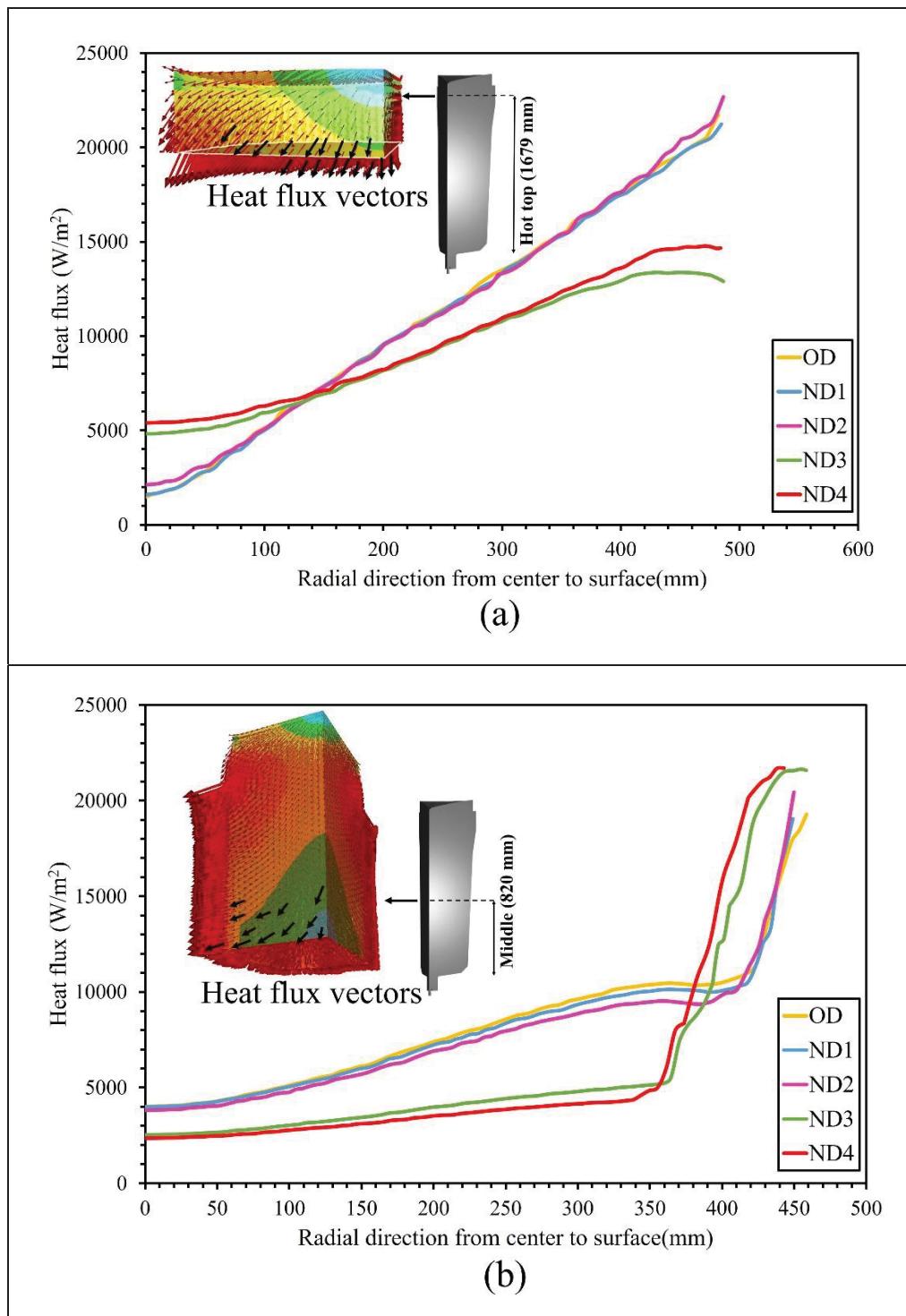


Figure 4.8 Le flux de chaleur dans la direction radiale du centre vers la surface (a) À une hauteur de 1679 mm à partir du bas du lingot et (b) À une hauteur de 820 mm à partir du bas du lingot

4.7.2 Température

Comprendre comment le régime thermique de la masselotte affecte le comportement de la température à travers les différentes parties du corps du lingot est crucial, car le flux de chaleur dépend du gradient de température pendant la solidification (Ge, Ren, Cai, et al., 2018; Malinowski, Telejko, & Hadała, 2012; Prafull Patil et al., 2017). Par conséquent, la température locale de chaque nœud pendant la solidification, depuis l'étape de remplissage jusqu'à la fin de la solidification, a été calculée dans la direction radiale à diverses positions, y compris le bas, le milieu, le haut, l'interface entre la masselotte et le corps, et la zone de la masselotte. Ces calculs ont été effectués pour chaque conception à des hauteurs spécifiques, à savoir 253 mm, 790 mm, 1351 mm, 1612 mm, 1708 mm et 1808 mm, respectivement. Les valeurs obtenues ont été comparées à celles de l'OD pour estimer la différence de température entre l'OD et les nouvelles conceptions. Les différences de température maximales entre l'OD et ND1, ND2, ND3 et ND4 sont rapportées dans la Figure 4.9. Les résultats révèlent un comportement similaire en ce qui concerne la valeur maximale de variation de température dans les positions mentionnées ci-dessus pour chacune des conceptions. Une tendance à l'augmentation a été observée dans la valeur maximale des différences de température du bas vers la zone de la masselotte dans chacune des nouvelles conceptions par rapport à l'OD. Les valeurs les plus élevées de différence de température ont été observées au niveau de la masselotte, de l'interface entre la masselotte et le corps, et du sommet du lingot. Dans ND1, ND2, ND3 et ND4, la masselotte pouvait maintenir le métal liquide à des températures plus élevées allant jusqu'à 37 °C (310.15 °K), 68 °C (341.15 °K), 264 °C (537.15 °K), et 306 °C (579.15 °K) respectivement. On peut dire que les modifications des conditions d'extraction de chaleur produites par les nouvelles conceptions ont impacté la température locale du liquide. Ces observations sont en accord avec celles rapportées par d'autres auteurs. Plus précisément, comme l'ont noté Maduriya et al. (Maduriya & Yadav, 2018) , l'évolution de la température indique l'efficacité du transfert de chaleur à travers les différentes interfaces du lingot pendant la solidification. De plus, Patil et al. (P. Patil et al., 2015) ont rapporté que le profil de température pouvait être utilisé de manière fiable comme mesure du transfert de chaleur pendant la solidification.

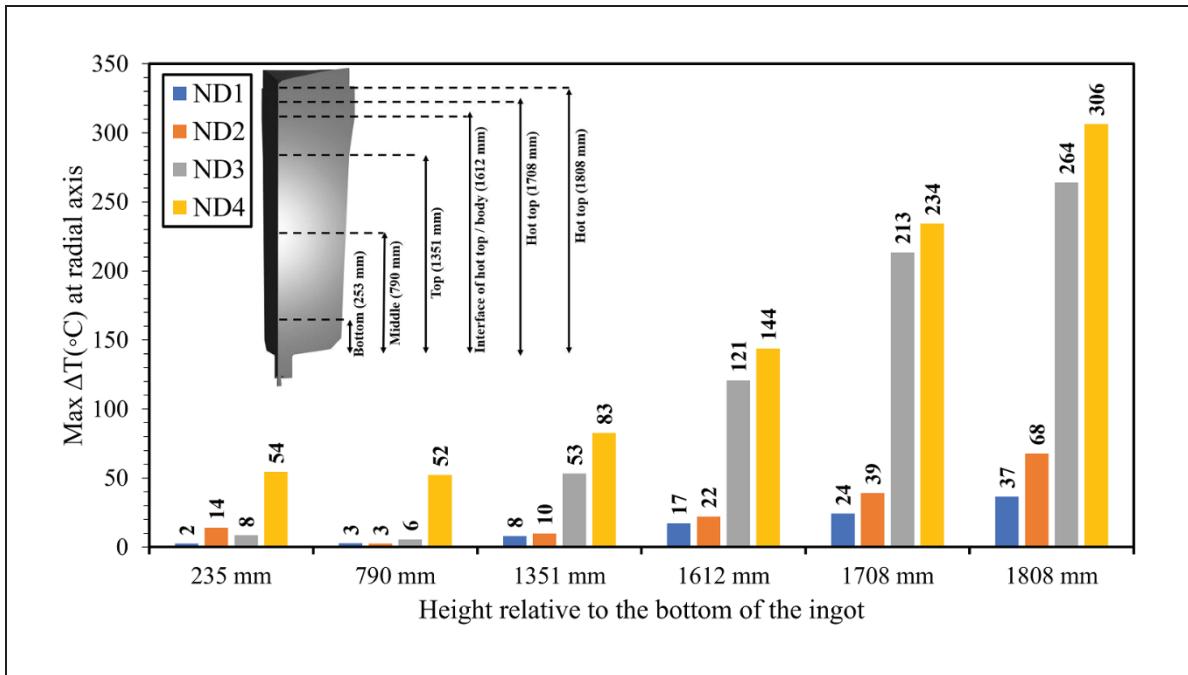


Figure 4.9 La valeur maximale de la différence de température dans la direction radiale pour chacun des designs par rapport à la OD au fond, au milieu, en haut, à l'interface de la masselotte et du corps, et à la masselotte

Pour analyser l'impact du régime thermique de la masselotte sur les profils de température, la distribution de la température et le flux de chaleur ont été examinés à la fin de la solidification. La Figure 4.10 montre le profil de température (côté droit) et le motif de flux de chaleur (côté gauche) pour chacun des designs considérés. Lorsque le régime thermique de la masselotte augmente, il y a une augmentation de la taille des domaines de contour de la plage de température du bas du corps de la lingotière vers la zone de la masselotte, avec une baisse de température plus faible dans le contour plus large. Les résultats (Figure 4.10 et Figure 4.11) révèlent que la variation de la capacité thermique de la masselotte modifie le motif du flux de chaleur sur l'ensemble du corps de la lingotière et de la masselotte. La distribution des contours du flux de chaleur change significativement lorsque le régime thermique de la masselotte change, en particulier dans les designs ND3 et ND4 (centre et sommet du corps de la lingotière). Le motif du flux de chaleur a changé dans les zones proches du mur de la masselotte et du centre du corps du lingot dans ND1 et ND2 par rapport à OD. L'amplitude du transfert de chaleur a beaucoup changé dans la zone de la masselotte et du corps de la lingotière lorsque

la masselotte était entièrement recouverte de matériau réfractaire. La réduction maximale de l'amplitude du flux de chaleur dans la direction radiale à une hauteur de masselotte de 1808 mm à partir du bas du lingot (Figure 4.11d) par rapport à OD a été estimée à $20,185 \text{ W/m}^2$ et $18,440 \text{ W/m}^2$ dans ND3 et ND4, respectivement. Ces valeurs étaient de 8540 W/m^2 et 6294 W/m^2 dans ND3 et ND4, respectivement, à une hauteur de 253 mm à partir du bas du lingot (Figure 4.11a). Ainsi, c'est principalement la hauteur du panneau latéral et la conductivité thermique du panneau latéral qui influent significativement sur l'évolution de la température et le transfert de chaleur. Les Figure 4.11b-d représentent l'évolution du flux de chaleur depuis la paroi du lingot jusqu'à une distance d'environ 200 mm du centre du lingot dans les configurations ND3 et ND4, ces arrangements montrant des valeurs plus faibles par rapport aux autres configurations. Cependant, cette tendance est inversée à proximité du centre. Selon les résultats rapportés dans les Figure 4.9 et Figure 4.10, la diminution de la température est moins prononcée dans les nouvelles configurations, en particulier dans ND3 et ND4, par rapport à la conception originale (OD). Les variations des conditions thermiques au sein du lingot, attribuables au régime thermique de la masselotte, ont un impact significatif sur la macroségrégation, comme discuté dans la section 4.7.3. Le taux d'élimination de la chaleur régit la formation des structures de solidification à l'intérieur du lingot. Typiquement, ces structures se composent d'une zone de refroidissement rapide, d'une zone dendritique colonnaire et d'une zone équiaxe. La zone de refroidissement rapide se forme rapidement lorsque l'acier liquide chaud entre en contact avec la paroi relativement froide du moule, créant un gradient thermique élevé à la surface du lingot. Au fur et à mesure que la solidification progresse, les structures évoluent vers des structures dendritiques colonnaires en raison du gradient thermique toujours élevé, qui agit comme une force motrice. Cependant, à mesure que le gradient thermique diminue avec la solidification ultérieure, cette force motrice diminue et les structures deviennent équiaxes vers le centre du lingot (Malinowski et al., 2012). Le taux réduit d'extraction de chaleur à l'interface entre le métal liquide et les composants de la masselotte conduit à la rétention du métal fondu à des températures locales élevées, en particulier dans la masselotte, la partie supérieure du corps du lingot et à l'interface de la masselotte/du corps. Les configurations ND3 et ND4 présentent un taux de solidification plus faible, maintenant le gradient de température nécessaire à la croissance colonnaire pendant une

durée plus longue au front de solidification. Par conséquent, on peut en déduire qu'il y a une réduction de la zone contenant des grains équiaxes dendritiques dans la ligne médiane du lingot. Ces modifications augmentent la ségrégation négative dans la ligne médiane tout en réduisant le rapport de macroségrégation positive, surtout près de la paroi, dans la direction radiale. En raison du temps de séjour plus long à l'état pâteux et de l'augmentation du temps de diffusion des éléments solutés, il y a une diminution du rejet des solutés vers la pointe colonnaire. D'autre part, près de la paroi, les éléments solutés rejetés sont transportés par la convection du fluide dans le métal fondu, ce qui entraîne une circulation et une homogénéisation accrues en raison de l'expansion du volume du bain liquide à une température plus élevée.

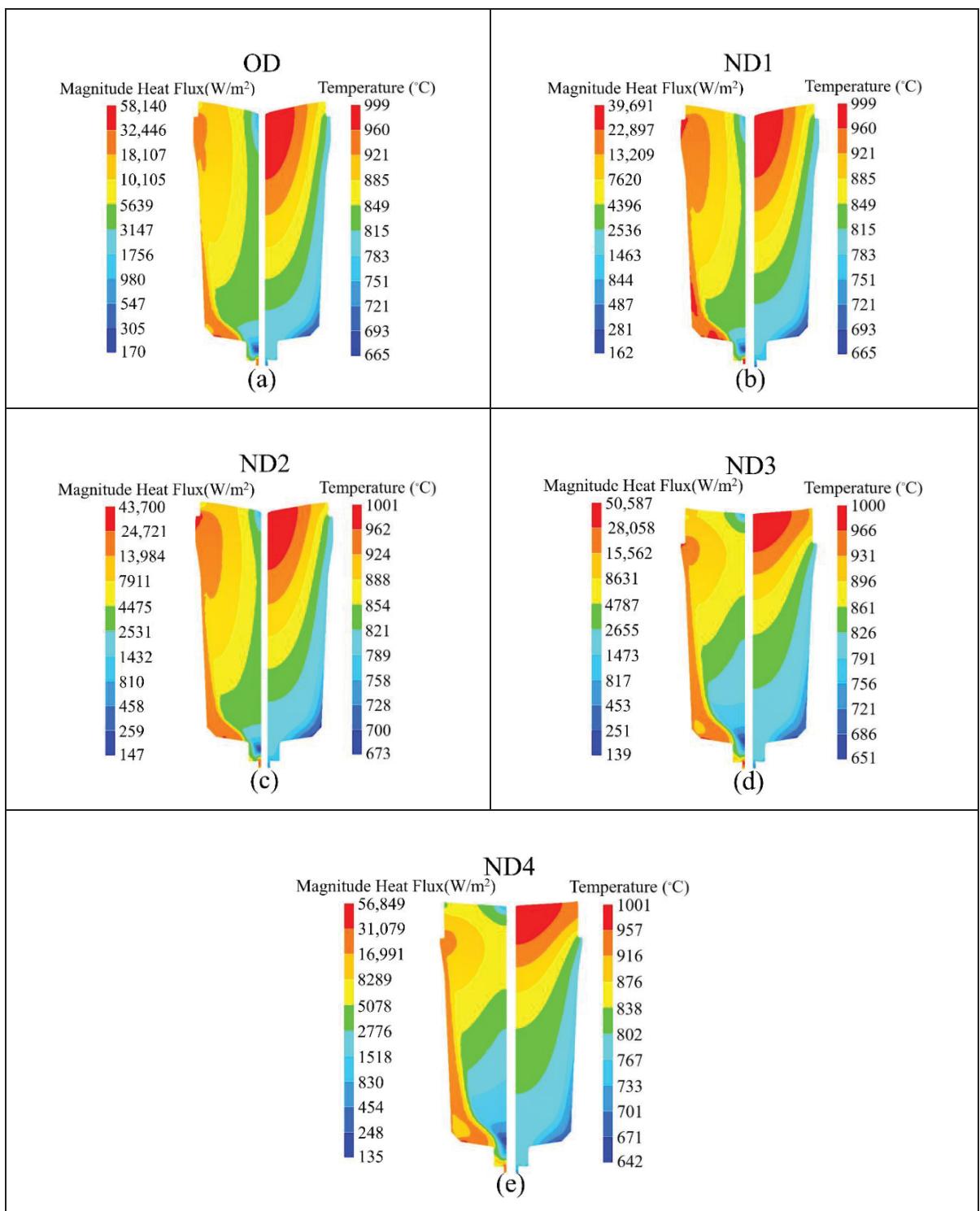


Figure 4.10 Profil de température du côté droit et profil de flux thermique du côté gauche à la fin de la solidification (100 % de solidification), indiquant le taux de transfert de chaleur pendant la solidification pour (a) OD, (b) ND1, (c) ND2, (d) ND3, et (e) ND4

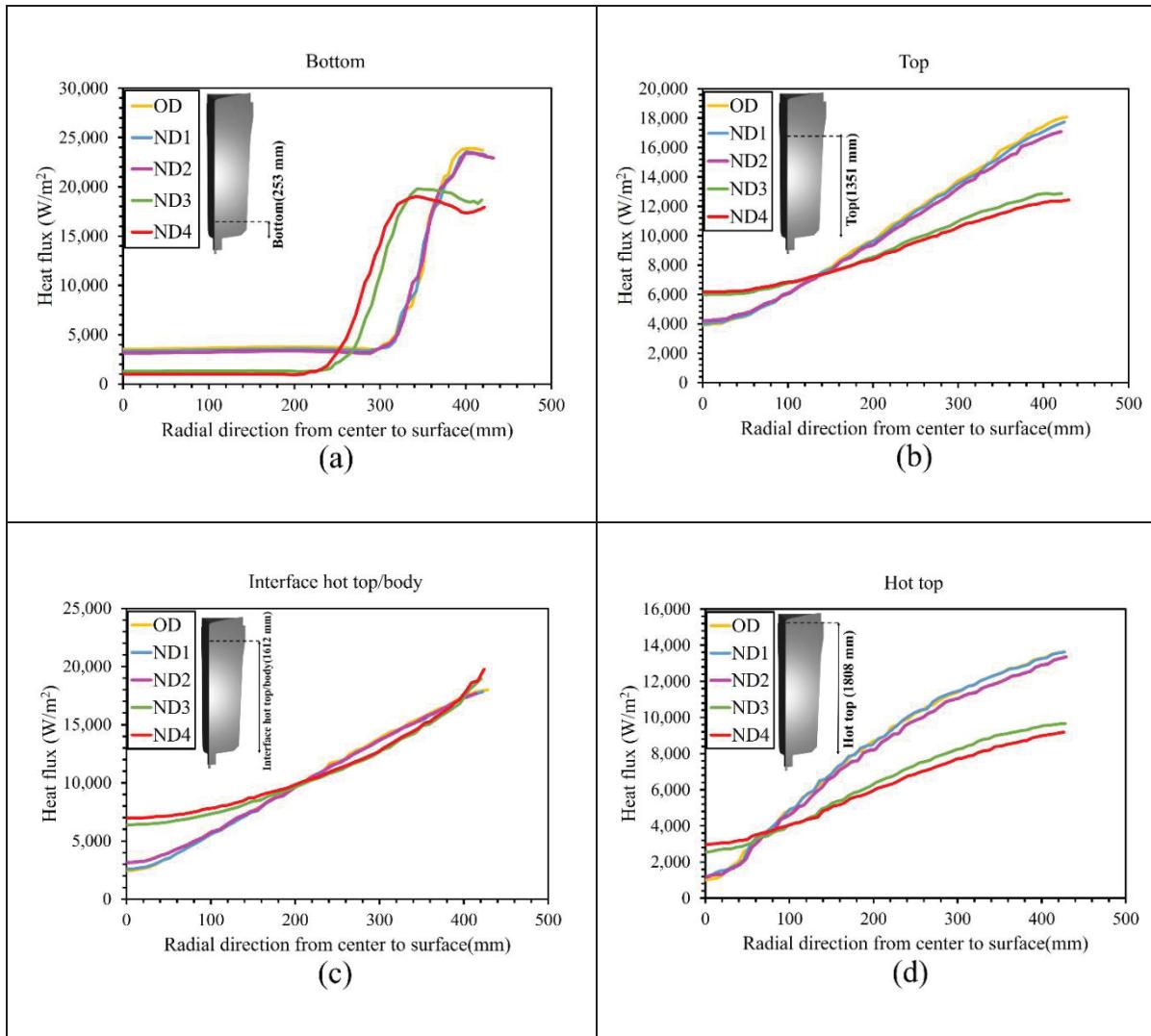


Figure 4.11 Comportement du flux de chaleur dans la direction radiale du centre vers la surface (a) Fond de lingot, (b) Sommet du lingot, (c) Interface masselotte/corps du lingot, et (d) Masselotte

4.7.3 Macroségrégation

La répartition des solutés entre les phases solide et liquide lors de la solidification d'alliages entraîne des changements de composition à l'échelle micrométrique. Les gradients de densité induits par les changements de température et de composition dans le liquide génèrent des flux de convection, où la convection thermosolutale est le mécanisme dominant pour la ségrégation positive et contribue à la formation de la ségrégation négative (Edward John Pickering, 2013).

Le terme de flottabilité de l'équation de la quantité de mouvement est présenté dans la ligne 6 du Tableau 4.2. Cette valeur indique la dépendance de la variation de densité locale à l'expansion thermique, aux gradients de température, à l'expansion solutale et aux gradients de concentration dans ce modèle. Ainsi, l'influence du gradient de température sur l'intensité du rapport de macroségrégation est calculable dans ce modèle. De plus, au cours du processus de solidification, les changements de densité associés aux transitions de phase peuvent entraîner la formation de gradients de densité dans le matériau. Ces événements ont le potentiel de faire migrer des composants spécifiques vers des régions distinctes, contribuant ainsi à la macroségrégation. En outre, les variations de densité observées pendant les transitions de phase et la solidification peuvent induire une convection et un écoulement de fluide à l'intérieur du matériau pour compenser le retrait, exacerbant ainsi les effets de la macroségrégation. L'évolution de la densité est modélisée en fonction des phases liquide et solide dans le modèle thermomécanique utilisé dans cette étude afin de prendre en compte le transport thermosolutal, influencé par les effets combinés du flux induit par la flottabilité et du flux induit par le retrait (Ludwig et al., 2015; Edward John Pickering, 2013; C Zhang et al., 2018).

Comme indiqué précédemment, la variation du régime thermique de la masselotte a entraîné une réduction de l'extraction de chaleur (Figure 4.8 et Figure 4.11) entre le métal liquide et les composants de la masselotte. Cela a entraîné le maintien du métal en fusion à une température locale plus élevée, notamment dans la masselotte, à l'interface de la masselotte/corps, et dans la partie supérieure du corps de la lingotière, ce qui a entraîné une augmentation du temps de solidification total et du temps de solidification local. Ces changements ont également eu un impact sur l'intensité du rapport de macroségrégation. Le rapport de ségrégation du carbone a été calculé dans la direction radiale (du centre jusqu'à 400 mm vers l'extérieur) de la masselotte, ainsi que du haut, du milieu et du bas du lingot, et dans la direction verticale (du haut vers le bas du lingot) le long de l'axe central du lingot. La plage de ségrégation, comprenant les valeurs maximales (Max) et minimales (Min), a été déterminée aux emplacements susmentionnés pour chacune des conceptions. La Figure 4.12 montre le rapport de ségrégation du carbone dans toutes les conceptions, qui sont disposées en fonction d'une augmentation du temps de solidification total. Selon les résultats, on observe une tendance à la baisse dans les valeurs

maximales de la plage du rapport de ségrégation du carbone au fond (Figure 4.12a), au milieu (Figure 4.12b), en haut (Figure 4.12c), dans la masselotte (Figure 4.12d) et sur l'axe central (Figure 4.12e) du lingot en raison des changements dans le régime thermique de la masselotte. Cependant, il est intéressant de noter que l'évolution de la plage de ségrégation minimale ne suit pas de tendance cohérente pour différentes conceptions. Comme discuté ci-dessus, cela pourrait être dû à une augmentation de la température locale, principalement dans la masselotte et la région supérieure du corps du lingot (Figure 4.9) entraînant une augmentation du temps de solidification total et du temps de solidification local. De plus, comme indiqué dans la Figure 4.7, l'extension des temps de solidification se produit principalement dans les zones centrales et de la masselotte. Ghodrati et al. (Ghodrati, Baiteche, et al., 2022) ont rapporté qu'une amélioration de 2.5% du temps de solidification entraînait une baisse du taux de refroidissement dans l'état pâteux, ce qui entraînait une plus grande diffusion des éléments solutés dans l'état solide, et donc une réduction du rejet de soluté dans le liquide. La réduction du rapport de ségrégation positive dans les positions mentionnées ci-dessus pourrait être interprétée en termes de temps de diffusion plus long des éléments solutés dans l'état solide dans les nouvelles conceptions par rapport à la conception d'origine.

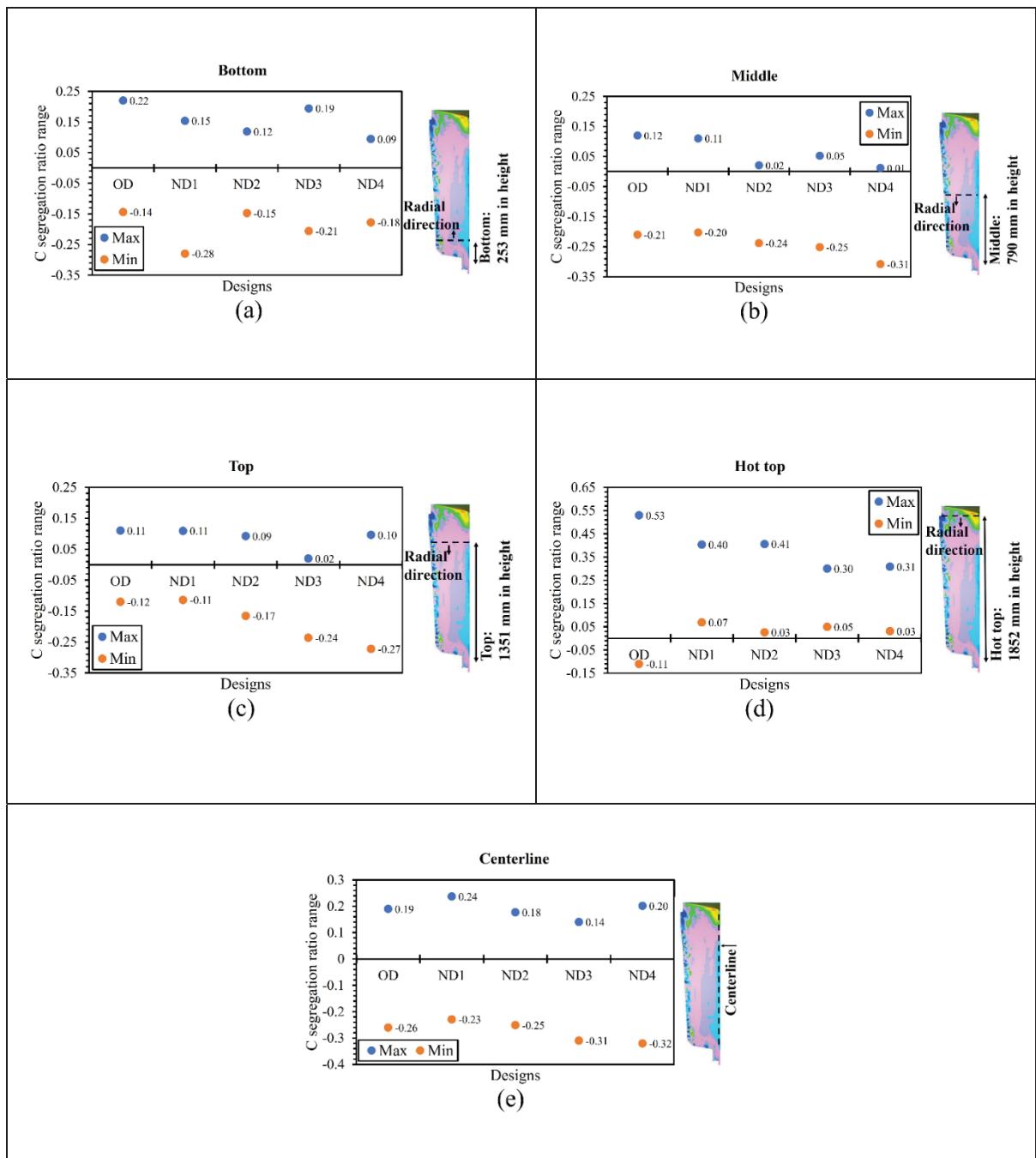


Figure 4.12 Ratio de macroségrégation du carbone, y compris le maximum et le minimum, dans (a) La direction radiale dans la zone inférieure du lingot, (b) La direction radiale dans la partie médiane du lingot, (c) La direction radiale dans la partie supérieure du lingot, (d) La direction radiale dans la région de la masselotte, et (e) La direction verticale au centre du lingot

La Figure 4.13a montre le profil du rapport de ségrégation pour le carbone dans le OD, ND1, ND2, ND3 et ND4 à la fin de la solidification. Le cône de ségrégation négative au fond et l'accumulation de ségrégation positive dans la région de la masselotte (qui sont des formes typiques de macroségrégation) ont été bien prédits dans chaque conception. La ségrégation négative, ou en d'autres termes les régions appauvries en solutés, se sont produites le long des parois latérales de la masselotte, comme décrit rarement par certaines sources (Z. Duan et al., 2016; Wu et al., 2019). Selon les résultats de simulation rapportés dans la Figure 4.13b, la formation de la ségrégation négative semble avoir commencé dès le tout début de la solidification pendant le processus de remplissage. La Figure 4.13b montre la fraction liquide du côté droit et le rapport de ségrégation du carbone du côté gauche à la fin du remplissage. En fait, une importante chute de température est attendue lorsque le métal liquide entre en contact avec la paroi du moule. Cela entraîne une augmentation significative du gradient de température et donc une réduction de la taille de la zone pâteuse. Pickering et al. (Edward John Pickering, 2013) ont rapporté que, lorsque la taille de la zone pâteuse est réduite, des régions appauvries en solutés se forment lors de la solidification, formant ainsi des bandes de ségrégation négative. La Figure 4.13c montre la carte de ségrégation du carbone mesurée expérimentalement de la masselotte. La présence de ségrégation négative dans la région de la masselotte a été observée expérimentalement, confirmant ainsi les résultats de la simulation. D'autre part, comme indiqué dans la Figure 4.13a, une réduction notable a été observée dans le volume de ségrégation négative (représentée par la zone bleu foncé) qui s'accumulait le long de la paroi latérale de la masselotte lorsqu'elle était entièrement recouverte par le panneau latéral dans les configurations ND3 et ND4. Dans ces cas, le liquide chaud est entré en contact direct avec la paroi du panneau latéral au lieu de la paroi du moule, ce qui a entraîné un gradient de température plus faible à l'interface entre la paroi du panneau latéral et le liquide. Nous avons ordonné les profils de ségrégation pour les quatre conceptions selon la tendance croissante du temps de solidification. Les motifs roses et violets sont liés à des taux de ségrégation de 5 % et 10 %, respectivement. La zone correspondant au taux de ségrégation de 5 % (zones roses) s'étend dans la zone de la masselotte dans les conceptions ND3 et ND4. Les résultats révèlent également que la zone de ségrégation positive (zones vertes et jaunes) dans la masselotte a été réduite en taille lorsque le temps de solidification a augmenté. De plus, la

position de la ségrégation positive dans la masselotte a été déplacée vers le haut, vers la surface du métal. Comme indiqué dans nos études précédentes (Ghodrati, Baiteche, et al., 2022; Maduriya & Yadav, 2018), en retardant le processus de solidification et en ralentissant la vitesse de refroidissement du métal, la hauteur du retrait de solidification dans la région de la masselotte peut être réduite. Ainsi, la profondeur de la cavité de rétreinte a été réduite, et il y a eu un mouvement ascendant dans l'accumulation de l'enrichissement en solutés dans la masselotte. Le déplacement maximal de la surface du métal dans la masselotte, dû à la contraction, était de 158 mm, 156 mm, 140 mm, 101 mm et 94 mm dans OD, ND1, ND2, ND3 et ND4, respectivement. Notre effort pour comprendre le rendement en matière des conceptions a été mené en utilisant une analyse des rejets en surface pour s'assurer qu'il n'y avait pas de ratio de ségrégation intense. Les rejets en bas n'ont pas été pris en compte dans cette étude. On suppose que les zones dans la masselotte avec une ségrégation en carbone supérieure à 10% doivent être enlevées pour aplani la surface supérieure de la lingotière. Le poids des matériaux rejettés dans la partie supérieure de la masselotte par rapport au poids total du matériau du lingot a été calculé en pourcentage de matériau perdu. Ensuite, la réduction en pourcentage de matériau perdu dans la masselotte par rapport à l'OD a été calculée pour chaque nouvelle configuration comme mesure de l'efficacité de l'utilisation du matériau. Le matériau rejeté était de 2188 kg, 1975 kg, 1542 kg, 1666 kg et 1642 kg dans OD, ND1, ND2, ND3 et ND4, respectivement. En conséquence, avec les nouvelles conceptions de masselotte, l'efficacité de l'utilisation du matériau a augmenté à 9.7%, 29.5%, 23.9% et 24.9% dans ND1, ND2, ND3 et ND4, respectivement.

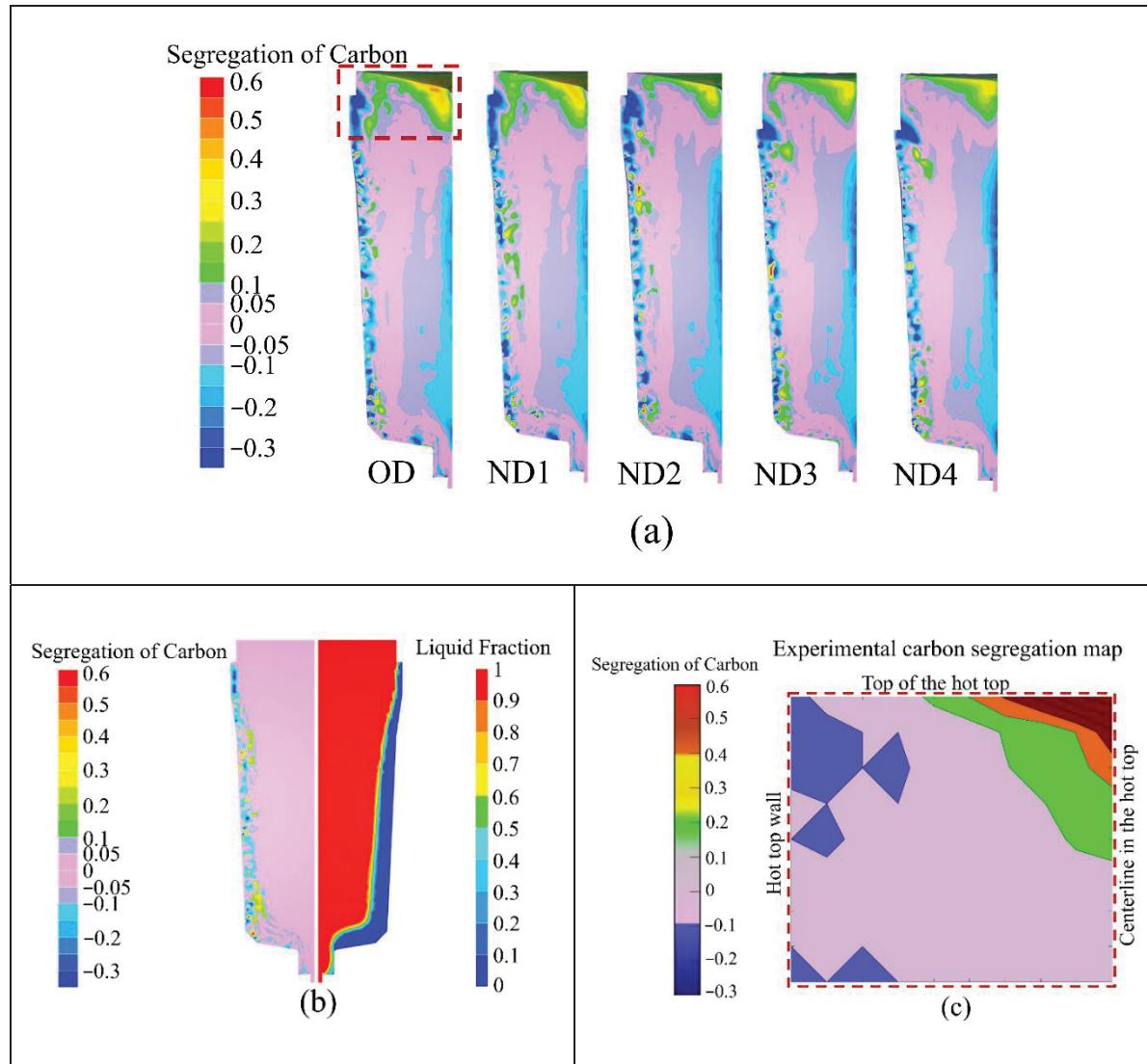


Figure 4.13 (a) Les profils du ratio de ségrégation du carbone de OD, ND1, ND2, ND3 et ND4 à la fin de la solidification; (b) Profils du ratio de ségrégation du carbone et de fraction liquide à la fin du remplissage; (c) Carte expérimentale du ratio de ségrégation du carbone dans la masselotte, où la position de (c) est marquée avec le cadre rouge

4.8 Conclusions

Dans cette étude, l'influence des variations du régime thermique de la masselotte sur le temps total de solidification, la température et le flux de chaleur, qui impactent la sévérité de la macroségrégation, a été investiguée quantitativement dans un lingot de coulée de grande taille en acier au carbone de qualité moyenne 4130. Les résultats obtenus sont les suivants:

1. Des augmentations d'environ 2% à 31% ont été observées dans le temps de solidification avec les modifications apportées à la capacité thermique de la masselotte.
2. L'insertion du panneau latéral supplémentaire dans les configurations ND3 et ND4 a augmenté le temps total de solidification d'environ 30 minutes dans la région de la masselotte et jusqu'à environ 20 minutes le long de l'axe de la ligne centrale du lingot.
3. Lorsque la masselotte était entièrement recouverte de matériau réfractaire, cela a entraîné une diminution du transfert de chaleur à la fois dans la zone de la masselotte et dans le corps du lingot, ce qui a réduit les baisses de température, influençant ainsi la dynamique de solidification et diminuant les schémas de ségrégation dans la masselotte et la moitié supérieure du lingot.
4. Une tendance à la baisse dans la plage de macroségrégation du carbone, en particulier pour la ségrégation positive, a été observée dans diverses régions du lingot. Cette tendance coïncidait avec une augmentation du temps de solidification local, ce qui facilitait une plus grande diffusion des éléments solutés dans la phase solide, entraînant ainsi une ségrégation réduite.
5. Les nouvelles conceptions ont permis d'augmenter le rendement en matériau de la masselotte de 10 à 29 %, en fonction des modifications apportées au régime thermique de la masselotte. Cette découverte a des implications pratiques significatives, car elle permet de réduire le gaspillage de matériau de la masselotte causé par une macroségrégation sévère.

4.9 Contributions des auteurs

Conceptualisation, N.G. ; méthodologie, N.G. ; logiciel, N.G. ; validation, N.G. et J.-B.M. ; analyse formelle, N.G. ; investigation, N.G. ; ressources, M.J. et J.- B.M. ; conservation des données, N.G. ; rédaction - préparation de la version originale, N.G. ; rédaction - révision et

édition, N.G. et M.J. et H.C. ; visualisation, N.G. ; supervision, M.J. ; administration du projet, M.J. ; acquisition des fonds, M.J. Tous les auteurs ont lu et approuvé la version publiée du manuscrit.

4.10 Financement

Ce travail a été soutenu par le Conseil de recherches en sciences naturelles et en génie du Canada (CRSNG) dans le cadre d'un projet de recherche et développement en collaboration (RDC) [numéro de subvention 536444-18]. Nous sommes très reconnaissants à Finkl Steel-Sorel Co. de nous avoir fourni le matériel.

4.11 Déclaration de disponibilité des données

Les données sont contenues dans l'article.

4.12 Conflits d'intérêts

L'auteur Jean-Benoit Morin a été employé par la société Finkl Steel-Sorel. Les autres auteurs déclarent que la recherche a été menée en l'absence de toute relation commerciale ou financière qui pourrait être interprétée comme un conflit d'intérêts potentiel.

4.13 Appendice I

Tableau 4.6 Nomenclature

Symboles	Paramètres
C_p	Capacité thermique spécifique (J/kg/°C)
D_l^i	Coefficient de diffusion du soluté i dans le liquide (mm ² /s)
f_l	Fraction liquide
f_s	Fraction solide
g	Accélération gravitationnelle (m/s ²)
H	Enthalpie (J)
h	Coefficient de transfert de chaleur (W/m/°C)
h_{cv}	Coefficient de transfert de chaleur par convection (W/m/°C)
K_s	Consistance viscoplastique dans le solide
k	Coefficient de partage
K_{perm}	Perméabilité
L_f	Chaleur latente de fusion (kJ/kg)
m	Coefficient de sensibilité à la vitesse de déformation
T	Température (°C)
T_f	Température de fusion du fer pur (°K)
n	Exposant de durcissement par déformation
P	Pression (MPa)
q	Flux de chaleur (W/m ²)
R_{eq}	Résistance au transfert de chaleur (W/m ² /°C) ⁻¹
R_0	Résistance thermique nominale (W/m ² /°C) ⁻¹
R_{air}	Résistance thermique de l'interstice d'air (W/m ² /°C) ⁻¹
R_{rad}	Résistance au transfert de chaleur (W/m ² /°C) ⁻¹
T_{ref}	Température de référence (liquidus) (°C)
T_{ext}	Température de l'environnement extérieur (°C)
T_{mold}	Température initiale des moules, des poudres et des réfractaires (°C)
T_m	Température de fusion du fer pur (°C)
ω^i	Concentration locale du soluté i (wt%)
ω_0	Composition d'origine (wt%)
ω_0^i	Concentration nominale du soluté i (wt%)
ω_l^i	Concentration du soluté i dans le liquide (wt%)
m_l^i	Pente du liquidus
N	Nombre d'éléments de soluté
α	Nombre de Fourier
ρ_0	Densité de référence (kg/m ³)
β_T	Coefficient de dilatation thermique (/K)
β_i	Coefficient de dilatation solutale du soluté i ($\times 10^{-2}$ /wt%)
v	Vitesse moyenne
$\bar{\sigma}$	Contrainte d'écoulement équivalente de Von Mises (MPa)
η_l	Viscosité dynamique du liquide

Symboles	Paramètres
$\bar{\varepsilon}$	Taux de déformation plastique équivalent
$\bar{\varepsilon}$	Déformation plastique équivalente
ρ	Densité (kg/m^3)
λ	Conductivité thermique ($\text{W}/(\text{m.K})$)
ε_r	Conductivité thermique
σ_r	Constante de Stephan-Boltzmann ($5.776 \times 10^{-8} \text{ W}/\text{m}^2/\text{K}$)
σ_s	Contrainte de limite d'élasticité (MPa)

4.14 Appendice II

Comme mentionné précédemment, la carte de macroségrégation de tous les éléments d'alliage a été tracée en utilisant les données d'analyse chimique expérimentale. Le Tableau 4.7 montre la plage de ratio de ségrégation du carbone dans la direction radiale en haut, en bas et en ligne médiane du lingot (les emplacements liés au Tableau 4.7 sont marqués dans la Figure 4.14). La Figure 4.15 montre la carte du pourcentage de ségrégation de manganèse, à la fois expérimentale et numérique. Une ségrégation négative conique et la ségrégation positive ont été observées en bas et en haut du lingot (Figure 4.15). La plage de pourcentage de ségrégation de Mn dans la direction radiale est indiquée par rapport à la masselotte, au sommet et au milieu du lingot dans la Figure 4.15 et le Tableau 4.8. En général, une très bonne concordance a été observée entre les résultats de prédiction et expérimentaux. Il convient de noter que, dans le modèle de ségrégation, la sédimentation des grains équiaxes n'a pas été prise en compte car elle avait peu d'impact sur la macroségrégation du carbone, et le faire aurait entraîné une augmentation significative du temps de calcul. De plus, des difficultés ont été rencontrées dans la mesure de la composition chimique des bords de l'échantillon lors des mesures expérimentales, et nous avons perdu les échantillons de surface du mur lors du processus de découpe. Les deux facteurs mentionnés ci-dessus contribuent aux différences observées pour certaines conditions entre les résultats prédictifs et expérimentaux.

Tableau 4.7 Ratio de ségrégation du carbone (expérience et simulation) à la fin de la solidification dans la masselotte, en bas et en ligne médiane du lingot

Ratio de ségrégation du carbone		
Emplacements	Expérience	Simulation
1659 mm de hauteur depuis le bas (direction radiale)	(-0.094, +0.5)	(-0.12, +0.41)
90 mm de hauteur depuis le bas (direction radiale)	(-0.12, +0.03)	(-0.12, +0.04)
300 mm en dessous de la surface de la masselotte (direction verticale)	(+0.17, +0.57)	(+0.17, +0.56)
600 mm au-dessus du bas (direction verticale)	(-0.09, -0.04)	(-0.12, -0.03)

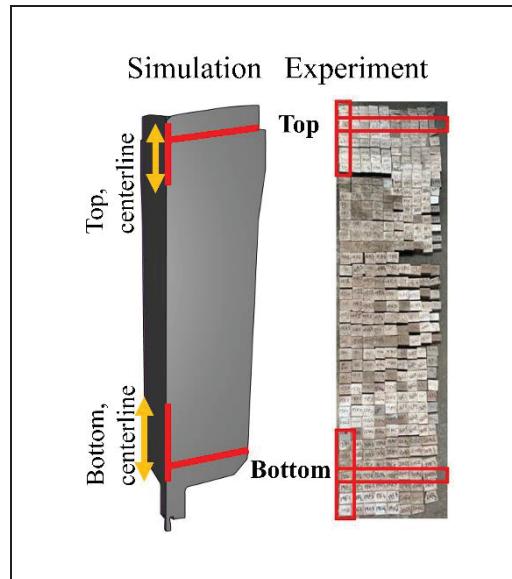


Figure 4.14 Les zones du haut, du bas et de la ligne médiane du lingot (telles qu'indiquées par les lignes rouges et les boîtes rouges) ont été sélectionnées pour analyser la ségrégation du carbone

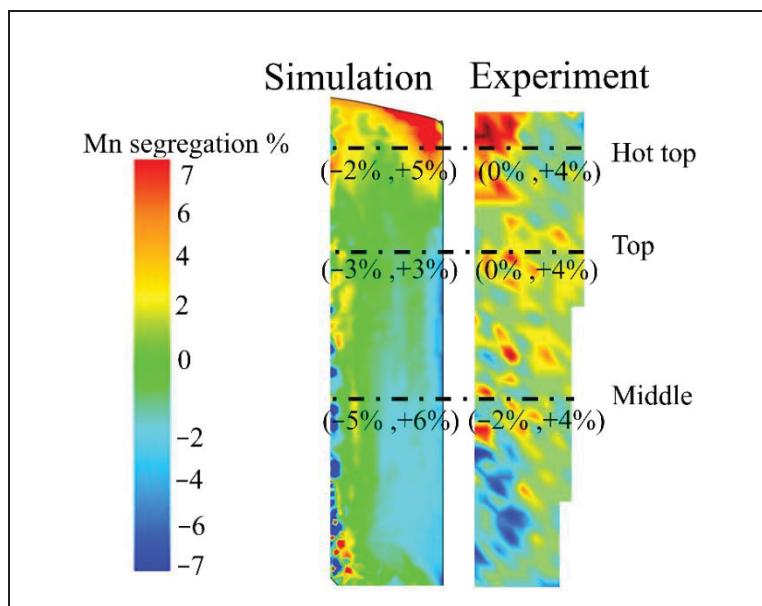


Figure 4.15 Carte de ségrégation du manganèse (en pourcentage) : côté gauche—simulation ; côté droit—expérience

Tableau 4.8 Ratio de ségrégation du manganèse (expérience et simulation) à la fin de la solidification dans la zone de la masselotte, en haut et au milieu du lingot

Ratio de ségrégation du manganèse		
Emplacements	Expérience	Simulation
Masselotte : 1708 mm en hauteur à partir du bas (direction radiale du centre vers la surface)	(0, +0.04)	(-0.02, +0.05)
Sommet : 1350 mm en hauteur à partir du bas (direction radiale du centre vers la surface)	(0, +0.04)	(-0.03, +0.03)
Milieu : 790 mm en hauteur à partir du bas (direction radiale du centre vers la surface)	(-0.02, +0.04)	(+0.05, +0.06)

CHAPITRE 5

INFLUENCE OF HOT TOP GEOMETRY ON COLUMNAR-TO-EQUIAXED TRANSITION IN A 12 MT STEEL INGOT

Neda Ghodrati¹, Patrice Ménard², Jean-Benoit Morin², Mohammad Jahazi

¹ Department of Mechanical Engineering, École de Technologie Supérieure, 1100 Notre-Dame St. W, Montreal, QC H3C 1K3, Canada

² Finkl Steel—Sorel, 100 McCarthy, Saint-Joseph-de-Sorel, QC J3R 3M8, Canada

Cet article a été publié dans le *Journal of Materials Research and Technology* en Juillet 2024.

5.1 Résumé

Dans le présent travail, l'impact de la géométrie de la masselotte et de l'historique thermique sur le point de Transition de Colonnaire à Équiaxe (TCE) d'un lingot d'acier de 12 tonnes a été déterminé à l'aide d'une modélisation par éléments finis. La validation expérimentale du modèle a été réalisée sur un lingot de taille industrielle, en se concentrant sur la température, la macroségrégation et la microporosité de retrait. Le point anticipé de Transition de Colonnaire à Équiaxe, influencé par l'interaction du taux de front solide, du gradient thermique et de la fraction solide, a été pris en compte dans l'analyse. Les résultats ont révélé un déplacement de la position de la TCE dans les nouvelles configurations, jusqu'à 56 mm, 63 mm et 60 mm du mur du lingot respectivement au bas, au milieu et en haut du lingot. Les changements sont attribués à des variations dans la cinétique de solidification, en particulier le temps de solidification. Les phénomènes thermo-mécaniques, comprenant le remplissage du moule, le refroidissement, la convection solutale et l'écoulement induit par le retrait, ont été incorporés dans le modèle pour prédire la macroségrégation et le risque de formation de porosité et de cavité de retrait pour différentes géométries de masselotte. Un critère est proposé pour atténuer la macroségrégation et minimiser le risque de porosité et de cavité de retrait.

Mots-clés: masselotte, coulée en lingots, temps de solidification, transition colonnaire à équiaxe, macroségrégation, microporosité, cavité de retrait

5.2 Introduction

La coulée de lingots est la méthode de production la plus importante des aciers spéciaux, largement utilisés dans les industries du transport et de la transmission d'énergie (Ghodrati, Baiteche, et al., 2022; Rogotovsky, Shipelnikov, & Bobyleva, 2018; Von Schweinichen, Chen, Senk, & Lob, 2013; Wu et al., 2018). Les lingots coulés servent souvent de forme initiale pour des processus ultérieurs tels que le forgeage, le traitement thermique et l'usinage, et finissent par façonner les composants finaux (Jun Li et al., 2022). La demande de spécialités en aciers de haute qualité, surtout pour des produits finaux de plus grande taille, tels que des arbres ou des matrices pour des opérations de formage de métaux, nécessite la production de lingots de très grande taille. Il est bien connu que la microstructure à l'état brut de coulée est chimiquement et microstructurallement très hétérogène (Hurtuk, 2008; Jun Li et al., 2022). La solidification est un processus très complexe, multiphasé et multi-échelle, qui comprend le transfert de chaleur, de quantité de mouvement, de masse, de soluté et de convection de fusion, ce qui rend la prédiction de la structure brute de coulée très complexe (Ahmadein, Wu, Li, Schumacher, & Ludwig, 2013; Pineda & Martorano, 2013). La microstructure du lingot brut de coulée se compose de trois zones principales: la zone de refroidissement, très proche de la paroi du moule avec des grains équiaxes fins; la zone colonnaire avec des grains très longs, orientés vers la direction d'extraction de chaleur du lingot; et la zone équiaxe, qui comprend des grains équiaxes très gros dans la partie centrale du lingot provenant du liquide sous-refroidi (Hurtuk, 2008; Kwapisiński & Wołczyński, 2023). L'une des principales sources d'hétérogénéité chimique, notamment dans le cas des lingots de coulée de grande taille, est la formation de macroségrégation au niveau de la ligne médiane, qui combinée avec des défauts de porosité et de rétraction, pourrait sérieusement compromettre la qualité du produit final (Lan & Zhang, 2014).

L'un des principaux facteurs influençant l'apparition et l'étendue des défauts susmentionnés est la limite entre la zone colonnaire et la zone équiaxe, connue sous le nom de point de transition colonnaire-équiaxe (TCE) (Hurtuk, 2008; Kwapisiński & Wołczyński, 2023). Cette transition signifie une transformation des conditions de solidification, passant d'une croissance contrainte à des conditions qui facilitent une croissance libre et sans contrainte. La région colonnaire favorise l'apparition d'une ségrégation de l'axe central, de fissures et de porosité (O'Reilly, 2016; Straffelini, Lutterotti, Tonolli, & Lestani, 2011). La position du TCE varie en fonction du gradient de température existant entre les fronts liquide et solide, ainsi que du temps de solidification. Il est donc essentiel de déterminer le TCE et de quantifier l'impact des paramètres de traitement sur son évolution. Des modèles expérimentaux et théoriques ont été utilisés pour étudier l'évolution du CET et prédire sa formation (Khalajzadeh & Beckermann, 2020). Alors que les modèles analytiques, tels que ceux proposés par Rappaz et al. (O'Reilly, 2016), et ses variantes ont été utilisés par beaucoup; cependant, ces dernières années, l'accès à des capacités de calcul avancées a permis le développement de modèles de simulation numérique qui prennent en compte les phénomènes thermiques, métallurgiques et mécaniques complexes résultant en une détermination précise de l'influence de divers paramètres de coulée sur l'évolution du TCE et de son impact sur les défauts de coulée.

La configuration géométrique de l'installation de coulée du lingot, y compris le moule, la masselotte, les panneaux latéraux, le coureur, la trompette, et le riser de surverse, exerce une influence significative sur la cinétique de solidification et, par conséquent, en tant que principaux déterminants affectant le TCE (O'Reilly, 2016; Tashiro et al., 1983; J. Wang et al., 2012). Comme rapporté par de nombreux auteurs, parmi ces facteurs, la configuration de la masselotte émerge comme l'un des plus critiques affectant le TCE (Ghodrati, Baiteche, et al., 2022; Ghodrati, Champiaud, Morin, & Jahazi, 2024; Khalajzadeh & Beckermann, 2020). La masselotte située sur la partie supérieure du moule joue un rôle crucial dans l'alimentation du lingot pendant la coulée, le contrôle du flux de chaleur et la fourniture d'une zone pour les ségrégations et les inclusions non métalliques (Hurtuk, 2008). Les modifications des caractéristiques de la masselotte affectent de manière significative la cinétique de solidification, modifiant ainsi la position de la TCE (Khalajzadeh & Beckermann, 2020;

Tashiro et al., 1983; J. Wang et al., 2012). Ainsi, la modification de la configuration de la masselotte pour optimiser le temps de solidification tout en tenant compte de la TCE peut améliorer considérablement la qualité de la coulée et minimiser la formation de défauts.

Qian et al, (Qian et al., 2015) a proposé une hauteur optimale de masselotte et une température de préchauffage afin de contrôler les ségrégations dans le canal d'alimentation de la masselotte et la porosité de retrait à la ligne centrale dans un lingot de 100 tonnes. Cependant, l'étude se concentrat principalement sur le canal d'alimentation dans la masselotte et la microporosité, sans discuter de l'impact des modifications sur la position de la TCE et de l'effet subséquent sur la macroségrégation. Kermanpur et al, (Kermanpur et al., 2010) a étudié les effets de la forme et de la hauteur du matériau isolant de la masselotte sur le comportement de la solidification et la susceptibilité aux fissures dans un lingot de 6 tonnes d'acier faiblement carburé. Ils ont conclu que l'utilisation d'une forme circulaire de masselotte réduisait la susceptibilité aux fissures lors des processus de forgeage à chaud ultérieurs. Cependant, l'enquête n'a pas examiné l'influence de la masselotte sur la TCE, la macroségrégation et la porosité. Wang et al. (J. Wang et al., 2012) et Tashiro et al. (Tashiro et al., 1983) s'est concentré sur l'influence de la géométrie de la masselotte sur l'élimination de la porosité de retrait dans les lingots d'acier, mais l'influence de la masselotte sur la TCE et la macroségrégation n'a pas été documentée. Kumar et al. (Kumar et al., Juin 2012) a étudié l'impact d'un matériau réfractaire isolant dans un lingot de 6.2 tonnes, révélant une structure de grain axiale plus fine et une macroségrégation axiale accrue avec un matériau réfractaire exothermique. Ils ont effectué des mesures expérimentales de l'épaisseur des colonnaires dans la zone de la masselotte; cependant, la position de la TCE dans le corps n'a pas été rapportée. Li, Hui-Cheng, et al, (H.-c. Li et al., 2018) a adopté une approche différente en appliquant des oscillations magnéto-pulsées dans la masselotte (HPMO). Ils ont rapporté que HPMO induisait un affinage significatif des grains, raccourcissait la longueur des grains colonnaires et réduisait la sévérité de la macroségrégation. Cependant, l'influence de l'altération de la configuration de la masselotte sur la TCE, la macroségrégation et la porosité de rétraction n'a pas été prise en compte.

Malgré les nombreuses études mentionnées ci-dessus, l'influence de la configuration de la masselotte sur la position de la TCE reste inexplorée. Cette étude vise à combler ces lacunes en examinant l'impact de différentes conceptions de masselotte sur la position de la TCE et en introduisant un critère de temps de solidification qui tient compte de la microporosité de rétraction, de la formation de cavités et de la macroségrégation. Un lingot en acier haute résistance de 12 tonnes est considéré pour l'étude, et le code éléments finis THERCAST® 3D a été utilisé pour développer et simuler le processus de solidification, en déterminant les corrélations entre la position de la TCE et la formation de défauts dans la microstructure brute de coulée.

5.3 Matériaux et méthodes

5.3.1 Expériences

La procédure expérimentale impliquait le versement par le bas d'un acier à haute résistance au carbone moyen, avec 0.32% C, 0.57% Mn, 0.34% Mo, 1.08% Cr, 0.23% Ni, et 0.27% Si, en poids, dans un moule polygonal de 12 MT. Le métal en fusion provenait d'un four électrique à arc, a subi un traitement en poche puis un dégazage sous vide. Ensuite, le métal en fusion a été versé par le bas, à une température de 1580 °C et pendant une durée de 26 minutes, dans un moule en fonte. La masselotte a été intégrée dans le moule avec ses parois latérales revêtues de matériau réfractaire et sa surface supérieure recouverte de deux chapeaux exothermiques. La Figure 5.1 illustre la configuration de la coulée du lingot (Figure 5.1a et b), la masselotte (Figure 5.1c et d), et le lingot (Figure 5.1e). Pendant les processus de coulée et de solidification, la température du moule a été méticuleusement surveillée à l'aide de sept thermocouples stratégiquement placés à une profondeur de 25 mm à l'intérieur de la paroi du moule depuis la surface extérieure, comme illustré dans la Figure 5.1a. Trois thermocouples ont été positionnés dans la masselotte (TC1, TC2, et TC3), tandis que les quatre autres étaient répartis dans les parties supérieure (TC4), moyenne (TC5) et inférieure du moule (TC6, TC7), comme indiqué dans le Tableau 5.1. Après la solidification et le démoulage, le lingot a été coupé longitudinalement depuis le centre. Dans les étapes suivantes de l'expérience, la section longitudinale centrale, d'une épaisseur de 25.4 mm, a été divisée en deux sections distinctes.

La Figure 5.2 illustre les étapes séquentielles du processus de découpe. Une de ces sections a été subdivisée ultérieurement en dix blocs individuels. Ces blocs ont été soumis à un processus de meulage, suivi d'une inspection par ressouage (Dye Penetrant Inspection (DPI)) sur chaque bloc pour évaluer la microporosité.

Figure 5.3 montre la présence de microporosité sur les blocs du centre supérieur. De plus, l'autre moitié du bloc central a été coupée en 370 petits échantillons, et chaque échantillon a été soumis à des mesures chimiques pour créer une carte de macroségrégation pour chaque élément. L'analyse chimique des échantillons a été réalisée à l'aide d'un Spectromètre d'Émission Optique ARLTM 4460 de Thermo Scientific (Thermo Fisher Scientific Inc., Waltham, MA, USA). Ensuite, les rapports de ségrégation de chaque échantillon ont été calculés à l'aide de la relation : $R^i = (\omega^i - \omega_0^i) / \omega_0^i$, où R^i représente le rapport de ségrégation de l'élément soluté ω^i et la concentration locale du soluté, et ω_0^i est sa concentration initiale. Une valeur positive ou négative de R^i indique une ségrégation positive ou négative, respectivement. Les rapports de ségrégation obtenus ont été essentiels pour construire des schémas de macroségrégation pour les éléments sur toute la section longitudinale. Ce processus de cartographie a été réalisé à l'aide de MATLAB® (MathWorks Inc., Natick, MA, USA) (MATLAB, 2012b), (la ségrégation du carbone dans la Figure 5.2). La méthodologie ci-dessus, bien que très longue et chronophage, garantit une compréhension détaillée des processus de coulée et de solidification, offrant des informations précieuses sur l'impact des conceptions de la masselotte sur la qualité finale du lingot.

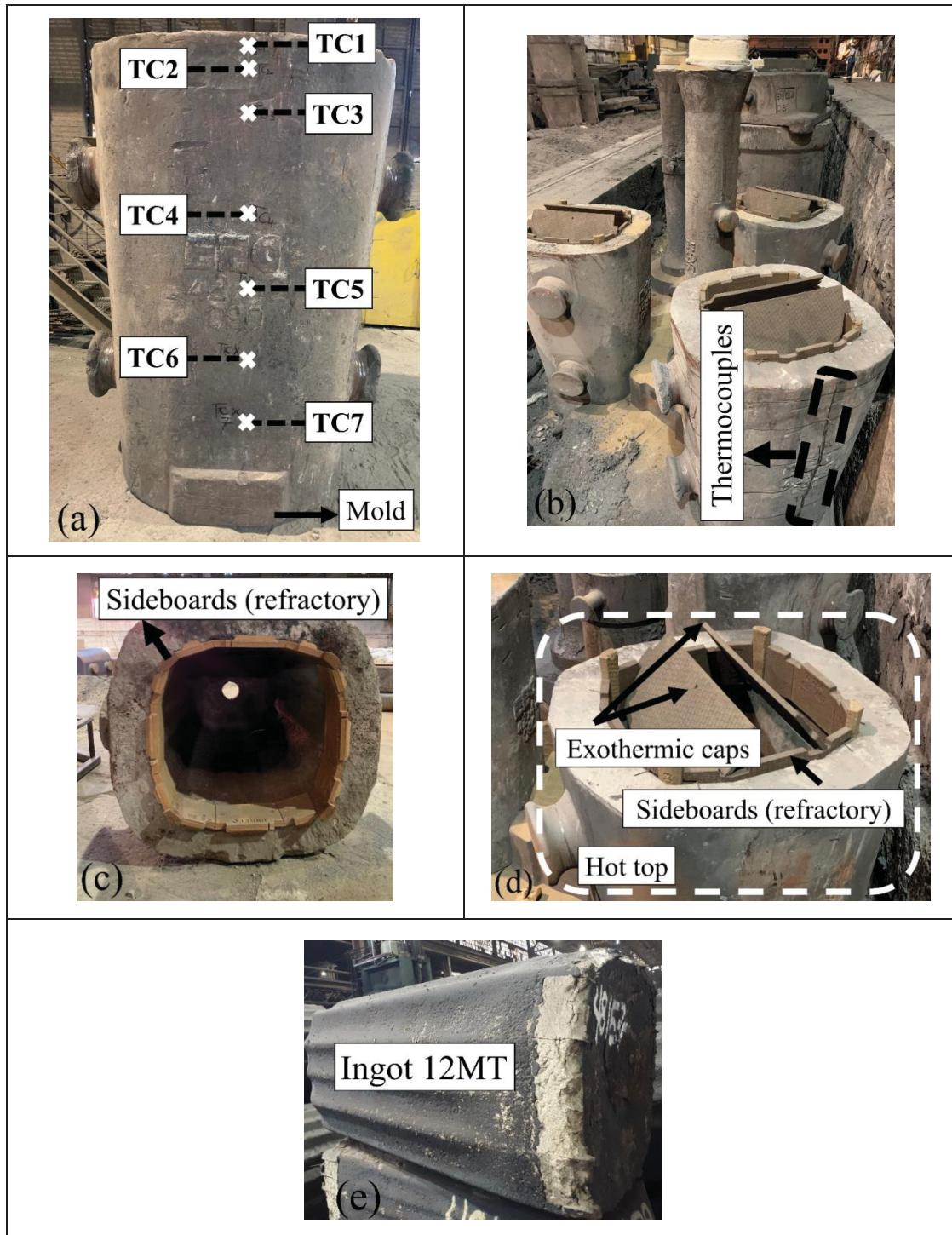


Figure 5.1 Configuration de la coulée de lingots pour 12MT, (a) Position des 7 thermocouples (TC1 à TC7), (b) Configuration de coulée de lingot par le bas, (c) Matériau réfractaire dans la masselotte, (d) La masselotte, (e) Lingot de 12 MT

Tableau 5.1 La position des thermocouples sur la surface du moule

Le nombre de thermocouples (TC)	La distance depuis la surface supérieure du moule
TC1	51 mm
TC2	127 mm
TC3	279 mm
TC4	686 mm
TC5	991 mm
TC6	1295 mm
TC7	1600 mm

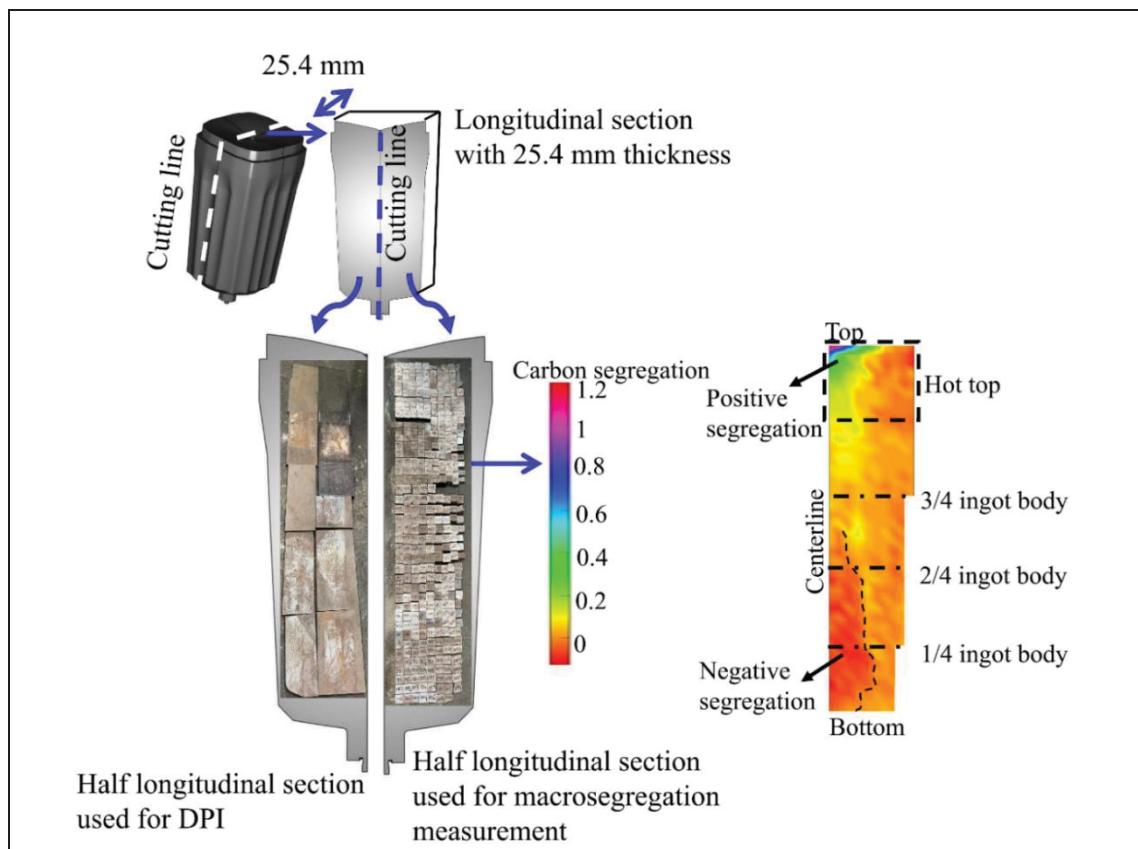


Figure 5.2 Plan de découpe du lingot de 12 MT

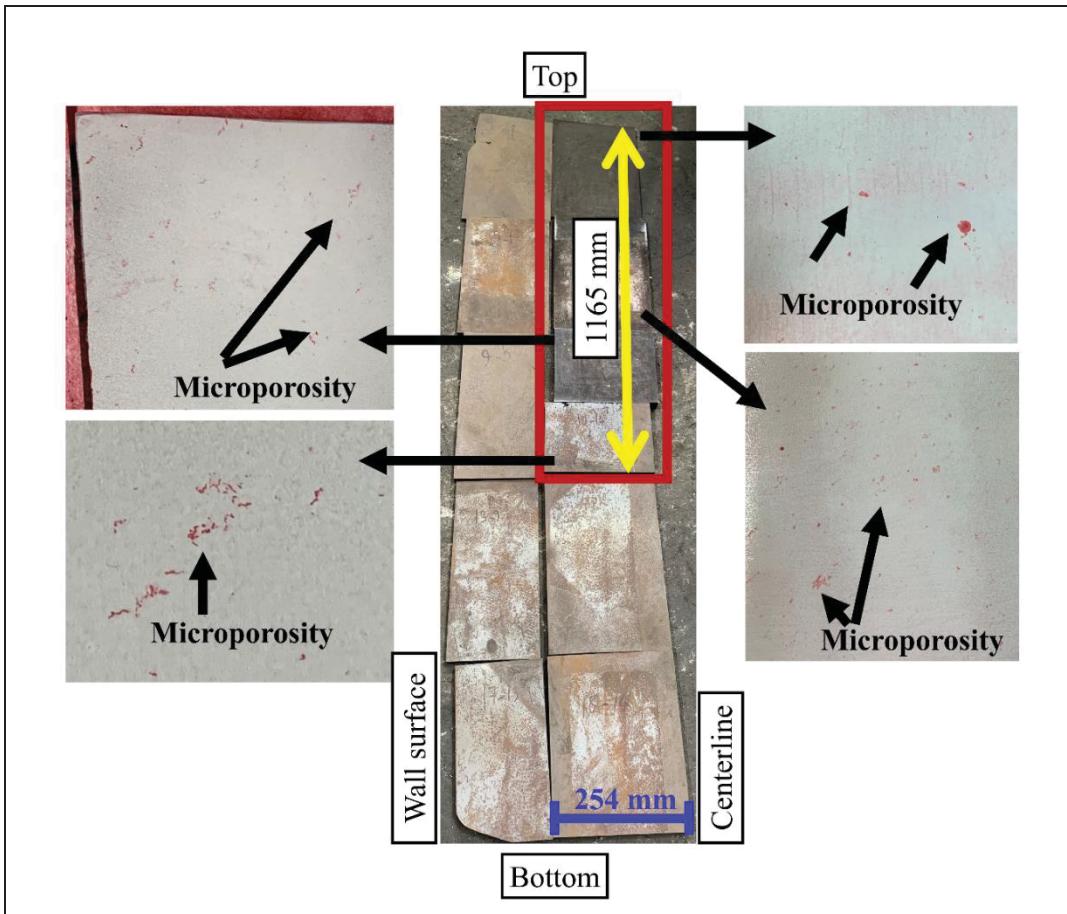


Figure 5.3 Inspection par ressuage (DPI) sur la demi-section longitudinale d'un lingot de taille réelle, observation de la microségrégation sur les blocs de la ligne centrale supérieure

5.3.2 Modélisation

Le modèle grandeur nature de lingot de 12 MT a été établi en utilisant le système de coulée par le bas industriel (Figure 5.1) comme référence. La cavité du moule mesurait 2000 mm de hauteur, lingot avait environ 1009 mm de largeur moyenne dans la région de la masselotte après solidification, et 16 rainures sur la surface extérieure. Le moule était composé d'une partie supérieure en fonte coulée vers le haut avec une masselotte de 381 mm de hauteur revêtue de carreaux réfractaires isolants à l'intérieur et d'un panneau réfractaire exothermique isolant recouvrant le dessus du métal en fusion (Figure 5.4a,b, et c). Pour la modélisation par éléments finis (MEF), un modèle à 90° (1/4) a été utilisé conformément à la symétrie de rotation des 16 rainures (Figure 5.4c).

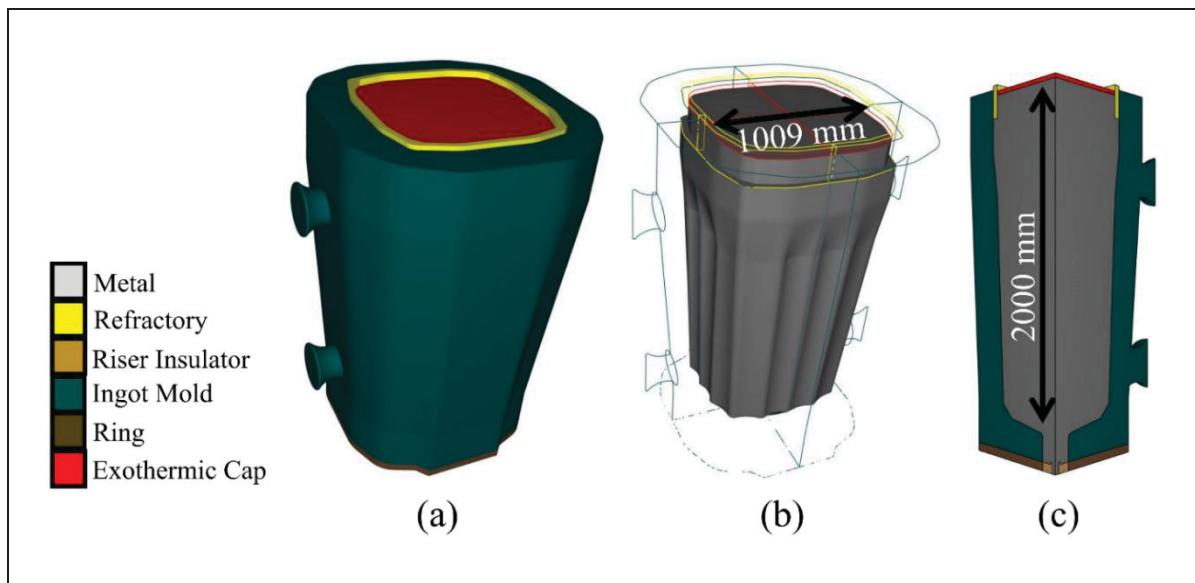


Figure 5.4 Établissement des modèles de coulée de 12 MT pour la modélisation par éléments finis (FE): (a) Modèle construit sur la base du système de coulée réel avec; (b) Représentation du lingot dans le modèle avec un moule transparent; (c) Modèle à 90° utilisé représentant 1/4 de l'ensemble du système de coulée

5.3.3 Configuration du modèle par éléments finis (MEF)

Des simulations tridimensionnelles du remplissage du moule et de la solidification ont été réalisées à l'aide du logiciel par éléments finis THERCAST® de Transvalor S.A., Biot, France (TherCast2.1®, 2021), qui utilise un modèle à deux phases solide-liquide moyené en volume (C Zhang et al., 2018). Le modèle de solidification repose sur la division du système de solidification en plusieurs domaines. Chaque domaine, tel que le moule, la masselotte ou l'ingot, est divisé en maillages d'éléments finis indépendants de forme tétraédrique. Pendant la phase de remplissage, une formulation arbitraire Lagrangien-Eulerien (ALE) a été utilisée pour calculer la convection thermique dans le bain liquide et la zone pâteuse, ainsi que pour suivre l'évolution du volume et de la masse de métal dans le moule au fil du temps. Cependant, pour le calcul de la déformation dans les régions solides, une méthode lagrangienne a été utilisée. Il convient de noter que la modélisation n'a pas pris en compte la sédimentation des grains équiaxes ou la déformation du moule. Pour rationaliser les modèles numériques et minimiser les dépenses de calcul sans compromettre la précision des résultats, plusieurs

hypothèses ont été faites (Ch Beckermann, 2002; Ghodrati et al., 2024; Transvalor, 2017; C. Zhang, A. Loucif, M. Jahazi, & J.-B. Morin, 2022; C Zhang et al., 2018).

1. Le liquide est modélisé comme Newtonien, tandis que la zone pâteuse est caractérisée par un comportement viscoplastique. D'autre part, la zone solide est modélisée avec un comportement élasto-viscoplastique.
2. Le liquide était supposé être incompressible et présenter un comportement Newtonien, tandis que l'écoulement du fluide était présumé être laminaire en raison du faible débit de remplissage associé à la technique de coulée par le bas. Les boucles de convection naturelle induites par la gravité ont été formées en raison de la variation de densité locale, englobant à la fois les flux de convection thermique induits par l'expansion thermique et les gradients de température, ainsi que les flux de convection solutale induits par l'expansion solutale et les gradients de concentration (Lesoult, 2005; Ludwig et al., 2015; Transvalor, 2017; Chunping Zhang, 2020). Dans l'équation de la quantité de mouvement, la masse volumique du liquide est exprimée à l'aide de l'équation:

$$\rho_l = \rho_0 \left(1 - \beta_T (T - T_{ref}) - \sum_{i=1}^n \beta_i (\omega_l^i - \omega_0^i) \right) \quad (5.1)$$

Ici, ρ_l représente la densité du liquide, ρ_0 désigne la densité prise à la température de référence T_{ref} (la température du liquide), β_T et β_i sont respectivement les coefficients de dilatation thermique et solutale. T représente la température, ω_l^i représente la concentration en soluté dans le liquide, et ω_0^i est la concentration en soluté initiale pour l'élément soluté i .

3. La région pâteuse a été conceptualisée comme un milieu solide poreux isotrope saturé de liquide. On suppose que le milieu est saturé, où $f_l + f_s = 1$, avec f_l représentant la fraction volumique du liquide et f_s représentant la fraction volumique du solide. Ceci est sous l'équation suivante:

$$(X) = X_l f_l + X_s f_s \quad (5.2)$$

La relation de Carman-Kozeny fournit la perméabilité isotrope de la zone pâteuse.

$$K_{perm} = \frac{d_2^2 f_l^3}{180(1 - f_l)^2} \quad (5.3)$$

Où d_2 est l'espacement secondaire des bras de dendrite et f_l est la fraction de liquide. La perméabilité isotrope (K_{perm}) dépend de la valeur de l'espacement des bras secondaires (SDAS) et de la fraction de liquide locale. Il est important de noter que l'équation de Carman-Kozeny suppose la présence d'une fraction de liquide, ce qui entraîne une valeur de K_{perm} qui est un nombre réel. Lorsque la fraction de liquide atteint zéro et que le matériau subit une solidification complète, sa perméabilité devient négligeable ou nulle, indiquant une absence d'écoulement de fluide à travers le matériau solide. Tout au long de la solidification, l'épaisseur de la zone pâteuse évolue de manière dynamique, influencée par des facteurs tels que les conditions thermiques et la cinétique de solidification. Le calcul de l'épaisseur de la zone pâteuse à chaque pas de temps prend en compte des variables telles que la fraction volumique de liquides et de solides, la température, la composition des solutés et le temps de solidification local. Initialement, la zone pâteuse est plus mince en raison de taux de refroidissement plus élevés et d'une solidification plus rapide. Cependant, à mesure que la solidification progresse et que le taux de solidification diminue, la zone pâteuse s'épaissit. L'épaisseur de la zone pâteuse diminue à mesure que la chaleur continue d'être extraite du métal en fusion, le faisant se contracter vers les dernières étapes de la solidification, alors que plus de matériau se solidifie.

4. La température locale a été considérée comme une fonction à la fois de la composition de la concentration liquide (ω_l^i) et de la pente du liquidus (m_l^i).

$$T = T_m + \sum_{i=1}^N m_l^i \omega_l^i \quad (5.4)$$

Ici, T_m représente la température de fusion du fer pur, N désigne le nombre d'éléments solutés présents dans l'acier, et m_l^i est la pente du liquidus. Les pentes du solidus et du liquidus sont liées par le coefficient de partition, défini comme suit :

$$k^i = \frac{m_s^i}{m_l^i} \quad (5.5)$$

Ici, m_s^i représente la pente du solidus (dérivée d'un diagramme de phase binaire linéarisé par rapport au fer), et k^i représente le coefficient de partition pour traduire la répartition non homogène de l'élément chimique i entre le solide et le liquide.

5. Le flux de soluté est déterminé en suivant la loi de Fick :

$$j = -D_l^i \nabla \omega_l^i \quad (5.6)$$

D_l^i représente le coefficient de diffusion de l'élément chimique i dans le liquide.

6. Le flux de chaleur a été déterminé selon la loi de Fourier, qui tient compte de la somme des contributions à la convection naturelle et au rayonnement.

$$q = -\lambda \nabla T \cdot n = h(T - T_{ext}) \quad (5.7)$$

$$h = h_{cv} + \varepsilon_r \sigma_r (T + T_{ext}) (T^2 + T_{ext}^2) \quad (5.8)$$

Dans l'équation, n représente le vecteur unitaire normal vers l'extérieur, h est le coefficient de transfert de chaleur, et T_{ext} désigne la température externe. De plus, ε_r représente l'émissivité de l'acier (égale à 0,8), tandis que σ_r est la constante de Stefan-Boltzmann ($\sigma_r=5.776\times10^{-8}$ Wm⁻²K⁻⁴). Le coefficient de transfert de chaleur h change avec le temps ou avec les variations de la température à l'interface entre le métal et le moule, permettant la simulation du contact

ou du détachement (formation d'un espace d'air) entre la pièce et le moule pendant le refroidissement du métal.

7. À l'échelle macroscopique, la diffusion est négligeable dans la phase solide.

8. À l'échelle microscopique, les hypothèses suivantes ont été faites: i) L'équilibre thermomécanique est maintenu à l'interface entre le liquide et le solide; ii) Une diffusion parfaite se produit dans la phase liquide; et iii) le modèle de Brody-Flemings est utilisé pour décrire le processus de diffusion dans la phase solide.

$$\omega_s = k\omega_0 \{1 - (1 - 2\alpha k)f_s\}^{(k-1)/(1-2\alpha k)} \quad (5.9)$$

$$f_s = \left[\frac{1}{(1 - 2\alpha k)} \right] \left\{ 1 - \left[(T_f - T) / (T_f - T_l) \right]^{(1-2\alpha k)/(k-1)} \right\} \quad (5.10)$$

Ici, ω_s représente la concentration en soluté à l'interface solide/liquide en avancement, f_s est la fraction solide, k est le coefficient de partition, et α est le nombre de Fourier.

9. La contraction de solidification est automatiquement calculée à l'aide de l'équation:

$$\Delta\varepsilon_{tr} = \frac{(\rho_l - \rho_s)}{\rho_l} \quad (5.11)$$

Où ρ_s et ρ_l représentent les densités aux températures du solidus et du liquidus, respectivement.

Les calculs thermiques purs et les calculs thermomécaniques couplés sont effectués dans la simulation en résolvant différentes équations gouvernantes avec un pas de temps prescrit. Ces calculs sont réalisés sur la base des hypothèses susmentionnées pour analyser l'écoulement des fluides, la température et la distribution des solutés lors de la solidification du matériau. Les équations gouvernantes utilisées dans le modèle sont détaillées ci-dessous.

Le calcul thermique est effectué en résolvant l'équation générale de conservation de l'énergie en transfert de chaleur.

$$\rho \frac{\partial H}{\partial T} \frac{dT}{dt} - \nabla \cdot (\lambda(T) \nabla T) = 0 \quad (5.12)$$

Ici, ρ (kg/m³) désigne la densité, T (°C) représente la température, λ représente la conductivité thermique, et H représente l'enthalpie spécifique, qui est définie comme suit:

$$\frac{\partial H}{\partial T} = C_p(T) + L_f \frac{\partial f_l(T)}{\partial T} \quad (5.13)$$

Où C_p (J/kg/K) représente la chaleur spécifique, f_l désigne la fraction volumique de liquide, et L_f (J/kg) représente la chaleur latente de fusion spécifique.

La redistribution de chaque soluté i est contrôlée par l'équation de conservation des solutés.

$$\frac{\partial \omega^i}{\partial t} + \nu \cdot \nabla \omega_l^i - \nabla \cdot (f_l D_l^i \nabla \omega_l^i) = 0 \quad (5.14)$$

L'état d'équilibre mécanique est déterminé par l'équation de conservation de la quantité de mouvement, qui est fondamentale en dynamique et signifie la conservation de la quantité de mouvement.

$$\nabla \cdot s - \nabla p + \rho g = \rho \frac{d\nu}{dt} \quad (5.15)$$

Où s représente le tenseur des contraintes de Cauchy, p représente la pression, g représente l'accélération gravitationnelle, et ν désigne la vitesse moyenne.

Pour reproduire la progression du refroidissement du matériau au fur et à mesure qu'il passe de l'état liquide à la zone pâteuse, puis à l'état solide, un modèle constitutif hybride est utilisé. La balance de masse moyenne varie en fonction de l'état du métal.

À l'état liquide, le métal présente un comportement Newtonien et suit l'équation de Navier-Stokes, intégrant des termes qui varient avec la température.

$$\bar{\sigma} = \eta_l(T) \sqrt{3}^2 \dot{\varepsilon} \quad (5.16)$$

Ici, $\bar{\sigma}$ représente la contrainte d'écoulement équivalente de Von Mises, η_l désigne la viscosité dynamique du liquide, T représente la température, et $\dot{\varepsilon}$ représente le taux de déformation plastique équivalent.

Dans un traitement thermo-élasto-viscoplastique des métaux en dessous de la température de solidus (T_s), une formulation lagrangienne est souvent utilisée. La loi II de Kozlowski et al. peut-être reformulée dans ce cadre pour correspondre aux conditions spécifiques de l'état solide.

$$\bar{\sigma} = K_s(T) \bar{\varepsilon}^{n(T)} \dot{\varepsilon}^{m(T)} \quad (5.17)$$

Dans ce contexte, K_s représente la cohérence viscoplastique dans le matériau solide, tandis que $\bar{\varepsilon}$ désigne la déformation plastique équivalente. Les variables n et m correspondent respectivement au coefficient de durcissement par déformation et au coefficient de sensibilité, qui caractérisent la relation entre la contrainte d'écoulement et le taux de déformation.

On distingue deux comportements distincts du métal à l'état pâteux, basés sur une température critique appelée température de cohérence T_{cohe} , qui correspond à une fraction volumique de liquide $f_l = 0.3$.

À l'état pâteux, le métal semi-liquide est traité comme un fluide non newtonien suivant la loi thermo-viscoplastique de Norton-Hoff au-dessus de la température T_{cohe} .

$$\bar{\sigma} = K^{vp}(T) \sqrt{3}^{\dot{\varepsilon}^{m(T)+1}} \dot{\varepsilon}^{m(T)} \quad (5.18)$$

Où K^{vp} représente la cohérence viscoplastique du matériau. Le tenseur du taux de déformation $\dot{\varepsilon}$ est divisé en une composante viscoplastique (non réversible) et une composante thermique.

L'équation de continuité (équation de conservation de la masse) est la suivante :

$$\nabla \cdot v = 3\alpha(T)\dot{T} + \dot{f}_s(T)\Delta\varepsilon_{tr} \quad (5.19)$$

Ici, α représente le coefficient de dilatation thermique linéaire.

Sous la température T_{cohe} , le métal semi-solide avec une faible fraction liquide est supposé suivre un comportement constitutif thermo-élasto-viscoplastique (EVP). Ce comportement est modélisé selon la loi de Perzyna, qui intègre un type de seuil.

$$\bar{\sigma} = \sigma_s + K^{evp}(T) \sqrt{3}^{\dot{\varepsilon}^{n+1}} \dot{\varepsilon}^n \dot{\varepsilon}^m \quad (5.20)$$

Le tenseur du taux de déformation $\dot{\varepsilon}$ est décomposé en une composante élastique, une composante visco-plastique et une composante thermique.

L'équation de continuité (équation de conservation de la masse) est la suivante:

$$\nabla \cdot v = -\left(\frac{\dot{p}}{x} - \frac{\dot{x}}{x^2} p\right) + 3\alpha(T)\dot{T} + \dot{f}_s(T)\Delta\varepsilon_{tr} \quad (5.21)$$

Où, $x = \frac{E}{3(1-2\nu)}$, E est le module de Young (MPa), ν est le coefficient de Poisson.

Les paramètres d'entrée et les conditions aux limites thermiques sont détaillés dans les Tableau 5.6 et Tableau 5.8 d'Appendice I.

5.3.3.1 Critères de formation de la microporosité

La formation possible de porosité au centre dans le modèle de solidification est basée sur les critères de Niyama (Ge et al., 2017; Transvalor, 2017; J. Wang et al., 2012), tels qu'exprimés dans l'équation 5. Il est important de noter que les critères de Niyama ne considèrent pas la taille et la forme précises des porosités, mais permettent de prédire le risque, la possibilité et les zones de formation de porosités lorsque la valeur dépasse l'unité (Ghodrati, Loucif, et al., 2022a; Prafull Patil et al., 2017). Le critère de Niyama est mathématiquement exprimé comme suit (Ghodrati, Loucif, et al., 2022a; Prafull Patil et al., 2017; Transvalor, 2017):

$$Niyama = \frac{\sqrt{\|\dot{T}\|}}{\|\Delta T\|} \quad \text{for } f_l = f_{lNi} \quad (5.22)$$

Le symbole \dot{T} représente le taux de refroidissement et ΔT désigne le gradient de température. De plus, f_l représente la fraction liquide et f_{lNi} est la fraction liquide seuil fixée à $f_{lNi} = 0.3$. Il convient de noter que l'équation de Niyama présentée est l'inverse de l'expression du critère de Niyama trouvée dans certaines publications (Abootorabi et al., 2019; N. Liu et al., 2022; Y. Zhang et al., 2021); par conséquent, dans ce travail, des valeurs de critère élevées indiquent une forte probabilité de formation de micropores.

5.3.3.2 Critères de formation de macroporosité

Le retrait primaire (retrait en tuyau) ou le retrait secondaire (macroporosité) a été estimé en calculant la perte de volume encourue dans la pièce à chaque étape. Cette perte volumétrique est attribuée à la contraction thermique et à la transition des phases liquide à solide. La distribution de cette perte de volume est déterminée en fonction de la progression du front de solidification. Une fraction solide seuil de 60%, $f_{s0} = 0.6$, représentant la limite supérieure au-delà de laquelle la perte de volume est considérée comme négligeable pour le processus de

retrait, a été utilisée, en accord avec la littérature (P Patil et al., 2015; Prafull Patil et al., 2017). Par conséquent, la perte de volume dans les zones liquides et pâteuses, où la fraction solide est inférieure à ce seuil, est incluse dans le calcul du retrait. Le calcul de la variation de volume attribuable au retrait suit les équations 5.23 et 5.24 (Ghodrati, Loucif, Morin, & Jahazi, 2022b; Transvalor, 2017):

$$\Delta V = \int_{t_1}^{t_2} (\Delta \varepsilon_{tr} \dot{f}_s dt + 3\alpha(T(t)) \dot{T}) dt \quad (5.23)$$

$$\Delta \varepsilon_{tr} = -\frac{(\rho_{liquidus} - \rho_{solidus})}{\rho_{liquidus}} \quad (5.24)$$

Dans l'expression ci-dessus, $[t_1, t_2]$ représente l'intervalle de temps actuel, et $\Delta \varepsilon_{tr}$ signifie la variation relative de volume résultant de la transition de phase complète entre la température liquidus et solidus. Ici, $\rho_{liquidus}$ et $\rho_{solidus}$ représentent respectivement les densités aux températures liquidus et solidus. De plus, \dot{f}_s représente le taux de changement de la fraction solide, $\alpha(T(t))$ est le coefficient de dilatation linéaire dépendant de la température, et \dot{T} représente le taux de changement de la température. La diminution de hauteur pour chaque incrément dans le niveau de retrait est déduite de ΔV de la manière suivante (Transvalor, 2017):

$$\Delta h = \frac{\Delta V}{S} \quad (5.25)$$

Dans ce contexte, S représente la surface définie par la fraction solide f_{s0} .

5.3.4 Validation du modèle

Le processus de validation du modèle comprenait des mesures expérimentales telles que des évaluations de température, une inspection par ressuage (DPI) et des analyses chimiques par spectrométrie de masse à émission optique. Les variations temporelles prédictes de la température sur la surface externe du moule ont été comparées aux valeurs mesurées obtenues à partir des TC, comme illustré dans la Figure 5.1a et détaillé dans le Tableau 5.1. Après la

simulation, des mesures de température sur la surface externe du moule ont été effectuées à l'aide de sept capteurs (S1-S7), chacun correspondant aux thermocouples utilisés lors de l'expérience. Ces capteurs étaient positionnés de manière identique à l'installation expérimentale; par exemple, le capteur 1 (S1) était placé au même endroit que le thermocouple 1 (TC1). La Figure 5.5 montre la comparaison entre les mesures de température prévues et expérimentales. Dans la Figure 5.5, la phase initiale montre une augmentation successive rapide de la température, indicative de l'interaction séquentielle entre le métal en fusion et le moule pendant le processus de coulée. Par la suite, cette tendance à la hausse de la température ralentit en raison de la dissipation de la chaleur à partir de la paroi du moule. Environ 4.5 à 5 heures après avoir atteint leurs pics de température respectifs, une baisse est observée. Notamment, en raison de la conductivité réduite du panneau latéral isolant dans la masselotte, la tendance à la hausse de la température est tempérée, ce qui entraîne les valeurs de pic de température les plus basses enregistrées par TC1, TC2 et TC3. Une corrélation claire entre les valeurs prédites par le modèle et les valeurs mesurées est observée, en particulier dans la zone de la masselotte. Les différences observées entre les températures enregistrées par les thermocouples et celles prédites par les simulations, qui vont de 20 à 50 °C, peuvent être attribuées à des incertitudes dans les valeurs précises de la conductivité thermique à la fois du moule en fonte et des carreaux réfractaires utilisés dans le modèle informatique. La conductivité thermique du moule en fonte a été obtenue à partir de la base de données JMatPro® (Transvalor, 2017) et celle des réfractaires à partir de la fiche technique du fabricant. Les paramètres thermophysiques des composants de l'installation de coulée, y compris la densité et la conductivité thermique, sont indiqués dans le Tableau 5.7 de l'annexe I.

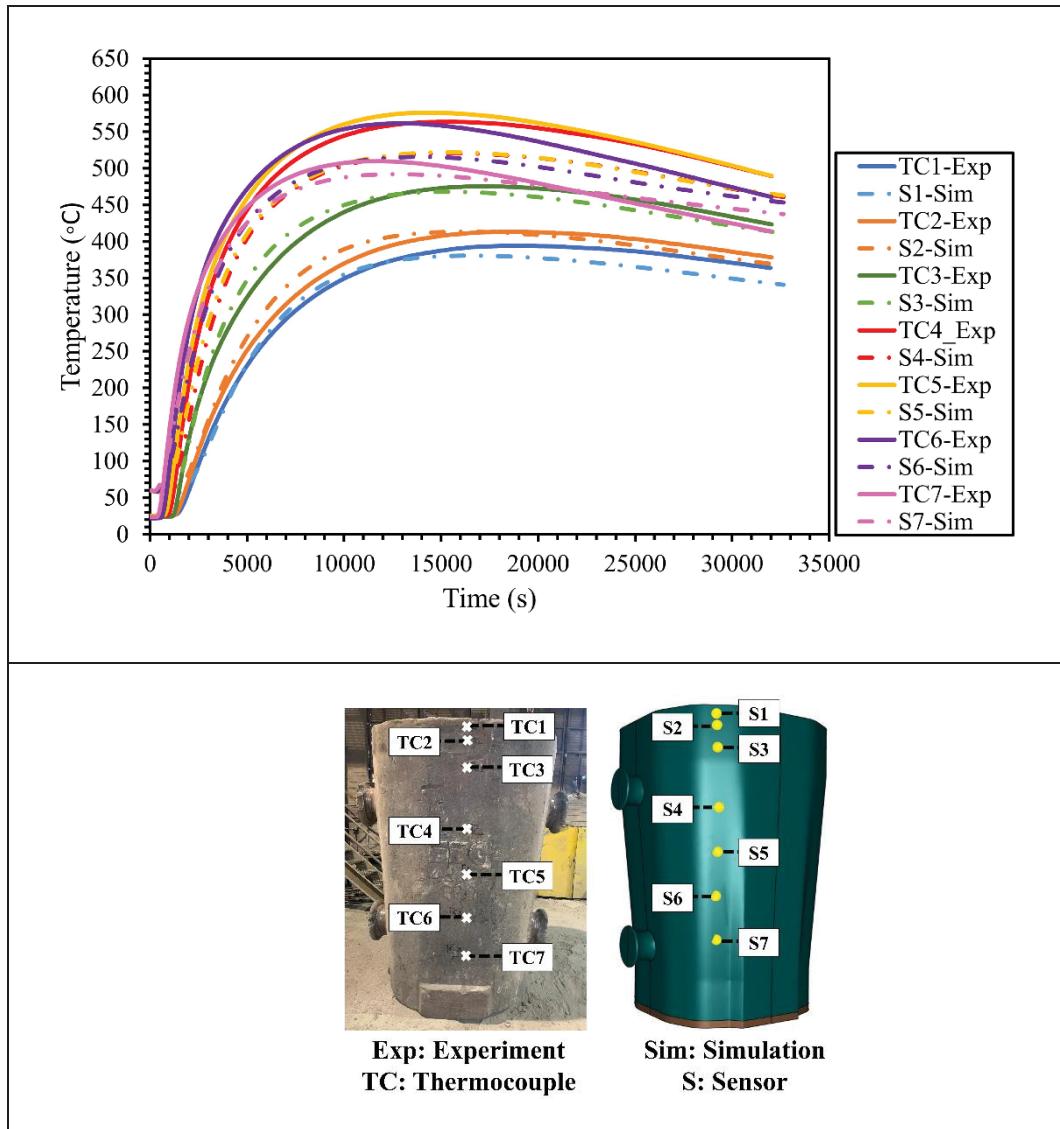


Figure 5.5 Profils de température sur la surface extérieure du moule pendant la solidification pour un lingot de 12 MT : comparaison entre les mesures expérimentales avec les thermocouples (TC) et les températures prédites dérivées de la simulation thermomécanique utilisant des capteurs (sensors)

Après la simulation, le calcul de la valeur de Niyama a été effectué. La Figure 5.6 fournit une représentation visuelle de la probabilité et de la distribution spatiale de la formation de la microporosité basée sur les résultats de la simulation. La microporosité est observée à une profondeur de 1144 mm à partir de la surface supérieure de la partie supérieure de la masselotte, dépassant le seuil de Niyama de 1. Ces résultats concordent avec les résultats de

l'inspection par ressuage (DPI). Sur la Figure 5.3, la présence de microporosité est évidente dans les blocs de la ligne médiane sur la demi-section longitudinale du lingot de 12MT, située à une distance de 1165 mm de la surface supérieure.

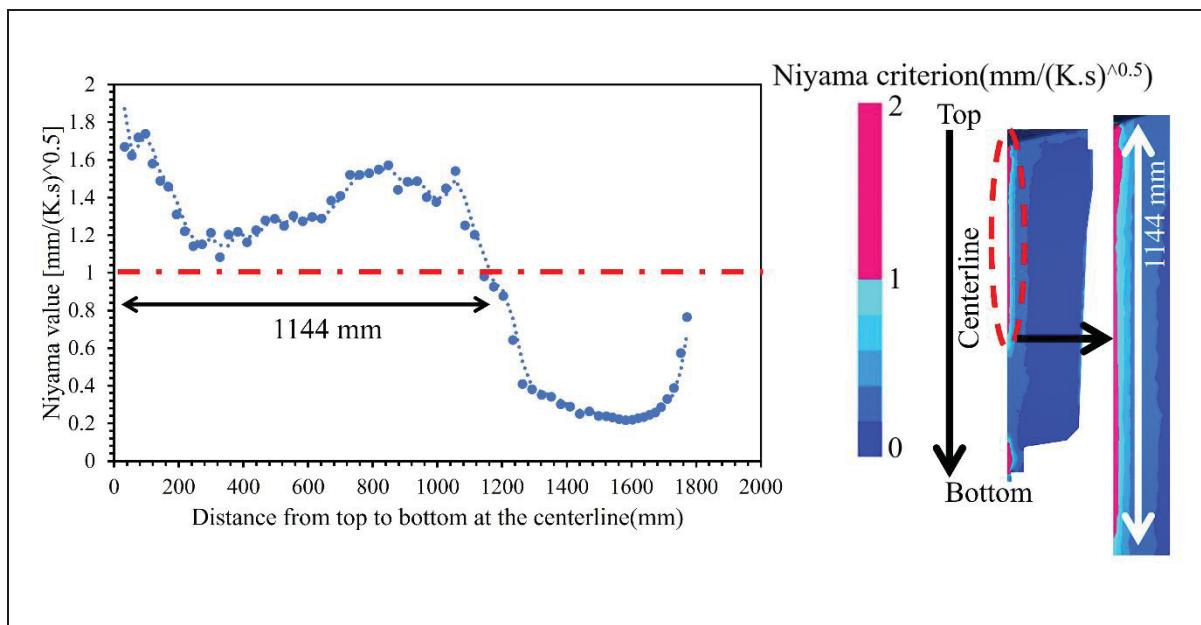


Figure 5.6 Risque prévu de formation de microporosités à la ligne centrale du lingot de 12MT, les critères de valeur Niyama étant illustrés par la ligne pointillée rouge

De plus, la simulation a englobé le calcul du rapport de macroségrégation pour le carbone à divers endroits, comprenant les positions en haut, au milieu, en bas et sur la ligne centrale. Les rapports de macroségrégation obtenus par simulation ont ensuite été comparés aux résultats expérimentaux correspondants aux mêmes positions. Les détails de l'analyse comparative, confirmant la validité du modèle de macroségrégation, sont rapportés dans notre publication précédente (Ghodrati, Baiteche, et al., 2022; Ghodrati et al., 2024). La Figure 5.7 illustre la macroségrégation du carbone, comparant les résultats de simulation (à gauche) avec les résultats expérimentaux (à droite) à la fin de la solidification. Tant la simulation que l'expérience indiquent la présence de ségrégation positive au niveau de la masselotte et de ségrégation négative au niveau du bas. De plus, une zone enrichie en soluté (représentée en jaune) entre la paroi et le centre, ainsi qu'une zone appauvrie en soluté avec une ségrégation négative adjacente à la paroi de la masselotte, sont observées à la fois dans l'expérience et dans

la simulation. La distance de la paroi à la ségrégation négative conique est estimée à 228 mm et 231 mm dans l'expérience et la simulation, respectivement, au niveau du corps de lingot de 1/4, comme illustré dans la Figure 5.7. De même, ces valeurs sont mesurées à 248 mm et 263 mm dans l'expérience et la simulation, respectivement, au niveau du corps de lingot de 2/4. La profondeur de la ségrégation positive est observée à 296 mm et 286 mm dans l'expérience et la simulation, respectivement. Ces résultats indiquent un accord favorable dans l'emplacement de la ségrégation positive et négative entre l'expérience et la simulation.

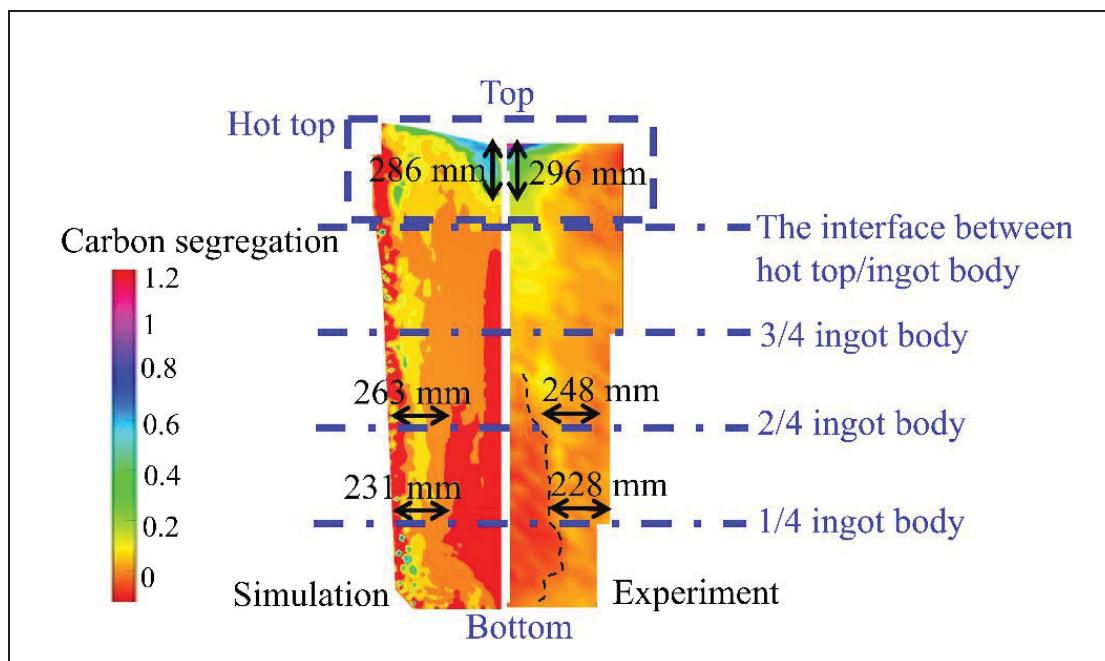


Figure 5.7 Modèle de macroségrégation du carbone par simulation (à gauche) et expérience (à droite)

5.3.5 Influence de la géométrie de la masselotte

Quatre scénarios distincts ont été pris en compte dans la présente étude. Ces scénarios, détaillés dans le Tableau 5.2, ont été conçus pour apporter des modifications géométriques susceptibles de modifier le régime thermique de la masselotte et le rapport de masse, défini comme le rapport du poids de la fusion dans la masselotte sur le poids total de la fusion. Le Design Original (OD), représente la référence avec un rapport de masse de 21.35% (Figure 5.8a). Les Nouveaux Designs sont nommés ND1 à ND4 avec les caractéristiques suivantes:

ND1: le rapport de masse est réduit à 11.36% en réduisant la hauteur de la masselotte de 381 mm à 181 mm (Figure 5.8b).

ND2: la hauteur de la masselotte a été augmentée de 381 mm à 546 mm, le rapport de masse de 21.35% à 29%, et la hauteur du panneau latéral de 203 mm à 368 mm (Figure 5.8c). Les changements susmentionnés étaient censés augmenter le rapport de masse et la température moyenne de la masselotte.

ND3: L'amélioration du régime thermique de la masselotte a été encore renforcée en introduisant un panneau latéral supplémentaire sous celui existant et en remplaçant le matériau du panneau latéral supérieur par un nouveau, avec une conductivité thermique plus faible (Figure 5.8d).

ND4: La hauteur de la masselotte a été augmentée vers le corps, accompagnée d'une réduction de la taille du corps (Figure 5.8e).

Il est à noter que la taille du corps de lingot est restée inchangée pour ND1, ND2 et ND3.

Tableau 5.2 Caractéristiques des configurations de conception étudiées

Concept ions	Hauteur de la masselotte	Rapport de masse	Hauteur du panneau latéral	Conductivité thermique
OD	381 mm	21.35%	203 mm	1.23 W/(m.K)
ND1	181 mm	11.36%	203 mm	1.23 W/(m.K)
ND2	546 mm	29%	368 mm	1.23 W/(m.K)
ND3	381 mm	19.87%	Haut: 203 mm	Haut: 0.45 W/(m.K)
			Bas: 177 mm	Bas: 1.23 W/(m.K)
ND4	546 mm	29.5%	406mm	1.23 W/(m.K)

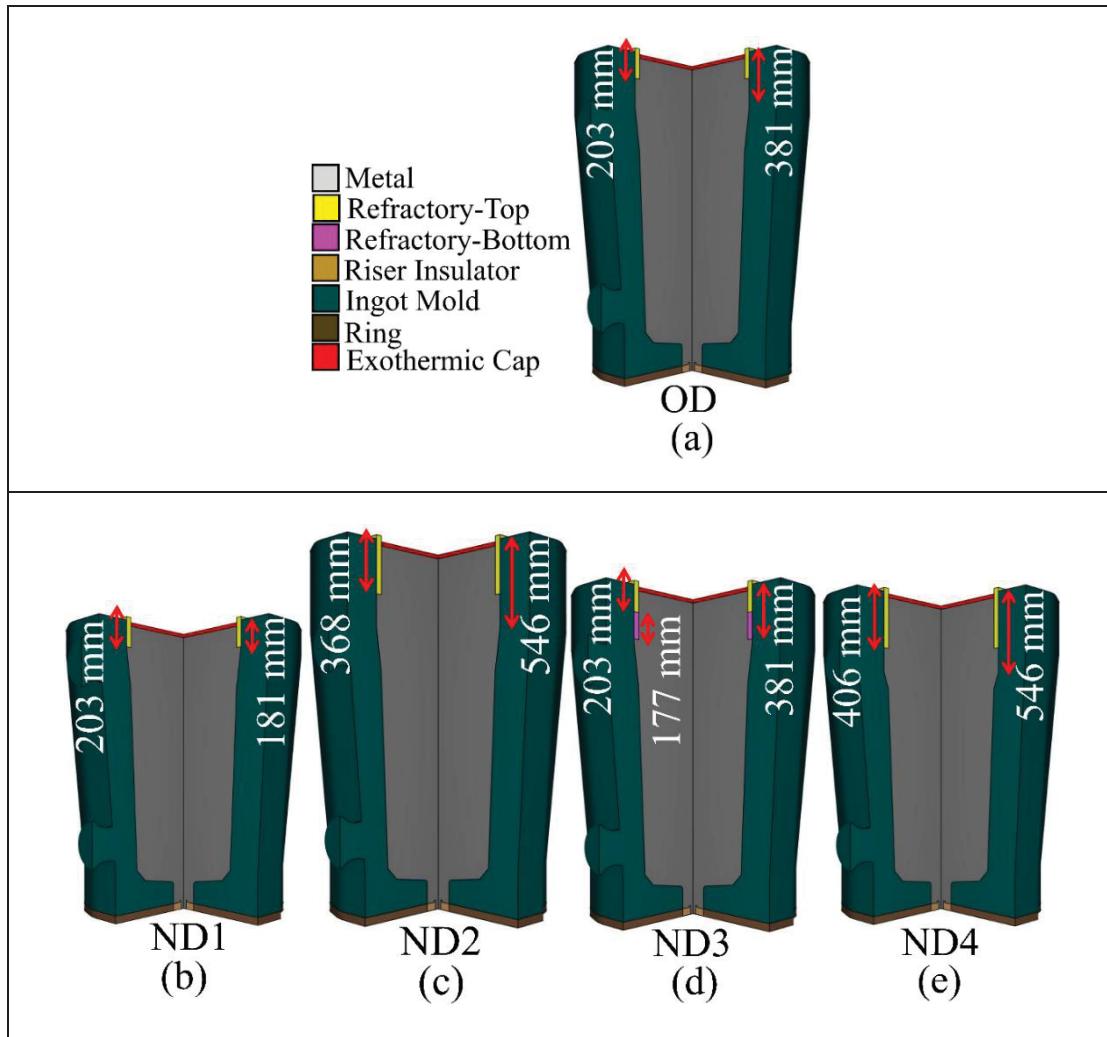


Figure 5.8 Les conceptions étudiées: (a) OD: originale ou de référence, (b) ND1: réduction de la hauteur de la masselotte, (c) ND2: augmentation de la hauteur de la masselotte et de la hauteur des panneaux latéraux, (d) ND3: utilisation de deux réfractaires, (e) ND4: augmentation de la hauteur de la masselotte vers le corps

5.4 Résultats et discussions

5.4.1 Impact des variations de la masselotte sur la TCE

Le code THERCAST® utilisé dans cette étude ne révèle pas explicitement la TCE. Cependant, il a été rapporté que la TCE pourrait être approximée avec une bonne précision en considérant la relation entre le gradient thermique devant le front de solidification, la vitesse de

déplacement du front de solidification et la fraction solide (Prafull Patil et al., 2017; Straffelini et al., 2011). Les données ci-dessus peuvent être extraites de la simulation et, comme décrit ci-dessous, utilisées pour déterminer la TCE dans la présente étude. Pour anticiper la position de la TCE dans les conceptions considérées, la vitesse moyenne de solidification a été évaluée au front de solidification dans les positions inférieure, médiane et supérieure du corps de lingot pour chaque conception considérée pendant la solidification, comme indiqué dans la Figure 5.9. La Figure 5.9a illustre le positionnement des zones inférieure, médiane et supérieure à des hauteurs respectives de 253 mm, 790 mm, et 1351 mm, mesurées à partir du bas du lingot. Le taux de solidification, tracé en fonction de la fraction solide, a généralement montré une tendance à la baisse, suivie d'un minimum puis d'une augmentation (Figure 5.9b,c,et d). La variation dans la masselotte a entraîné une extraction de chaleur réduite pendant la solidification, entraînant une réduction du taux de solidification, particulièrement remarquable pour les configurations ND3 et ND4 par rapport à OD. Cela contraste avec le résultat pour ND1, où le taux de solidification a augmenté par rapport à OD, en raison d'une réduction de la hauteur de la masselotte. Le point d'inflexion, indiqué par une flèche, correspond à la TCE (Figure 5.9b,c,et d). Ces résultats sont en accord avec ceux rapportés par Patil et al, (P Patil et al., 2015; Prafull Patil et al., 2017) qui ont également observé une telle tendance dans un lingot de 4 MT.

Les points d'inflexion observés dans la Figure 5.9 peuvent s'expliquer par l'interaction dynamique entre le taux de solidification et le gradient thermique, qui influent sur la structure de la coque. La Figure 5.10 illustre le gradient thermique devant le front de solidification pour différentes positions du lingot pour chacune des nouvelles conceptions de masselotte. On peut voir que le gradient thermique a diminué pendant la solidification pour les quatre conceptions de masselotte étudiées. Au cours des premiers stades de solidification, un gradient de température élevé et le taux de refroidissement rapide au niveau de la paroi du moule ont conduit à la formation de grains équiaxes refroidis. Les Figure 5.9 et Figure 5.10 montrent que le gradient thermique et le taux de solidification atteignent un maximum lorsque la fraction solide est comprise entre 10 % et 20 % pour chaque courbe. À mesure que la solidification progressait, tant le gradient de température que le taux de solidification diminuaient

progressivement vers le cœur du lingot, une tendance attendue car la solidification demeure colonnaire. Cette combinaison d'un gradient thermique élevé et d'un taux de refroidissement constant de la surface du lingot à son cœur favorise la croissance des grains colonnaires. Dans les dernières étapes de la solidification, à mesure que le gradient thermique devant le front de solidification diminuait, la force motrice de la structure dendritique colonnaire diminuait, ce qui entraînait une augmentation du taux de solidification. L'augmentation de la vitesse de solidification entraîne un sous-refroidissement accru au niveau du front de croissance principal, favorisant également la croissance équiaxe (O'Reilly, 2016). Cette solidification rapide, associée à un taux de refroidissement élevé, génère plus de sites de nucléation pour la solidification, facilitée par les bras dendritiques cassés servant de sources de nucléation. Par conséquent, la nucléation de nouveaux grains est facilitée par plus de sites de nucléation fonctionnant à un sous-refroidissement plus faible, comme cela a également été rapporté par Straffelini et al., (Straffelini et al., 2011) et Patil et al., (Prafull Patil et al., 2017). L'augmentation significative des sites de nucléation entraîne la formation d'une structure équiaxe au cœur du lingot. La taille des grains équiaxes est gouvernée par le taux de solidification, la composition de l'alliage et sa thermodynamique ainsi que le gradient de température, contribuant ainsi à la formation de la limite de la TCE (O'Reilly, 2016; Prafull Patil et al., 2017; Straffelini et al., 2011). Basé sur l'analyse ci-dessus, il pourrait être affirmé que le point d'inflexion observé dans la courbe du taux de solidification correspond à la TCE.

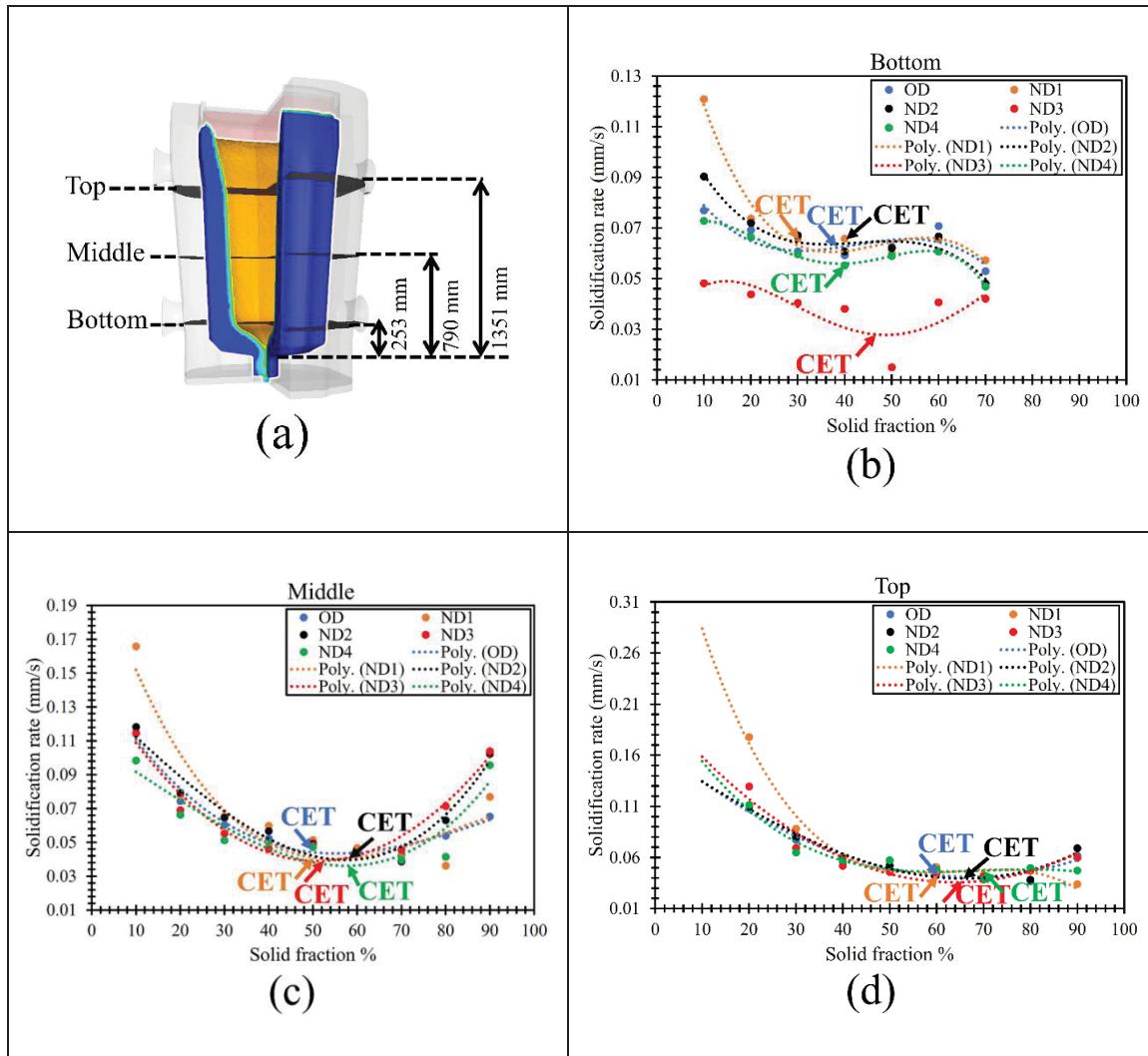


Figure 5.9 Le taux de solidification (mm/s) par rapport au pourcentage de fraction solide a été tracé pour différents conceptions, avec (a) Les emplacements des zones inférieure, moyenne et supérieure indiqués, (b) La zone inférieure, (c) La zone médiane, et (d) La zone supérieure

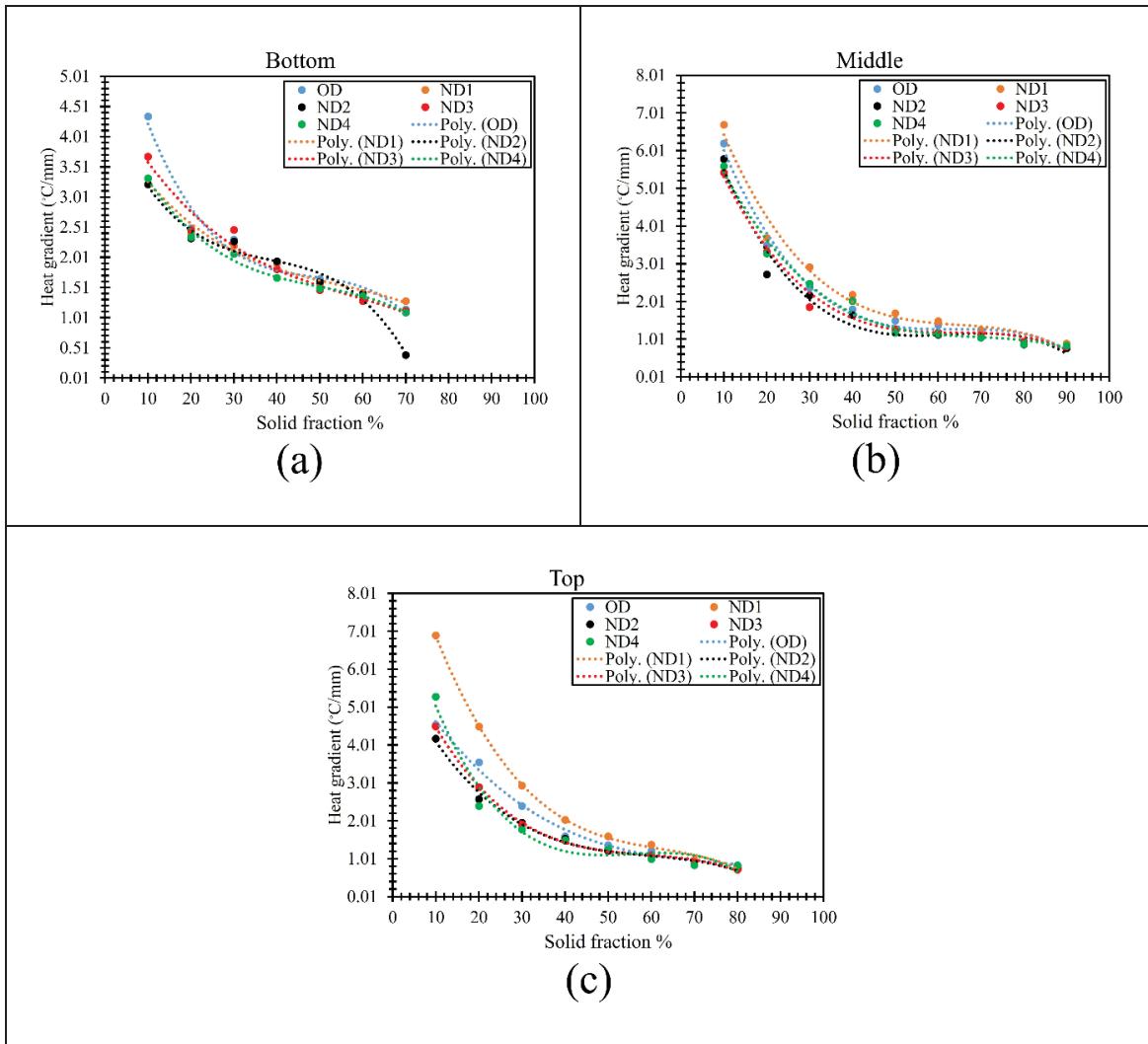


Figure 5.10 Le gradient thermique dans le front solide ($^{\circ}\text{C}/\text{s}$) par rapport au pourcentage de fraction solide a été tracé pour différentes conceptions aux (a) Zones Inférieure, (b) Moyenne, et (c) Supérieure, comme mentionné dans la Figure 5.9a

La modification de la configuration de la masselotte a entraîné un déplacement du point de TCE vers le centre du lingot dans ND2, ND3 et ND4 en raison de modifications des conditions de solidification, notamment du gradient de température, du taux de solidification et du taux de refroidissement. Selon les résultats présentés dans le Tableau 5.3, Tableau 5.4, et Tableau 5.5, le TCE s'est produit jusqu'à 46% (dans ND3), 58% (dans ND2 et ND4) et 70% (dans ND4) de l'épaisseur de la coque solidifiée au fond, au milieu et en haut du lingot, respectivement. Il convient de mentionner que les valeurs d'épaisseur de la coque solidifiée ont été estimées à

partir des fractions volumiques de liquide et de solide, calculées par le modèle lors du processus de solidification. L'épaisseur de la coque solidifiée de la surface du moule jusqu'à la position du TCE a été évaluée pour chaque conception, avec des valeurs détaillées fournies dans les Tableau 5.3, 4, et 5. La différence d'épaisseur de la coque solidifiée entre l'OD et chaque nouvelle configuration a été calculée pour le bas, le milieu et le haut du lingot, comme illustré dans les emplacements montrés à la Figure 5.9a. L'extension maximale de l'épaisseur de la coque solidifiée au point CET s'est élevée à 56 mm, 63 mm et 60 mm par rapport à l'OD au bas, au milieu et en haut du lingot, respectivement (voir Tableau 5.3, Tableau 5.4, et Tableau 5.5). Ainsi, la configuration de la masselotte, y compris le rapport de masse et le régime thermique, a impacté la structure finale et les hétérogénéités chimiques en modifiant la position du TCE. Les résultats ont révélé que le point CET se déplaçait vers la surface de la paroi avec une diminution du rapport massique et de la hauteur de la masselotte (ND1), et vers le cœur du lingot avec une augmentation du rapport massique, de la hauteur de la masselotte et du régime thermique de la masselotte, incluant l'utilisation d'une isolation supplémentaire et l'augmentation de la hauteur des panneaux latéraux (ND2, ND3 et ND4). Ces déplacements de la position du CET ont considérablement influencé l'homogénéité de la composition chimique et la qualité de la structure finale du lingot, comme discuté dans les sections suivantes.

Tableau 5.3 Épaisseur solide et fraction solide à la position de la TCE au fond

Fond		
Conceptions	TCE (pourcentage de l'épaisseur de la coquille solidifiée)	Épaisseur de la coquille solidifiée (mm) jusqu'à la TCE
OD	38 %	179 mm
ND1	30 %	141 mm
ND2	40 %	200 mm
ND3	46 %	235mm
ND4	40 %	196 mm

Tableau 5.4 Épaisseur solide et fraction solide à la position du TCE au milieu

Milieu		
Conceptions	TCE (pourcentage de l'épaisseur de la coquille solidifiée)	Épaisseur de la coquille solidifiée (mm) jusqu'à la TCE
OD	50 %	201 mm
ND1	50 %	206 mm
ND2	58 %	264 mm
ND3	53 %	235 mm
ND4	58 %	260 mm

Tableau 5.5 Épaisseur solide et fraction solide à la position du TCE en haut

Haut		
Conceptions	TCE (pourcentage de l'épaisseur de la coquille solidifiée)	Épaisseur de la coquille solidifiée (mm) jusqu'à la TCE
OD	60 %	239 mm
ND1	60 %	218 mm
ND2	66 %	286 mm
ND3	65 %	280 mm
ND4	70 %	299 mm

5.4.2 Critère de temps de solidification

Le temps de solidification joue un rôle crucial dans le processus de solidification, influençant à la fois la ségrégation et la porosité de retrait. Dans les cas où le temps de solidification est trop court, l'alimentation vers la ligne centrale du lingot est insuffisante, tandis qu'un temps de solidification excessif peut entraîner une ségrégation sévère (Qian et al., 2015). Le temps de solidification est influencé par le taux de refroidissement, où un taux de refroidissement plus élevé entraîne une solidification rapide ou un temps de solidification plus court. Par conséquent, le temps de solidification impacte la formation de caractéristiques microstructurales telles que la TCE, la taille des grains et l'espacement des bras dendritiques (A. F. Ferreira, Chrisóstimo, Sales, Garção, & de Paula Sousa, 2019). Conformément à Chvorinov, il a été recommandé que le temps de solidification de la masselotte dépasse celui du corps à alimenter. Qian et al. (Qian et al., 2015) ont également proposé que l'analyse du processus de solidification puisse être traduite en calcul du temps de solidification en prenant en compte tous les paramètres de la masselotte et du moule. En concevant un rapport de temps

de solidification approprié (t_f/t_b , où t_f est le temps de solidification total de la masselotte, t_b est le temps de solidification du corps du lingot), ils ont affirmé que la détermination des paramètres de la masselotte pour différents lingots devient possible. Les chercheurs ont identifié une plage appropriée pour la valeur t_f/t_b pour un lingot d'acier de 100 tonnes ; cependant, ils ont reconnu que cette valeur dépend de facteurs tels que la qualité de l'acier, le processus de coulée et le poids du lingot (Qian et al., 2015). La configuration de la masselotte joue un rôle crucial en influençant des facteurs tels que le taux de refroidissement, le taux de solidification et le gradient thermique, qui impactent collectivement le temps de solidification global. Dans la présente étude de cas, où le régime thermique et la géométrie de la masselotte sont modifiés dans différentes configurations, l'approche du rapport de Temps de Solidification Total (TST) est utilisée pour le lingot de 12 tonnes. Ce critère proposé vise à servir de principe directeur pour les futures investigations sur la conception des masselottes. Le Tableau 5.6 présente le temps de solidification total pour chaque conception, représentant la durée depuis le début de la simulation jusqu'à l'atteinte de la température de solidus. Généralement, le temps de solidification total, en considérant à la fois la masselotte et le corps, a augmenté d'environ 1h:27min, 1h:37min, et 1h:48min dans ND2, ND3, et ND4, respectivement, tandis qu'il a diminué jusqu'à 16 minutes dans ND1 par rapport à OD. Ces résultats soulignent l'influence significative de la configuration de la masselotte sur la cinétique de solidification. Comme mentionné précédemment, la Transition de Colonnaire à Équiaxe (TCE) s'est étendue à 63 mm, 56 mm, et 60 mm dans ND2, ND3, et ND4, respectivement, tandis qu'elle a été réduite à 38 mm par rapport à OD dans ND1. D'après ces résultats, une simple diminution de 16 minutes du temps de solidification a conduit à une réduction de la longueur de la TCE d'environ 38 mm. Par conséquent, la diminution du temps de solidification total résultant d'une réduction du volume de la masselotte a eu un impact plus important sur la position de la TCE qu'une augmentation du temps de solidification total. Cette observation souligne l'impact significatif du temps de solidification sur le positionnement de la TCE. Même une réduction mineure du temps de solidification total, aussi petite que 16 minutes, entraîne une diminution notable, d'environ 21%, de la longueur de la TCE.

Tableau 5.6 Temps de solidification total pour chaque configuration à la fin de la solidification

Conceptions	Temps de solidification total
OD	5h:10min
ND1	4h:54min
ND2	6h:37min
ND3	6h:47min
ND4	6h:58min

Par la suite, le temps total de solidification de la masselotte et du corps a été estimé séparément le long de la ligne centrale, marquant la position finale où le métal fondu se solidifie. Le rapport TST a été calculé en reliant le temps de solidification dans la masselotte à celui dans le corps ($TST\ ratio = \frac{TST_h}{TST_b}$ où TST_h indique le temps total de solidification dans la masselotte et TST_b représente le temps total de solidification dans le corps de la lingotière). La Figure 5.11 illustre les résultats du rapport TST ratio chaque conception à la fin du processus de solidification ($T_{nominal\ solidus}=1445\ ^\circ C$). Sur la base des résultats obtenus, le rapport TST ratio présentait des valeurs d'environ 1.048, 1.002, 1.335, 1.227, et 1.424 dans OD, ND1, ND2, ND3, et ND4, respectivement. Il a été observé qu'une augmentation du temps de solidification est corrélée à une augmentation du rapport TST ratio. L'augmentation du rapport TST ratio confirme que le temps nécessaire pour la solidification de la masselotte dépasse celui du corps. La valeur spécifique du rapport TST ratio variait en fonction du type de variation appliquée à la masselotte en raison des différences de cinétique de solidification. Pour déterminer quel TST ratio signifie une qualité de lingot supérieure, l'évaluation de la microporosité de rétreinte, de la cavité de rétreinte et de la macrosegrégation a été réalisée pour chaque conception, comme détaillé dans la section suivante.

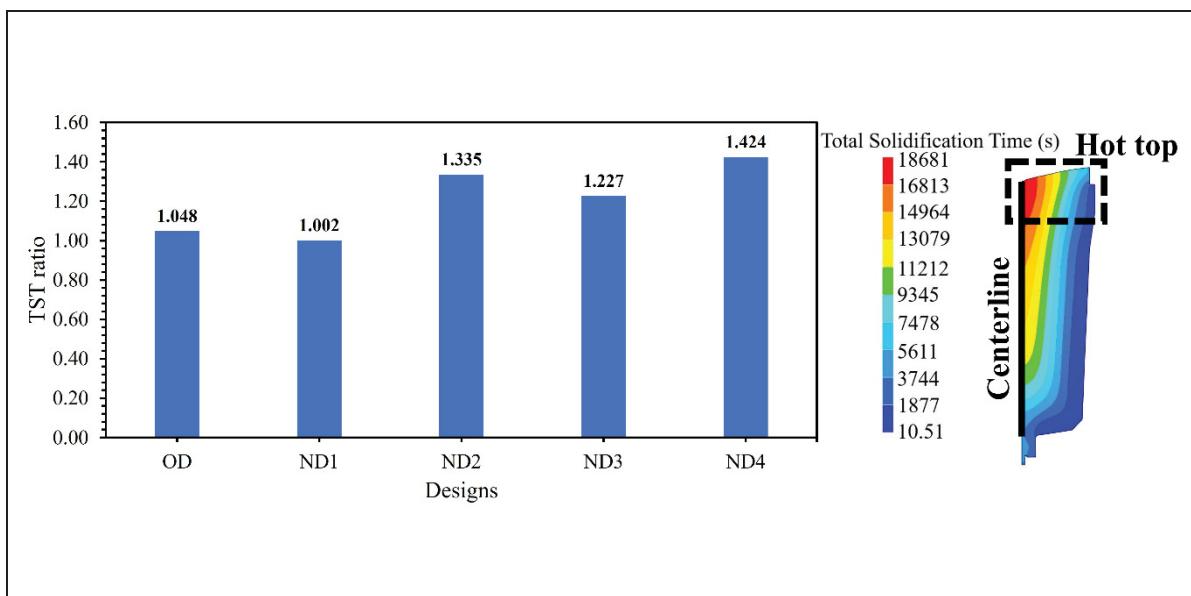


Figure 5.11 Ratio du temps total de solidification (entre la masselotte et le corps) pour chaque conception

5.4.2.1 La microporosité et la TCE

Contrôler les défauts, tels que la porosité de rétraction, est un aspect critique pour garantir la qualité des grands lingots d'acier (Ge et al., 2017). Les porosités de retrait importantes observées le long de la ligne centrale, avec des longueurs avoisinant les deux mètres, soulignent le rôle critique de la dynamique de l'alimentation en matière fondue dans la région centrale de l'écoulement et son impact ultérieur sur le volume de la porosité de retrait (Abootorabi et al., 2019; Qian et al., 2015). Bien que le mécanisme de formation de la rétraction inclue le flux de chaleur, le flux de masse, et d'autres phénomènes complexes tels que la contraction de solidification, le mouvement du métal liquide, la ségrégation d'alliage, l'évolution de la microstructure, ainsi que les contraintes thermiques et mécaniques, il a été rapporté que le calcul thermique pur fournit une prédition fiable de la formation de la porosité de rétraction (Transvalor, 2017; J. Wang et al., 2012). Dans le présent travail, les critères de Niyama associés au gradient thermique devant le front de solidification et au taux de refroidissement ont été utilisés pour prédire la porosité centrale, et les résultats sont rapportés dans la Figure 5.12. Les résultats indiquent une probabilité plus faible de formation de microporosité, notamment jusqu'à 800 mm sous la surface de la masselotte dans ND2, ND3 et ND4, soulignant les avantages potentiels de configurations spécifiques de la masselotte pour

minimiser de tels défauts. De plus, des valeurs de Niyama allant jusqu'à 1.57, 1.78, 1.5, 1.5, et 1.56 dans OD, ND1, ND2, ND3, et ND4, respectivement, ont été atteintes, offrant des indications quantitatives sur le niveau de risque de formation de microporosité.

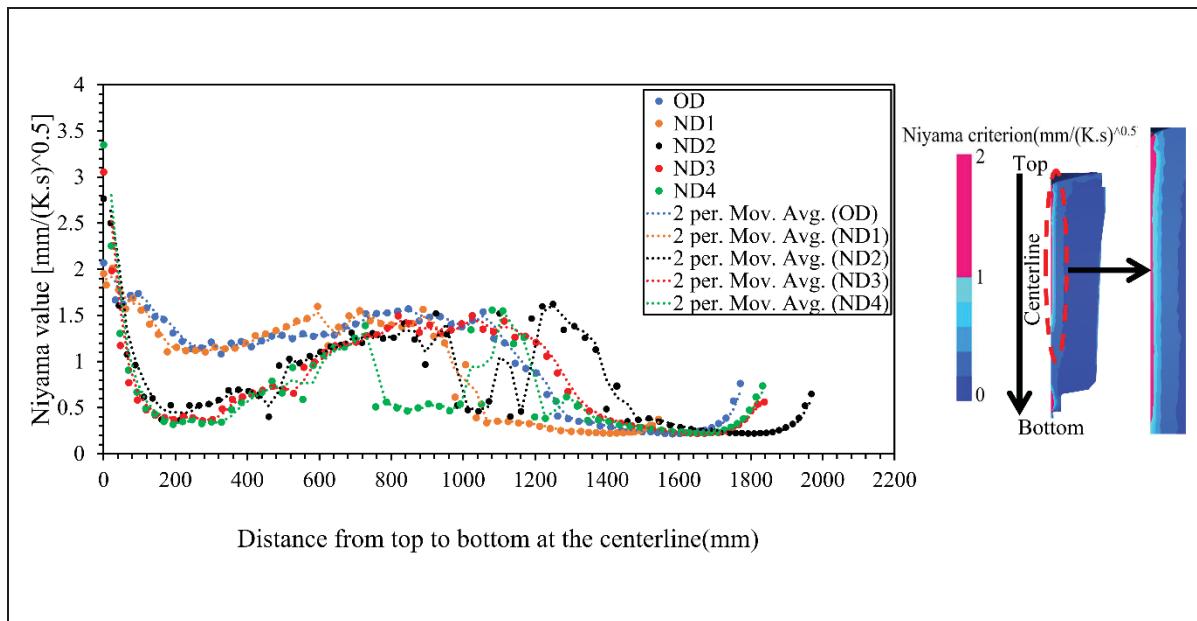


Figure 5.12 Risque prédict de formation de microporosité sur la ligne centrale du lingot de 12 MT pour chaque configuration

La corrélation entre la dynamique d'alimentation en métal fondu et la TCE est fondamentale, car leur impact collectif façonne le processus de solidification et la microstructure résultante. La gestion efficace de l'alimentation en métal fondu a le potentiel d'influencer les gradients thermiques et les schémas d'écoulement du fluide à l'intérieur du lingot pendant la solidification. Ces facteurs dictent de manière complexe l'emplacement et le moment de formation de la TCE. Les modifications dans les schémas d'écoulement du fluide, induites par la dynamique d'alimentation en métal fondu, peuvent affecter significativement la dispersion des gaz et des impuretés dans le métal en cours de solidification. Pour la configuration ND1, avec son volume distinct de masselotte, une solidification rapide s'est produite, entraînant une alimentation insuffisante en métal fondu, ce qui a conduit à une formation plus précoce de la TCE par rapport à la configuration OD. Ce début précoce de la TCE était associé à une augmentation de la formation de microporosité dans la ligne centrale. Ce scénario souligne le

lien critique entre la dynamique d'alimentation en métal fondu, le moment de la TCE et l'apparition de la microporosité.

La Figure 5.13 présente le contour de Niyama pour chaque conception, avec des zones roses indiquant des emplacements potentiels pour la formation de microporosité. Les résultats démontrent que les altérations de la configuration de la masselotte ont influencé le motif de dispersion de la microporosité dans la ligne centrale. Une microporosité continue est observée dans OD et ND1, tandis que ND2, ND3 et ND4 présentent des emplacements séparés avec un potentiel de formation de microporosité. En mesurant la profondeur de la microporosité dans la ligne centrale du lingot depuis la surface supérieure, on obtient des valeurs de 1144 mm, 957 mm, 1374 mm, 1241 mm, et 1177 mm dans OD, ND1, ND2, ND3, et ND4, respectivement. La ligne continue de microporosité dans le centre se transforme en zones séparées avec un temps de solidification accru dans les différentes conceptions. Le pourcentage de la zone sans risque de formation de microporosité dans la ligne de dispersion est calculé comme suit:

$$\% \text{ Zones sans risque de porosité dans la ligne centrale du lingot} = ((\text{La longueur des zones sans porosité dans la ligne exposée à la formation de porosité}) / (\text{La longueur totale de la ligne centrale exposée à la formation de porosité})) \times 100$$

Selon la Figure 5.14, le pourcentage de zones sans risque de formation de microporosité atteint jusqu'à 45%, 43%, et 71% dans ND2, ND3, et ND4, respectivement.

Le calcul en pourcentage dans la Figure 5.14 offre une perspective quantitative sur l'efficacité de configurations spécifiques de masselotte dans la réduction de la microporosité. Ces résultats indiquent qu'une augmentation de 8% du rapport de masse de lingot et une augmentation de la hauteur des panneaux latéraux réfractaires ont entraîné une diminution des taux de refroidissement, des gradients de température et des vitesses de solidification (ND2 et ND4). Le temps de solidification plus long et l'amélioration de l'alimentation en liquide vers la ligne centrale du lingot ont entraîné une probabilité moindre de formation de microporosité, contribuant à une qualité de lingot globalement supérieure. De plus, dans le cas de ND3, où

seul le régime thermique a été modifié en couvrant complètement la masselotte, une réduction significative de la formation de microporosité a été observée. Les résultats rapportés dans les Figure 5.12 et Figure 5.13 révèlent une corrélation claire entre une isolation insuffisante dans la masselotte et la formation de porosités centrales dans des zones avec des vitesses de solidification élevées (Tashiro et al., 1983).

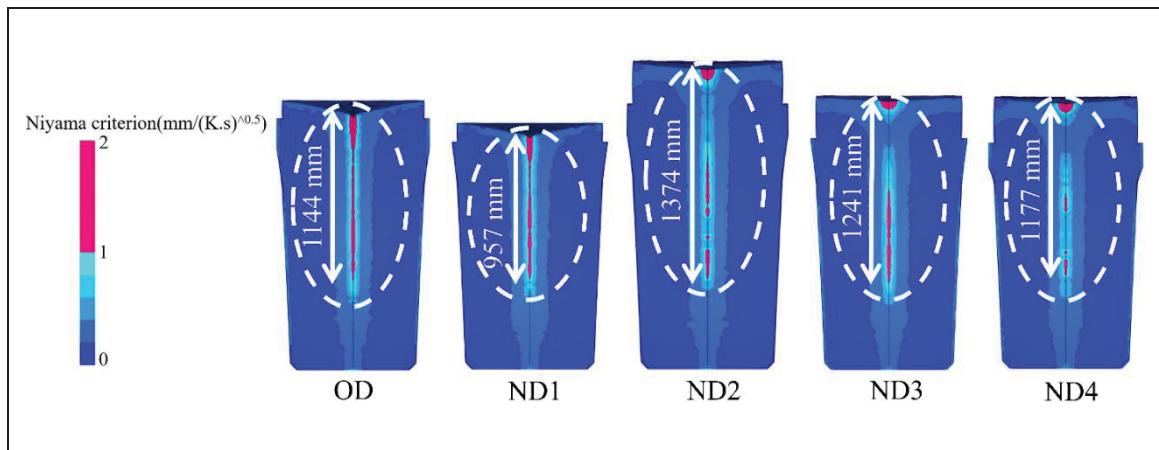


Figure 5.13 Risque de formation de microporosité le long de la ligne centrale du lingot pour chaque conception

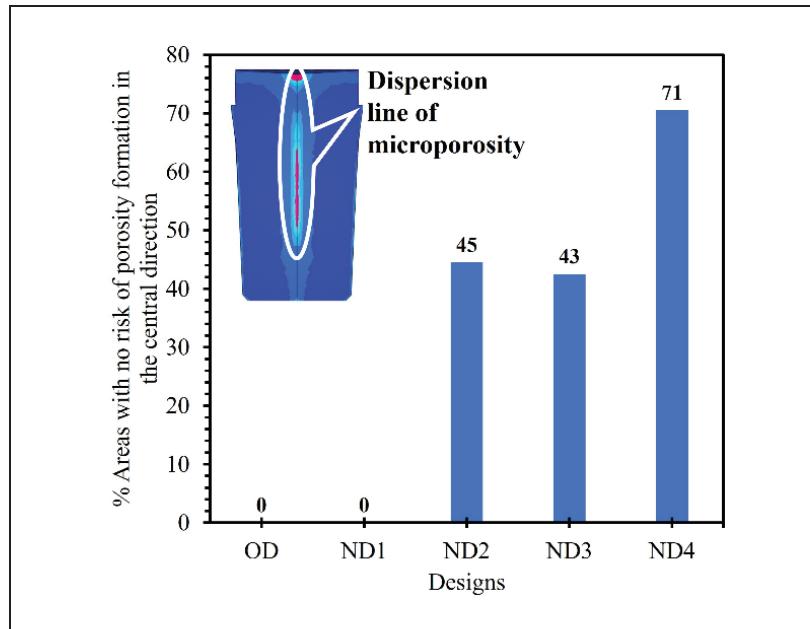


Figure 5.14 Le pourcentage des zones exemptes de risque de formation de microporosité le long de la ligne de dispersion pour chaque conception

5.4.2.2 La cavité de rétreint et la TCE

La formation d'une cavité de rétreint macroscopique se produit dans la région de la masselotte en raison de la contraction thermique et de la transition de l'état liquide à l'état solide (Ghodrati, Loucif, et al., 2022a). Le modèle thermomécanique dans THERCAST® prédit le rétreint de solidification et la déformation solide à l'aide d'une simulation par éléments finis 3D (comme expliqué dans la section 5.3.3.2) (Transvalor, 2017; C Zhang et al., 2018). La Figure 5.15 illustre la forme de la cavité de rétreint pour chaque configuration de masselotte. La distance verticale depuis la position de la couverture exothermique (où le niveau de métal était en contact avec la couverture exothermique à la fin du remplissage) jusqu'à la surface de la masselotte à la fin de la solidification a été mesurée, donnant des valeurs de 158.2 mm, 141.9 mm, 110.1 mm, 94.4 mm, et 88.92 mm dans OD, ND1, ND2, ND3, et ND4, respectivement.

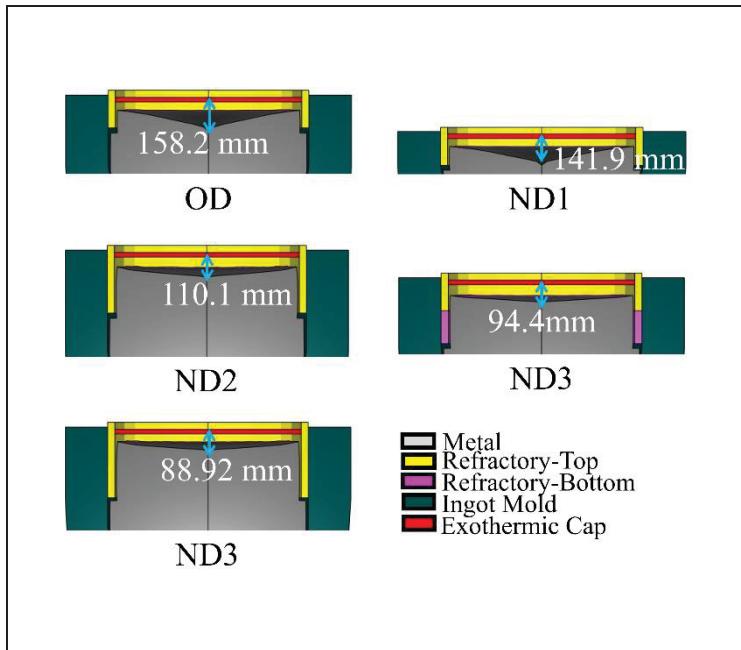


Figure 5.15 La déformation de surface est causée par le rétreint à la fin de la solidification dans le lingot

Figure 5.16 illustre le taux de refroidissement au point le plus élevé le long de la ligne centrale du lingot. L'évolution représentée du taux de refroidissement s'est produite dans la zone pâteuse, où la fraction liquide varie entre 1 et 0. Les variations dans la masselotte ont entraîné une réduction du taux de refroidissement, influençant la profondeur de la cavité, comme observé dans la Figure 5.15. Les résultats montrent qu'une augmentation du temps de solidification pourrait être corrélée à une diminution de la profondeur de la cavité. ND4 a présenté le taux de refroidissement le plus bas et la profondeur de cavité la plus faible selon la Figure 5.15 et Figure 5.16. Les modifications apportées à la masselotte, telles que l'augmentation de la hauteur de la masselotte et de la hauteur des panneaux latéraux, ont réduit la chute de la surface métallique dans la région de la masselotte en raison de taux de refroidissement réduits et de temps de solidification prolongés, prolongeant ainsi le temps nécessaire à l'apparition de la TCE. Une cavité de rétraction importante est couramment associée à des taux de solidification inégaux, des gradients de refroidissement et un début précoce de la frontière de la TCE. Cela peut se produire en raison d'une isolation thermique insuffisante de la masselotte du lingot. Par conséquent, le « timing » de la TCE est corrélé à la

profondeur de la cavité de rétraction dans la région de la masselotte. Par exemple, lorsque la TCE se produit près de la paroi du lingot, la profondeur de la cavité de rétraction dans la masselotte a tendance à être plus grande, tandis que lorsque la TCE se forme plus près du centre du lingot, la profondeur de la cavité de rétraction est réduite.

Le calcul du matériau rejeté en surface résultant de la cavité de rétraction, visant à aplatisir la surface supérieure du lingot, est déterminé à l'aide de la formule:

$$\text{Déchets dans la masselotte dus à la cavité} = (\text{Poids du matériau rejeté}) / (\text{Poids total du matériau du lingot}) \times 100.$$

Les pourcentages de matériau rejeté en haut sont de 5.44 %, 5.94 %, 3.66 %, 3.25 % et 3.05 % dans OD, ND1, ND2, ND3 et ND4, respectivement. En termes de rendement, ND4, ND3 et ND2 montrent une utilisation plus efficace du matériau par rapport à OD, car moins de matériau solide est gaspillé en raison de la découpe de la zone de la cavité de rétraction. L'efficacité de l'utilisation des matériaux n'a pas été observée dans le cas de ND1. Ainsi, le changement de conception de la masselotte contribue à une meilleure efficacité d'utilisation des matériaux.

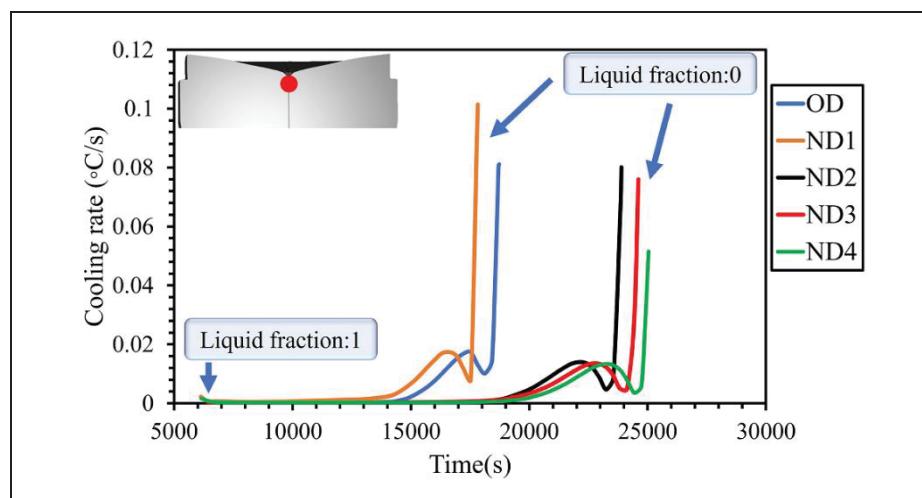


Figure 5.16 Le taux de refroidissement au point rouge est situé à la position la plus haute le long de la ligne centrale de lingot pour chaque conception

5.4.2.3 La macroségrégation et la TCE

Le modèle de solidification thermomécanique dans THERCAST® est utilisé pour prédire la macroségrégation (Ghodrati et al., 2024; Ghodrati, Loucif, Morin, Champliaud, & Jahazi, 2023; Ghodrati, Loucif, et al., 2022a; Prafull Patil et al., 2017; Transvalor, 2017). La Figure 5.17 illustre l'évolution dynamique du pourcentage de macroségrégation du carbone et de la plage de macroségrégation (incluant la ségrégation maximale et minimale), dans la direction radiale à travers le bas, le milieu et le haut du lingot pour chaque conception (comme indiqué dans la position de la Figure 5.9a). De plus, la position de la TCE est identifiée pour chaque conception sur l'image. L'impact des conditions de solidification, attribué aux variations dans la masselotte, est particulièrement évident dans des zones radiales spécifiques: jusqu'à 200 mm du mur du lingot en bas, jusqu'à 200 mm du mur et jusqu'à 100 mm de la ligne centrale au milieu, et toute la direction radiale du mur à la ligne centrale en haut du lingot. Dans la position inférieure, toutes les conceptions présentent un schéma de ségrégation radiale comparable, avec des plages de ségrégation négative presque identiques. Cependant, ND1, ND2, ND3 et ND4 présentent une ségrégation moins sévère près de la surface du mur par rapport à OD. En se déplaçant vers le milieu du lingot, la gravité de la ségrégation varie avec les différences de la masselotte, entraînant notamment une réduction de la plage de ségrégation positive dans les 200 mm de la surface du mur, notamment dans ND2 et ND3. En haut du lingot, on observe une augmentation perceptible de la gravité de la ségrégation négative dans la ligne centrale avec une augmentation du temps de solidification. Les résultats suggèrent que dans le contexte des véritables lingots, la position de la TCE indique une nucléation précoce de grains équiaxes dendritiques dans ND1 et OD par rapport à ND2, ND3 et ND4. Les grains équiaxes, plus denses que le liquide environnant, ont tendance à couler, entraînés par l'écoulement de fluide convectif, ce qui est un contributeur significatif à la macroségrégation dans les grands lingots (Edward John Pickering, 2013). Pendant la première étape de solidification, lorsque le front solide se développe au bas du lingot, ce qui se produit dans les deux premières heures après le versement du liquide, il y a un volume de liquide suffisant pour le mouvement du fluide, assurant l'homogénéité du liquide à travers toutes les conceptions. Selon les résultats, l'évolution de la ségrégation négative est approximativement cohérente à travers différentes

positions de la TCE au bas du lingot. Cependant, pendant les étapes ultérieures de solidification, les sections moyennes et supérieures du lingot se solidifient, ce qui réduit le volume du bassin de métal fondu, ce qui affecte la circulation du fluide. Lorsque la TCE se déplace vers le cœur du lingot, le volume restant pour la formation de grains équiaxes diminue, ce qui entraîne une réduction de l'homogénéité et une augmentation de la ségrégation négative dans la ligne centrale. Des recherches indiquent que dans les lingots d'acier faiblement allié, la zone équiaxe à la base du lingot contient souvent des grains plus globulaires que ceux trouvés plus haut dans l'lingot. Les grains globulaires sont généralement plus ronds et moins ramifiés, ce qui représente un stade précoce de croissance des grains équiaxes avant de passer à des formes dendritiques (Edward John Pickering, 2013). Les grains équiaxes globulaires présentent généralement une ségrégation plus faible par rapport aux grains équiaxes dendritiques en raison de leur formation plus uniforme, ce qui diminue la probabilité de ségrégation préférentielle des éléments d'alliage. En revanche, les grains équiaxes dendritiques possèdent des branches dendritiques qui peuvent piéger les solutés ségrégés pendant la solidification, entraînant une ségrégation accrue au sein de la structure du grain. Par conséquent, un temps de solidification prolongé dans ND2, ND3 et ND4 facilite la transition des grains équiaxes globulaires vers des grains équiaxes dendritiques, augmentant ainsi la ségrégation négative dans la ligne centrale. Cependant, le temps de solidification prolongé diminue également le taux de refroidissement de la zone pâteuse, permettant plus de temps aux éléments solutés de diffuser à l'état solide et entraînant une réduction de la ségrégation positive observée dans une distance allant jusqu'à 200 mm de la surface.

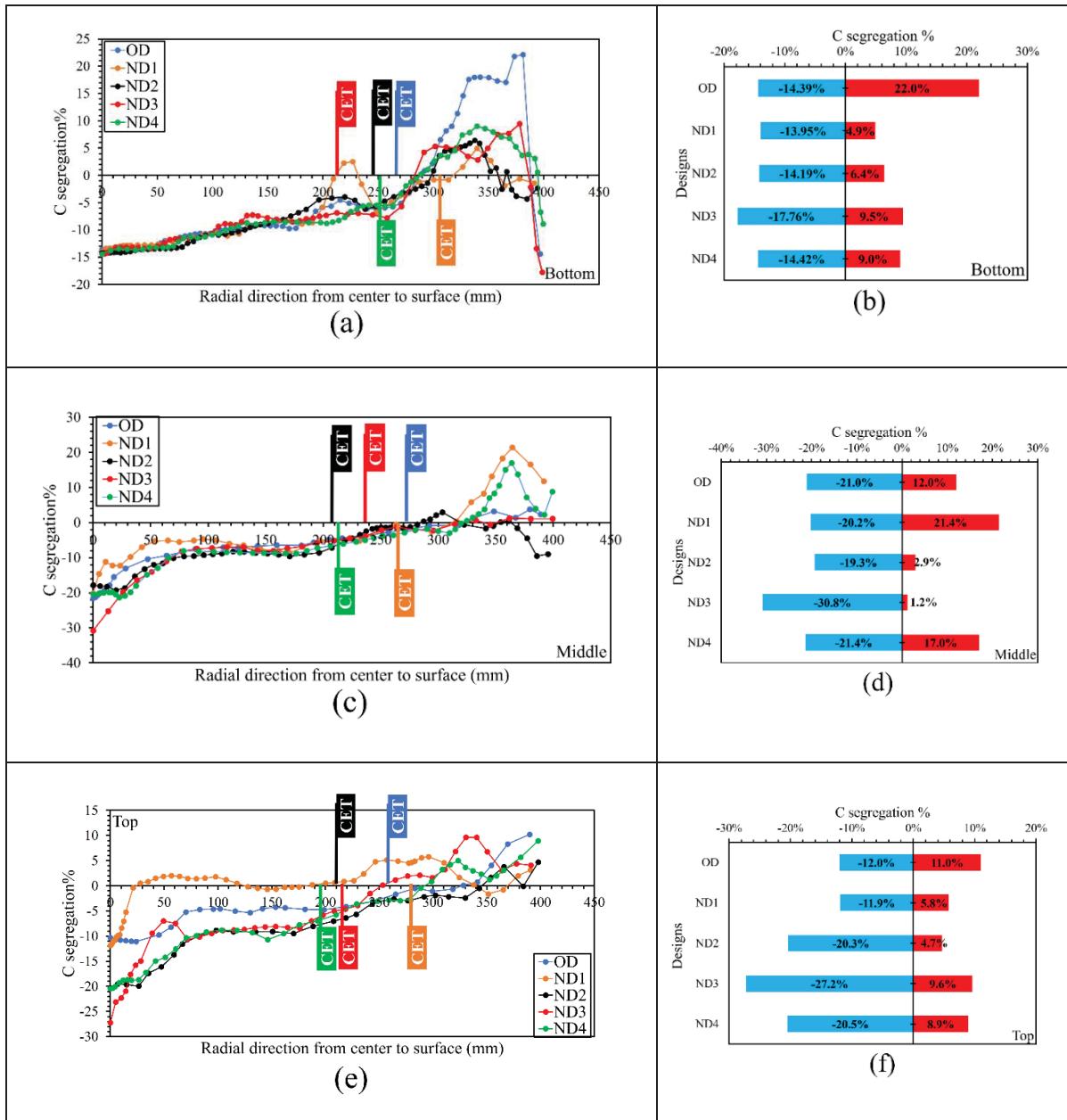


Figure 5.17 (a) Évolution du pourcentage de macroségrégation en carbone dans la direction radiale au bas de lingot, (b) Plage de pourcentage de macroségrégation en carbone au bas du lingot, (c) Évolution du pourcentage de macroségrégation en carbone dans la direction radiale au milieu du lingot, (d) Plage de pourcentage de macroségrégation en carbone au milieu du lingot, (e) Évolution du pourcentage de macroségrégation en carbone dans la direction radiale en haut du lingot, (f) Plage de pourcentage de macroségrégation en carbone en haut du lingot. Les positions du bas, du milieu et du haut sont indiquées dans la Figure 5.9a

La Figure 5.18 illustre les motifs de macroségrégation à la fin de la solidification pour chaque configuration, mettant en évidence l'impact de la contraction sur l'accumulation de la ségrégation positive. Cette figure révèle des variations dans la position et la zone de la ségrégation positive dans la masselotte, en raison de la formation de la cavité de contraction à la surface supérieure du lingot. Une réduction de l'accumulation de la ségrégation positive est évidente dans les configurations ND2, ND3 et ND4. De plus, il y a une relocalisation de la ségrégation positive vers le corps du lingot dans les configurations ND1 et OD. Ge et al. (Ge et al., 2017) ont rapporté que la contraction influence significativement la formation de la macroségrégation dans les lingots d'acier de grande taille, augmentant la sévérité et l'étendue de la ségrégation négative dans la région inférieure. Dans la zone de la masselotte, la contraction réduit la taille de la zone de ségrégation positive et déplace son emplacement vers les régions inférieures du lingot. Par conséquent, on pourrait conclure que la formation de la macroségrégation est liée à la position de la TCE et à la formation de la cavité de contraction.

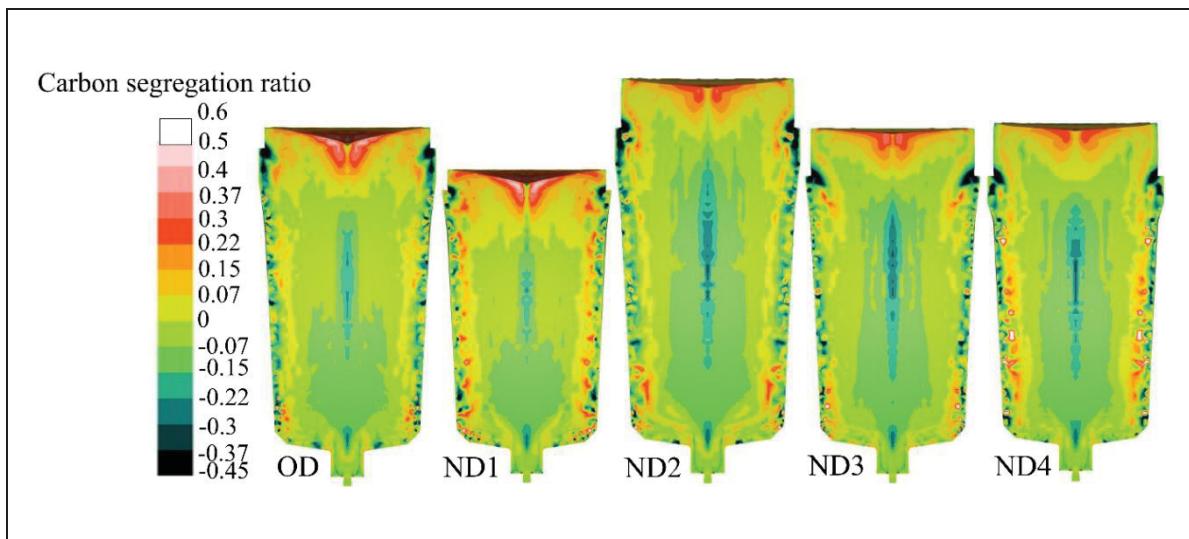


Figure 5.18 Schéma de macroségrégation du carbone à la fin de la solidification pour chaque configuration

Les résultats de l'étude (sections 5.4.2.1 à 5.4.2.3) soulignent l'impact dual d'une durée de solidification prolongée: une réduction de la microporosité le long de la ligne centrale et l'amélioration d'une cavité de rétraction à la surface supérieure du lingot, accompagnée de ségrégation positive. Cependant, cela est contrebalancé par une augmentation de la ségrégation

négative le long de la ligne centrale. Ce phénomène est intimement lié à la cinétique de solidification, englobant des facteurs tels que la température, le taux de refroidissement, le taux de solidification, le temps de diffusion des éléments solutés à l'état pâteux, et la position de la TCE. Notamment, lors du développement du front solide depuis la surface de la paroi, un taux de refroidissement élevé entrave la diffusion des éléments solutés dans le solide. En revanche, un taux de solidification plus faible permet un temps de diffusion accru, favorisant l'homogénéité du liquide devant le solide. La ligne centrale, étant la dernière à se solidifier dans le processus de solidification, joue un rôle crucial. Dans le modèle de convection thermosolutale appliqué pour la prédiction de la macroségrégation, la vitesse de déplacement du fluide devient influente dans la détermination de l'homogénéité du liquide restant dans le métal en fusion. L'extension observée de la position de la TCE avec une augmentation du temps de solidification indique que la région colonnaire contribue à l'apparition de la ségrégation négative le long de la ligne centrale. La conclusion de l'étude recommande une plage de temps de solidification entre 1.227 et 1.335 pour traiter les divers défauts considérés dans cette section. Une valeur inférieure à 1.227 suggère un sous-chauffage dans la masselotte, une alimentation insuffisante vers la partie centrale et un taux de refroidissement élevé, entraînant une augmentation de la microporosité et de la cavité de rétraction, potentiellement une relocation de la ségrégation positive à l'intérieur du corps et une diminution de la qualité du lingot. En revanche, un temps de solidification dépassant 1.335 indique que la TCE se produit à une fraction solide plus élevée, entraînant une augmentation de la longueur de la structure colonnaire et un risque accru de ségrégation négative, en particulier dans la ligne centrale du lingot au milieu et en haut du lingot. Cette conclusion souligne l'importance critique de choisir une plage de temps de solidification optimale pour équilibrer la réduction des défauts et améliorer la qualité globale du lingot.

5.4.3 Bassin de métal en fusion et TCE

Le bassin de métal en fusion joue un rôle crucial dans la préservation de la température du métal tout au long du processus de coulée, régulant la dynamique d'écoulement, atteignant l'homogénéisation de l'alliage, et influençant les caractéristiques microstructurales, y compris l'évolution de la TCE (Ridolfi, 2017). L'interaction entre le bassin de métal en fusion et les

conceptions de moules influence de manière significative le processus de solidification. Une gestion minutieuse de ces aspects est impérative pour produire des lingots de haute qualité. Comprendre l'influence de la variation de la masselotte sur le profil de solidification à l'intérieur du lingot est essentiel. La Figure 5.19 illustre le profil de solidification pour chaque configuration à différents moments après le versement, y compris 1 heure (Figure 5.19a), 2 heures (Figure 5.19b), 3 heures (Figure 5.19c), et 4 heures (Figure 5.19d). Le bleu foncé représente la phase solide, le rouge représente la phase liquide, et la zone colorée entre les deux représente l'état pâteux. Les vecteurs de vitesse du fluide dynamique dans le bassin de métal en fusion sont représentés par des flèches, dont la taille indique l'intensité du flux de fluide. La forme du métal fondu a changé au cours de la première heure après le versement, avec des variations dans la masselotte, en particulier dans les configurations ND2, ND3 et ND4, entraînant une solidification retardée dans la masselotte. Par conséquent, la largeur du bassin de métal fondu a augmenté au cours des heures suivantes. La température du bassin de métal en fusion a influencé les taux de refroidissement subis par le métal en cours de solidification. Un bassin de métal fondu plus large a conduit à des taux de refroidissement plus lents près de la surface du lingot, retardant potentiellement l'apparition de la TCE. La distribution et l'intensité du flux de fluide variaient selon les différentes configurations de la masselotte. Les courants de convection dans le bassin de métal fondu ont affecté la distribution de la chaleur et des solutés dans le lingot. Ce flux de fluide a influencé la morphologie de croissance des grains solides et, par conséquent, la TCE. Des études antérieures (Ge et al., 2017; P Patil et al., 2015) ont rapporté un flux de fluide descendant du haut vers le bas dans le front solide, suivi d'un flux ascendant du bas vers le haut dans la ligne centrale. Ce schéma de flux observé peut être attribué au gradient de température entre la paroi du moule et le cœur du lingot. La température plus basse près de la surface du lingot entraîne une augmentation de la densité du métal liquide, tandis que le métal liquide au cœur reste à une température plus élevée et à une densité plus faible. Cette différence de température met en mouvement une boucle de convection, influençant la direction du flux de fluide pendant les premières étapes du processus de solidification. Ce comportement a été observé jusqu'à 1 heure après le versement. Au-delà de ce point, la dynamique des fluides se déplaçait principalement du haut vers le bas dans la ligne centrale, puis remontait dans le front solide. À mesure que le processus de solidification

progressait, le volume de métal fondu diminuait et, sous l'influence des effets de retrait à la surface supérieure, un flux de fluide à haute intensité était dirigé du haut vers le bas dans la ligne centrale. Le bassin de métal fondu agissait comme un réservoir pour compenser le retrait de solidification. Cela affectait la distribution des contraintes à l'intérieur du lingot et, par conséquent, influençait la formation de cavités de retrait et la position du TCE. Dans les configurations ND2, ND3 et ND4, en particulier à 3 heures et 4 heures après le versement, la largeur plus importante de la piscine liquide offrait plus d'espace pour la circulation des fluides, entraînant une homogénéité accrue et un mouvement ascendant des impuretés accumulées dans la région supérieure. De plus, l'amplitude des vecteurs de vitesse est plus élevée à ces emplacements en raison des températures élevées. La position du TCE s'étendait vers le centre dans les configurations ND2, ND3 et ND4.

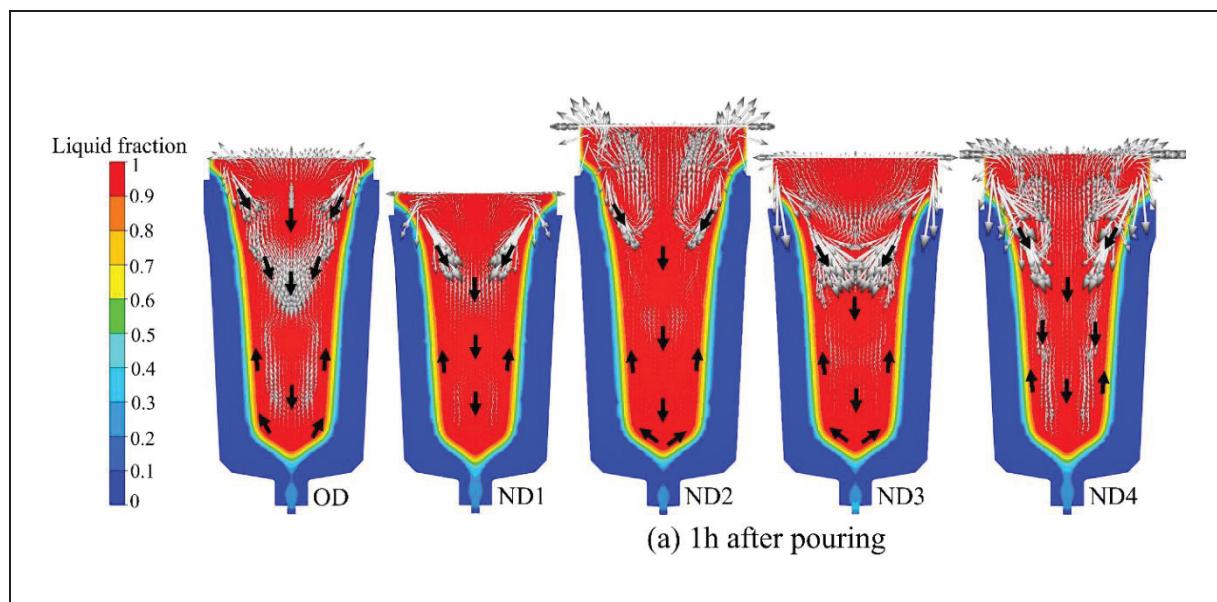


Figure 5.19 Fraction liquide et vecteur de vitesse du flux de fluide pour chaque configuration,
(a) 1 heure après le versement

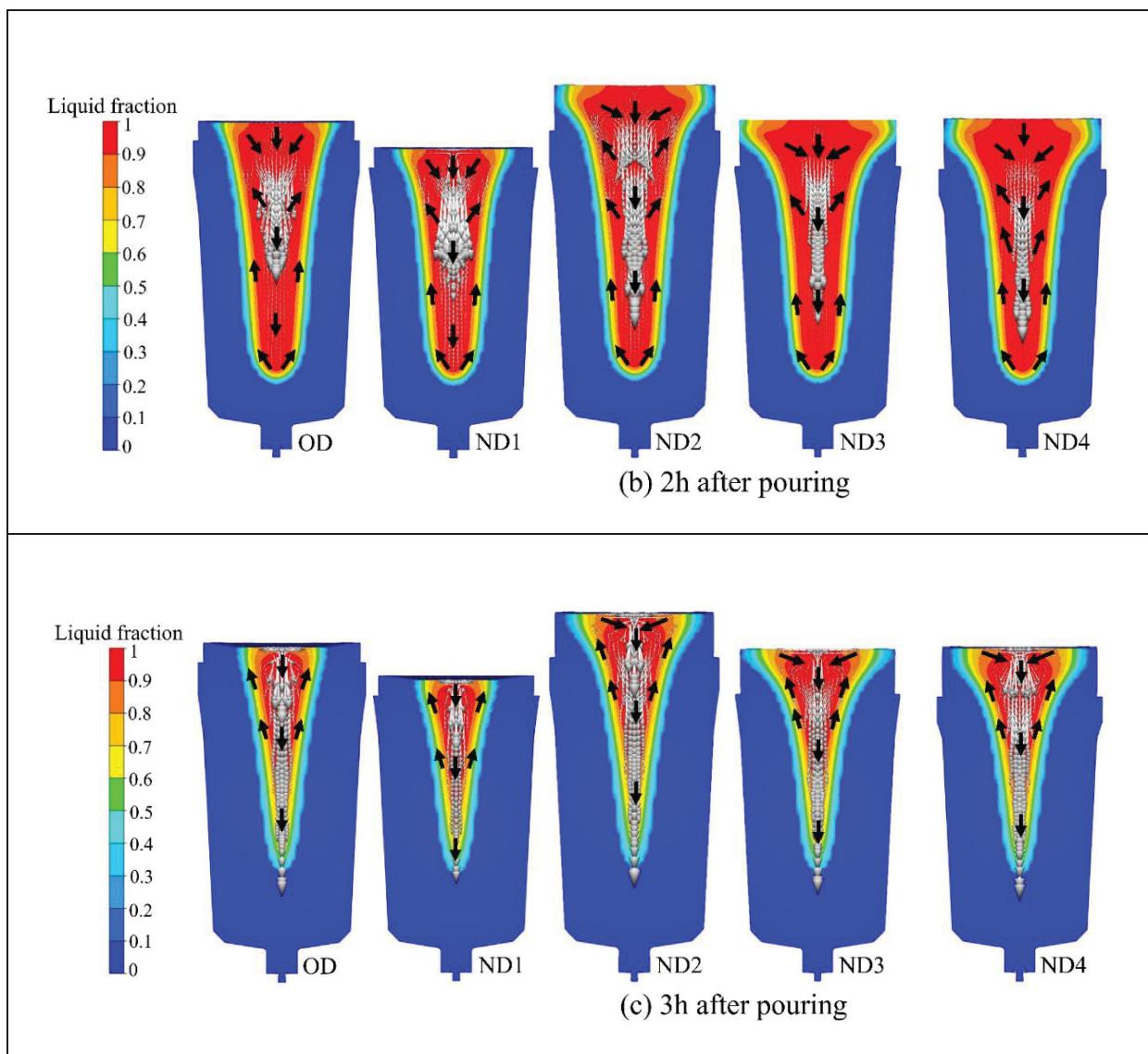


Figure 5.19 Fraction liquide et vecteur de vitesse du flux de fluide pour chaque configuration,
(b) 2 heures après le versement, (c) 3 heures après le versement

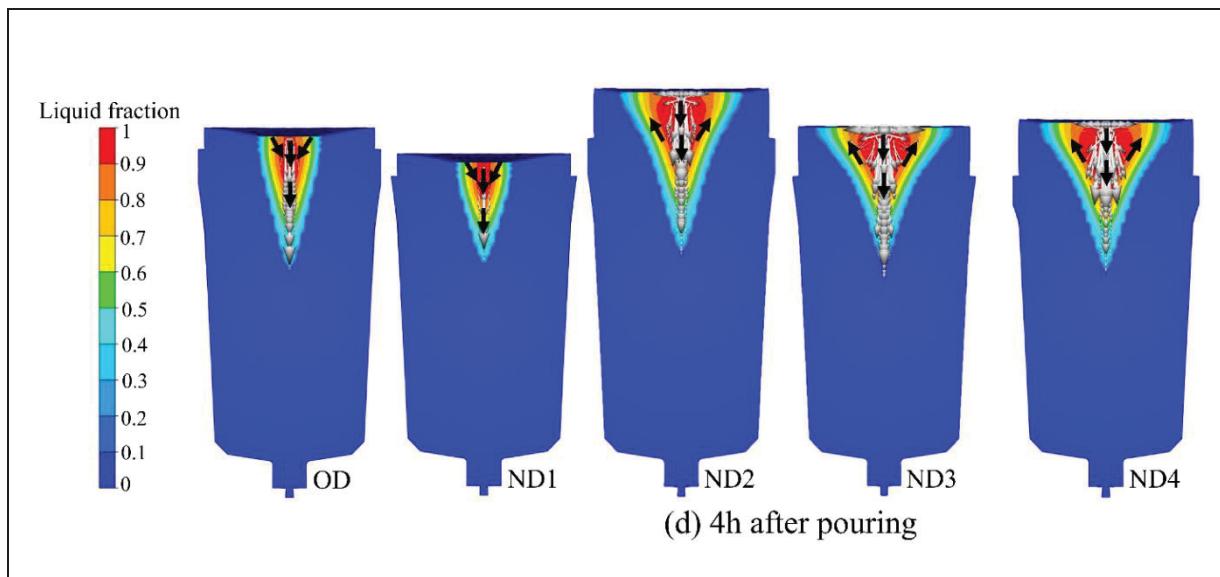


Figure 5.19 Fraction liquide et vecteur de vitesse du flux de fluide pour chaque configuration,
(d) 4 heures après le versement

Les dimensions du bain de métal liquide, notamment la hauteur et la largeur, ont été mesurées 1 heure, 2 heures et 3 heures après le versement (Figure 5.20). Notamment, les configurations ND2, ND3 et ND4 ont montré une expansion de la largeur du bassin de métal liquide en raison de l'augmentation de l'isolation dans la masselotte. Plus précisément, dans la configuration ND3, la largeur du bassin de métal liquide a augmenté de jusqu'à 58 mm, 156 mm et 235 mm à 1 heure, 2 heures et 3 heures après le versement, respectivement, par rapport à la configuration OD. En revanche, la hauteur du bassin de métal liquide reste relativement stable dans ND3 comparée à OD. Cette expansion en largeur a des implications significatives pour le processus de solidification, indiquant une zone plus étendue pour le flux de fluide et une position de TCE prolongée. Une augmentation de la hauteur du bassin de métal liquide a été observée dans ND2, atteignant jusqu'à 158 mm, 154 mm et 82 mm à 1 heure, 2 heures et 3 heures après le versement, respectivement, par rapport à OD. Cette variation des dimensions du bassin de métal liquide est attribuée aux modifications des dimensions structurelles de la masselotte. Les changements observés dans la hauteur du bassin de métal liquide dans ND2 soulignent davantage le rôle du design de la masselotte dans la formation du profil de solidification. Dans l'ensemble, ces mesures contribuent à une évaluation complète de

l'influence des variations de la masselotte sur le bassin de métal liquide, mettant en lumière les dynamiques complexes qui régissent les différentes étapes de la solidification.

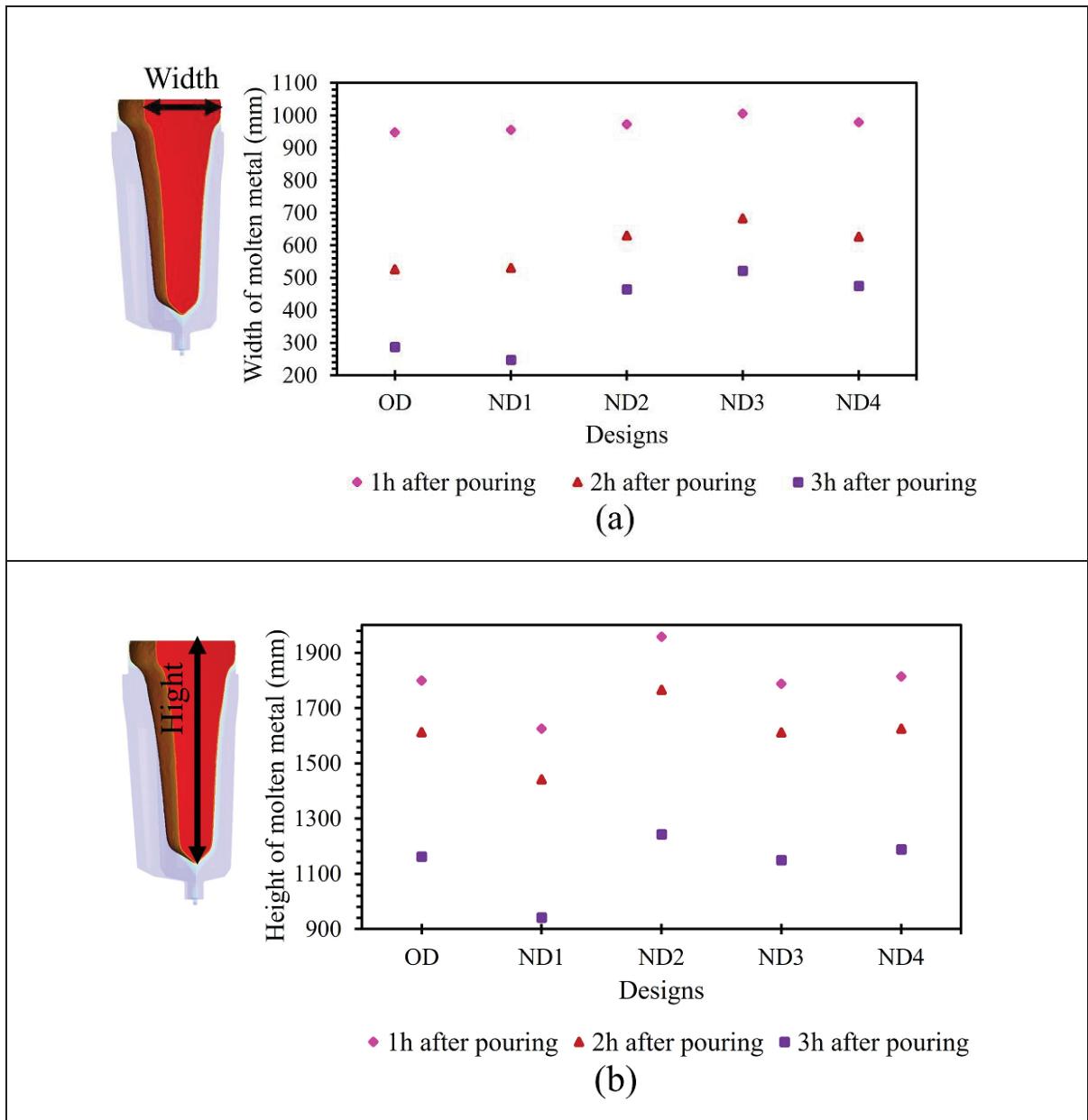


Figure 5.20 (a) Largeur du métal en fusion, (b) Hauteur du métal en fusion à 1 heure (h), 2 heures (h) et 3 heures (h) après le versement

Figure 5.21 représente l'épaisseur de la zone pâteuse au bas, au milieu et en haut de lingot au point de transition de colonnaire à équiaxe pour chaque conception. L'image révèle que

l'épaisseur de la zone pâteuse augmente avec un temps de solidification prolongé. Cependant, l'augmentation de l'épaisseur de la zone pâteuse était limitée, atteignant jusqu'à 19 mm, 27 mm, et 22 mm au bas, au milieu et en haut du lingot. Par conséquent, l'impact de l'épaisseur de la zone pâteuse sur les défauts tels que la formation de la ségrégation est jugée moins significatif par rapport aux influences du taux de refroidissement, du temps de solidification, du temps de diffusion et du mouvement du fluide.

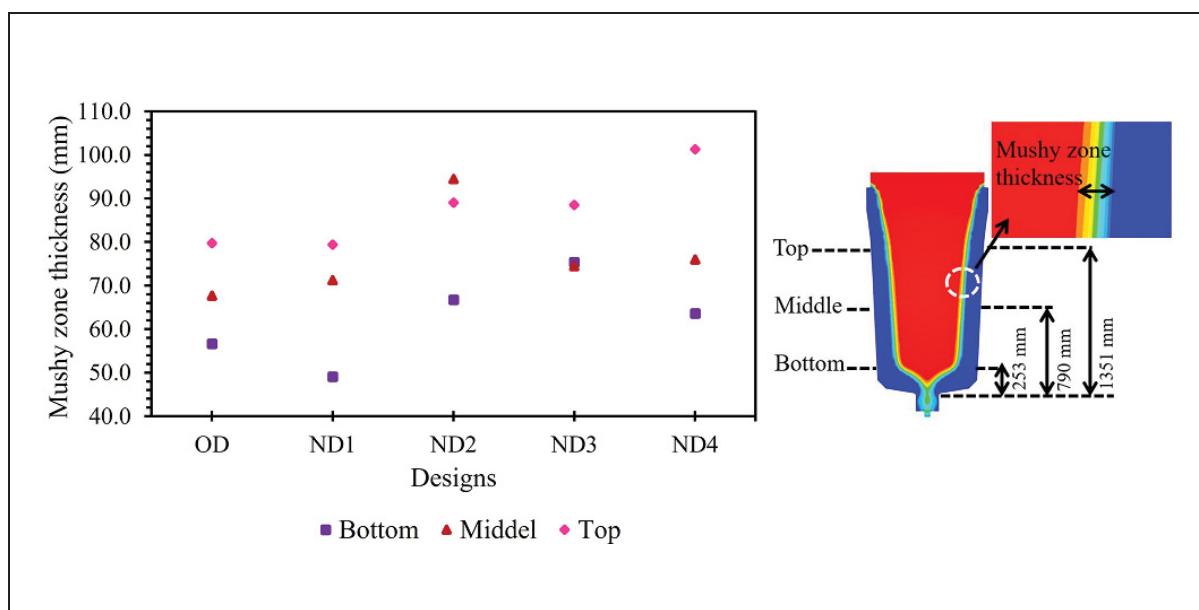


Figure 5.21 L'épaisseur de la zone pâteuse au point de transition de colonnaire à équiaxe au bas, au milieu et en haut du lingot pour chaque conception

5.5 Conclusions

Dans cette étude, nous avons examiné les impacts des variations thermiques et géométriques de la partie supérieure du moule sur la position de la Transition de Colonnaire à Équiaxe (TCE). Nous avons approfondi la signification du temps de solidification, en tant que facteur crucial dans le processus de coulée, et proposé un critère de temps de solidification adapté aux lingots de 12 MT. Les conclusions suivantes peuvent être tirées de ce travail:

1. Les variations dans la configuration de la partie supérieure du moule ont un impact significatif sur la position de la Transition de Colonnaire à Équiaxe (TCE), influençant les

conditions de solidification et entraînant une épaisseur variable de la phase solide à différents emplacements dans le lingot.

2. Un critère de temps de solidification est proposé pour prédire la formation de défauts. Une valeur inférieure à 1.227 indique une sensibilité accrue à la formation de microporosité et de cavités de rétreinte, tandis qu'un dépassement de 1.335 accroît le risque de ségrégation négative, en particulier dans la ligne centrale du lingot en raison de la TCE se produisant à une fraction solide plus élevée. Cela souligne l'importance d'optimiser le temps de solidification pour améliorer la qualité globale du lingot.
3. Les interactions entre les variations de la masselotte et la dynamique de solidification lors de la coulée d'un lingot de 12MT ont été quantifiées. L'analyse a montré qu'avec une conception judicieuse de la masselotte, il était possible d'obtenir une augmentation substantielle de la largeur du bassin de métal fondu, jusqu'à 235mm, dans les heures suivant la coulée.

5.6 Remerciements

Cette recherche a reçu le soutien du Conseil de recherches en sciences naturelles et en génie du Canada (CRSNG) dans le cadre du projet de recherche et développement collaboratif (RDC), numéro de subvention 536444-18. Nous tenons à exprimer notre profonde gratitude à Finkl Steel-Sorel Co. pour la fourniture du matériel.

5.7 Conflits d'intérêts

Les auteurs déclarent n'avoir aucun intérêt financier ou relation personnelle susceptibles d'avoir influencé le travail rapporté dans cet article.

5.8 Appendice I

Tableau 5.7 Paramètres d'entrée pour la simulation
Tirée de Ghodrati et al. (2022)

Propriété	Unité	Valeur	Référence
Temps de remplissage	min	26	(Finkl-Steel-Sorel)
Température initiale du moule et des composants du moule	°C	60	(Finkl-Steel-Sorel)
Température environnementale extérieure	°C	20	(Finkl-Steel-Sorel)
Température de coulée	°C	1580	(Finkl-Steel-Sorel)
Température de surchauffe	°C	78	(Finkl-Steel-Sorel; Sente.Software.Ltd, 2005)
Température liquidus	°C	1502	(Sente.Software.Ltd, 2005)
Débit pour le modèle de symétrie à 90°	mm ³ /s	265,385	(Finkl-Steel-Sorel)
Énergie d'allumage de deux couvertures exothermiques	MJ	72	-
Nombre de maillages du lingot et des composants du moule	-	746,196	-
Taille de maillage	mm	30	-
Affinement de maillage	mm	15 et 8	-
Densité de référence (acier)	Kg/m3	6.93e-6	(Sente.Software.Ltd, 2005; TherCast2.1®, 2021)
Température de fusion du fer pur	°C	1540	(TherCast2.1®, 2021)
Coefficient de dilatation thermique	1/K	8.853e-5	(TherCast2.1®, 2021)
Chaleur latente de fusion	kJ/kg	265	(TherCast2.1®, 2021)
Émissivité	-	0.8	(TherCast2.1®, 2021; C Zhang et al., 2018)

Propriété	Unité	Valeur	Référence
Densité (fonte)	kg/m ³	7000	(TherCast2.1®, 2021)
Conductivité thermique (fonte)	W/(m.K)	30	(TherCast2.1®, 2021)
Densité (réfractaire)	kg/m ³	2353	(TherCast2.1®, 2021; C Zhang et al., 2018)
Conductivité thermique (réfractaire)	W/(m.K)	1.2	(TherCast2.1®, 2021; C Zhang et al., 2018)
Densité (isolant de riser)	kg/m ³	868	(TherCast2.1®, 2021)
Conductivité thermique (isolant de riser)	W/(m.K)	0.45	(TherCast2.1®, 2021)
Densité (couverture exothermique)	kg/m ³	500	(TherCast2.1®, 2021)
Conductivité thermique (couverture exothermique)	W/(m.K)	0.2	(TherCast2.1®, 2021)

Tableau 5.8 Conditions de limite thermique de la simulation
Tirée de Ghodrati et al. (2022), Ghodrati et al. (2024), et TherCast2.1(2021)

Condition limite thermique	
Coefficient de transfert de chaleur entre métal/moule	$h=5 \times 10^3 \text{ W/m}^2.\text{K}$
Coefficient de transfert de chaleur entre moule en fonte/extérieur	$h_{cv}=12 \text{ W/m}^2.\text{K}$ $T_{ext}=20 \text{ }^\circ\text{C}$
Coefficient de transfert de chaleur entre métal/réfractaire et métal/riser	$h=1 \times 10^2 \text{ W/m}^2.\text{K}$
Résistance thermique à l'interface entre métal/couverture	$R=1 \times 10^{-5} \text{ m}^2.\text{K/W}$
Résistance thermique entre composants du moule	$R=1 \times 10^{-6} \text{ m}^2.\text{K/W}$
Résistance thermique entre moule/réfractaire et moule/riser	$R=1 \times 10^{-2} \text{ m}^2.\text{K/W}$
Émissivité	0.8
Conductivité thermique du moule	30 W/(m.K)
Conductivité thermique de l'isolant du riser	0.45 W/(m.K)

CONCLUSION

Cette recherche étudie l'influence des caractéristiques de la masselotte sur les défauts à l'échelle macroscopique, en mettant particulièrement l'accent sur la gravité et la formation de la macroségrégation dans un lingot d'acier à haute résistance de moyenne teneur en carbone de 12MT. Pour ce faire, un modèle FEM 3D à 90°, représentant un quart du système de coulée complet, a été développé en utilisant le code FEM commercial THERCAST®. Ce modèle simule les processus de remplissage et de solidification à l'aide d'un algorithme à deux phases solide-liquide moyen sur le volume. Des efforts considérables ont été déployés pour éliminer les incertitudes potentielles grâce à une combinaison d'approches expérimentales et de simulation afin d'assurer la précision.

Le modèle FEM a incorporé des détails géométriques, structuraux et de configuration précise du système de coulée industriel, avec une taille de maillage moyenne de 30 mm et un affinement de maillage entre 8 et 15 mm. Les conditions aux limites ont été définies pour reproduire étroitement les pratiques industrielles. Les paramètres dépendant de la température des matériaux, reflétant leurs comportements thermodynamiques, thermomécaniques et de thermodiffusion, ont été identifiés en utilisant une combinaison de logiciels thermodynamiques computationnels (JMatPro®), de calculs théoriques, de sources industrielles, de rapports de littérature et de la base de données matérielle THERCAST®. Le modèle a pris en compte les effets combinés de la convection thermosolutale et du retrait de solidification, y compris la contraction supérieure et la formation de l'interstice d'air, pour les simulations.

La configuration de coulée pour un lingot de 12 MT, y compris la configuration d'origine de la masselotte industrielle, a été soumise à une simulation pour confirmer la validité du logiciel et du modèle. Cela a été suivi par un travail expérimental approfondi sur des lingots de taille industrielle réelle pour valider davantage les résultats. La planification expérimentale a été soigneusement conçue en fonction des principaux résultats de prédiction et des paramètres de coulée. Un ensemble complet de tests a été réalisé, comprenant des mesures de composition chimique sur toute la section longitudinale d'un demi-lingot pour évaluer le rapport de

ségrégation de tous les éléments. Une macro-attaque a été appliquée à l'autre demi-section longitudinale pour révéler le motif de macroségrégation, tandis qu'une inspection par ressuage (DPI) a été réalisée sur la demi-section restante pour détecter la microporosité. Les dimensions de la cavité supérieure et les temps de solidification ont été mesurés après la coulée, et la température de surface du moule a été surveillée de manière stratégique.

L'enquête sur la configuration de la masselotte a englobé divers aspects, notamment la géométrie, les conditions thermiques et leurs combinaisons, en utilisant le modèle validé pour une analyse approfondie. L'enquête s'est concentrée sur plusieurs variables de la configuration de la masselotte, notamment la hauteur de la masselotte, la hauteur du panneau latéral, la conductivité thermique du panneau latéral et le préchauffage de la masselotte, à travers huit scénarios différents de configuration de la masselotte. Ces variables ont modifié des facteurs tels que le rapport de masse du moule, le rapport de minceur du moule et le régime thermique de la masselotte, affectant ainsi les cinétiques de solidification.

Les modifications de la configuration de la masselotte ont exercé une influence significative sur divers aspects du processus de coulée, notamment le champ de vitesse du métal liquide, la taille et la forme des tourbillons, le taux de refroidissement, la température liquidus, la distribution de température, le flux de chaleur, le temps de solidification, la position de transition de colonnaire à équiaxe, et le profil de solidification. Ces facteurs ont collectivement impacté la gravité de la macroségrégation à la fois dans la masselotte et dans le corps du lingot. De plus, la microporosité et la cavité de rétraction, deux autres défauts de coulée critiques, ont été étudiés aux côtés de la macroségrégation pour proposer un critère de temps de solidification en tant que ligne directrice pour la configuration de la masselotte. Une conception modifiée a été proposée pour minimiser la macroségrégation, la microporosité et la formation de cavités.

L'étude a examiné l'effet de l'augmentation de la hauteur de la masselotte de 165 mm sur les ratios de macroségrégation positive et négative, la qualité du lingot et le rendement du matériau dans un lingot d'acier haute résistance de 12 MT. Les résultats ont montré que cette augmentation prolongeait le temps de solidification jusqu'à 8 minutes, augmentait la vitesse du

fluide dans des zones comprenant la masselotte et le fond du lingot, et abaissait la température liquidus locale. Ces facteurs combinés ont réduit à la fois la macroségrégation positive et négative de plus de 6 %, ce qui a entraîné une amélioration de la qualité du lingot. Les principaux contributeurs à la diminution de l'intensité de la macroségrégation à des emplacements spécifiques étaient l'augmentation de l'alimentation en liquide de la masselotte vers le fond du lingot et une distribution plus uniforme des éléments solutés dans le liquide en vrac. De plus, la réduction de la macroségrégation positive et négative à des emplacements spécifiés était liée à un taux de refroidissement plus lent du liquide à l'état pâteux, permettant un temps suffisant pour la diffusion des éléments solutés.

Cette étude a examiné comment différents régimes thermiques de masselotte affectent le temps de solidification, la température, le flux de chaleur et la gravité de la macroségrégation dans un lingot moulé de grande taille en acier au carbone de qualité moyenne 4130. L'enquête s'est concentrée sur le préchauffage de la masselotte, l'utilisation d'un matériau de panneau latéral ayant une conductivité thermique plus faible et l'ajout de matériau de panneau latéral supplémentaire pour couvrir complètement la paroi latérale de la masselotte. Les résultats ont révélé que la modification de la capacité thermique de la masselotte augmentait le temps de solidification d'environ 2 % à 31 %. L'ajout de matériau de panneau latéral supplémentaire prolongeait le temps de solidification d'environ 30 minutes dans la zone de la masselotte et jusqu'à 20 minutes le long de l'axe central du lingot. Le revêtement de la masselotte avec un matériau réfractaire réduisait le transfert de chaleur à la fois dans la zone de la masselotte et dans le corps du lingot, entraînant des chutes de température plus faibles, une dynamique de solidification modifiée et une diminution des motifs de ségrégation dans la masselotte et dans la moitié supérieure du lingot. Il y avait une réduction significative de la macroségrégation en carbone, en particulier de la ségrégation positive, dans diverses régions du lingot. Cette réduction était liée à une augmentation du temps de solidification local, permettant une meilleure diffusion des éléments solutés dans la phase solide, réduisant ainsi la ségrégation. De plus, les nouveaux designs de masselotte ont amélioré le rendement en matériau de 10 % à 29 %, selon les changements de régime thermique spécifiques mis en œuvre.

Cette étude a examiné comment les variations des propriétés thermiques et géométriques de la masselotte affectent la position de la transition de colonnaire à équiaxe (CET) lors de la coulée de lingots de 12 MT. Mettant l'accent sur le rôle crucial du temps de solidification dans le processus de coulée, un critère spécifique de temps de solidification a été développé. Les résultats ont montré que les changements dans la configuration de la masselotte influencent significativement la position de la CET, affectant les conditions de solidification et entraînant des épaisseurs de phase solide différentes à travers l'lingot. Un critère de temps de solidification proposé aide à prédire la formation de défauts: une valeur inférieure à 1.227 indique une sensibilité accrue à la microporosité et aux cavités de rétreint, tandis qu'une valeur supérieure à 1.335 suggère un risque plus élevé de ségrégation négative, notamment le long de la ligne centrale, en raison de la CET se produisant à une fraction solide plus élevée. Cela souligne la nécessité d'optimiser le temps de solidification pour améliorer la qualité globale du lingot. Les interactions entre les variations de la masselotte et la dynamique de solidification ont été quantifiées, montrant qu'une masselotte bien conçue peut augmenter significativement la largeur du bain de métal en fusion jusqu'à 235 mm dans les trois heures suivant la coulée.

Les résultats de cette étude sont susceptibles de faire avancer considérablement notre compréhension des mécanismes sous-jacents à la macroségrégation lors du processus de coulée de lingots. Cette nouvelle compréhension offre des promesses immenses pour des applications pratiques dans diverses industries, en particulier pour améliorer la qualité de la fabrication de lingots à grande échelle, notamment ceux fabriqués à partir d'acières à haute valeur ajoutée ou d'autres alliages susceptibles à la macroségrégation. De plus, ces résultats offrent des perspectives profondes sur l'impact des paramètres de la masselotte sur la cinétique de solidification, offrant ainsi une base pour optimiser les configurations de la masselotte afin de réduire les défauts de solidification et d'élever la qualité des lingots dans des environnements de production à plus grande échelle.

RECOMMANDATIONS

Dans le cadre du projet actuel, les effets de la géométrie de la masselotte, des conditions thermiques et de leur combinaison sur la sévérité de la macroségrégation ont été examinés à l'aide d'un modèle fiable pour un lingot d'acier à moyenne teneur en carbone et à haute résistance de 12 MT. En ce qui concerne le modèle et les futures recherches, les recommandations suivantes sont proposées:

1. Une quantité importante de données a été recueillie sur l'impact quantitatif de diverses configurations de masselotte sur la cinétique de solidification à la fois dans la masselotte et dans le corps du lingot. Ces données englobent le temps de solidification, le gradient de température, la vitesse d'écoulement du liquide, le taux de refroidissement, le taux de solidification, la température liquidus et la position de la Transition de Colonnaire à Équiaxe (TCE). De plus, des critères spécifiques de temps de solidification ont été recommandés pour réduire les défauts tels que la macroségrégation, les cavités de rétraction et la porosité de rétraction, en tenant compte de son double impact sur la formation des défauts. Il est recommandé d'appliquer ces critères de temps de solidification proposés en utilisant la nouvelle configuration de la masselotte et d'ajuster simultanément les paramètres de coulée pour augmenter les sites de nucléation et favoriser la nucléation des grains équiaxes. Cette approche vise à minimiser à la fois la macroségrégation positive et la ségrégation en ligne centrale.
2. Il est suggéré d'appliquer les nouvelles données provenant de la configuration modifiée de la masselotte, qui comprend des facteurs tels que le rapport de masse et une isolation accrue de la masselotte, à des lingots plus grands. Cela aidera à évaluer l'efficacité de la configuration modifiée à plus grande échelle. De plus, il est recommandé de mesurer les critères de temps de solidification pour ces lingots plus grands. Cela permettra une comparaison complète de la manière dont la taille du lingot influence les critères de temps de solidification, fournissant des informations sur l'optimisation du processus de coulée pour différentes tailles de lingots.

3. Dans le logiciel THERCAST®, l'onglet Structure des grains permet de définir les paramètres de nucléation dans les fichiers de matériau en utilisant la méthode CAFE (Automate Cellulaire 3D - Éléments Finis). Cette méthode permet la simulation à un niveau macrostructural de la solidification dendritique microstructurale. Elle est basée sur la modélisation de la nucléation développée par Thévoz et comprend un algorithme de croissance géométrique qui simule les formes des contours de grains dendritiques tout en tenant compte des résultats expérimentaux. L'avantage de la méthode CAFE est sa capacité à représenter simultanément des structures colonnaires et équiaxes. Il est recommandé d'appliquer le module de structure des grains dans le modèle développé. La nucléation peut être simulée si le fichier de matériau contient des données spécifiques. Il est suggéré de développer le fichier de matériau en déterminant expérimentalement les paramètres de la loi gaussienne, y compris le sous-refroidissement critique moyen, son écart type et la densité maximale des sites de nucléation.
4. Il est suggéré d'étudier l'impact de la configuration de la masselotte sur d'autres paramètres lors du processus de coulée, notamment l'évolution des inclusions, l'estimation des lignes fantômes (ghost lines, une zone de A ségrégation) en utilisant le critère de Suzuki, et l'estimation des déchirures à chaud en utilisant le critère de Yamanaka.

ANNEXE I

MODELING OF THE INFLUENCE OF HOT TOP DESIGN ON MICROPOROSITY AND SHRINKAGE CAVITY IN LARGE-SIZE CAST STEEL INGOTS

Neda Ghodrati¹, Abdelhalim Loucif², Jean-Benoit Morin², Mohammad Jahazi¹

¹ Department of Mechanical Engineering, École de Technologie Supérieure, 1100 Notre-Dame St. W, Montreal, QC H3C 1K3, Canada

² Finkl Steel—Sorel, 100 McCarthy, Saint-Joseph-de-Sorel, QC J3R 3M8, Canada

Cet article a été présenté lors de l'*AIST 2022 (Association for Iron & Steel Technology)*, 8e Congrès international sur la science et la technologie de la fabrication de l'acier, qui s'est tenu du 2 au 4 août 2022 à Montréal, QC, Canada.

AI.1 Résumé

L'effet des modifications apportées à la conception de la masselotte sur le risque de formation de microporosité et de cavité de rétraction lors de la solidification d'un lingot de 12 MT en acier allié au Cr-Mo a été étudié. Le code de modélisation par éléments finis tridimensionnels THERCAST® a été utilisé pour simuler les phénomènes thermomécaniques associés aux différentes phases de remplissage et de refroidissement du moule dans et hors du moule dans le processus de solidification. Les résultats des prédictions ont été validés par comparaison entre les résultats de la simulation et les mesures expérimentales de la composition chimique dans la partie totale du lingot et l'évaluation de la profondeur de la cavité de rétraction. L'influence de l'augmentation de la hauteur de la masselotte et de l'augmentation à la fois de la hauteur de la masselotte et de la hauteur du panneau latéral sur le risque de formation de microporosité dans la ligne médiane, de cavité de rétraction dans la masselotte et de temps de solidification a été déterminée. Les résultats ont révélé que la variation de la géométrie de la masselotte et de l'isolation thermique de la masselotte augmentait le temps de solidification, augmentait l'alimentation en liquide, réduisait la profondeur de la cavité de rétraction et réduisait la possibilité de microporosité dans la ligne médiane. Les résultats de la simulation ont également montré davantage d'effets de la conception combinée, y compris une

augmentation de la hauteur de la masselotte et de la hauteur du panneau latéral, sur la réduction de la porosité de rétraction de la ligne médiane, ainsi que de la cavité de rétraction.

AI.2 Introduction

L'acier haute résistance monobloc lourd est la matière première pour différentes applications industrielles telles que l'énergie, l'automobile et les transports. Le processus de fabrication commun pour l'acier haute résistance monobloc lourd est la coulée en lingot (Lan & Zhang, 2014) qui joue un rôle important dans la qualité du produit final. En effet, lors de la solidification de la coulée, la porosité de rétraction, la macroségrégation et les inclusions sont les défauts les plus importants qui pourraient détériorer les propriétés de l'acier haute résistance lourd. De plus, il est très difficile d'éliminer les défauts ci-dessus par des opérations thermomécaniques ultérieures (J. Wang et al., 2012). Traditionnellement, l'effet de certains défauts tels que la porosité de rétraction de la ligne médiane dans les lingots d'acier lourd était ignorée car le processus de forgeage ultérieur était capable de refermer les porosités de rétraction. Cependant, les pores ne sont pas éliminés si leur taille est trop importante. Par conséquent, il est important d'étudier les mécanismes de formation de la porosité de la ligne médiane dans les lingots de grande taille afin d'améliorer leur qualité (Lan & Zhang, 2014; J. Wang et al., 2012). D'autre part, les investigations purement empiriques sur les défauts de coulée sont coûteuses et compliquées en raison des dimensions importantes des pièces à usiner. Par conséquent, la technologie de calcul s'est rapidement développée pour analyser le processus de solidification et la formation de défauts lors de la solidification (Merton C Flemings, 1974; Edward John Pickering, 2013; J. Wang et al., 2012). Cependant, le mécanisme de formation de la rétraction inclut le flux de chaleur, le flux de masse et d'autres phénomènes compliqués, mais le calcul thermique pur est également une pratique couramment acceptée pour simuler la porosité de rétraction (J. Wang et al., 2012). Les critères de porosité de rétraction pour la coulée, tels que le critère du gradient de température, le critère de fraction solide critique et le critère de Niyama commun, ont été utilisés dans les modèles de macroségrégation développés pour prédire la possibilité de microporosité et simplifier les temps et les coûts élevés tout en fournissant des prédictions réalisistes (Edward John Pickering, 2013; J. Wang et al., 2012). La masselotte est l'une des configurations de lingot de coulée les plus importantes placée dans la partie

supérieure du moule et doublée d'un matériau réfractaire. La masselotte est responsable de l'alimentation continue pendant la coulée et du contrôle du flux de chaleur pendant la solidification (Hultgren, 1973). Ainsi, la variation des propriétés de la masselotte modifie l'alimentation liquide de la masselotte vers le corps du lingot et la possibilité de porosité de la ligne médiane (J. Wang et al., 2012). Pour cela, il est important de développer de nouveaux designs de masselotte dans le but de réduire la formation de défauts de coulée et, par conséquent, le coût global du produit (Qian et al., 2015). Ainsi, l'étude des propriétés de la masselotte est considérée numériquement depuis des années. Tashiro et al. (Tashiro et al., 1983) ont étudié les conditions de conception de la masselotte et du moule dans de grands lingots d'acier 0.25%C-3.5%Ni-Cr-Mo-V de 100 MT et 135 MT en utilisant la méthode des éléments finis (MEF). Ils ont rapporté l'importance de la conception géométrique du moule et de la masselotte sur la qualité du lingot. Ils ont constaté que la réduction du rapport de minceur H/D (le rapport de la hauteur du corps du lingot par rapport au diamètre moyen du corps du lingot) et l'augmentation du cône du lingot entraînent la réduction de la porosité centrale. Heidarzadeh et al. (Heidarzadeh & Keshmiri, 2013) ont rapporté la réduction de la porosité centrale d'un lingot d'acier de 4,4 MT de type X210Cr12 en raison de l'augmentation du cône du moule, de la réduction du rapport H/D et de l'incorporation d'une plaque isolante supplémentaire entre le corps du moule et la masselotte. Kermanpur et al. (Kermanpur et al., 2010) ont rapporté que le rapport de minceur inférieur du moule et la forme circulaire du matériau isolant dans la masselotte d'un lingot d'acier Cr-Mo de 6 MT améliorent l'efficacité du massif de dégorgeoir et réduisent la sensibilité aux fissures lors du forgeage à chaud ultérieur. Balcar et al. (Balcar et al., 2008) ont étudié un lingot d'acier à outils de 8.9 MT. Ils ont constaté que le rapport de minceur H/D inférieur, le cône plus prononcé et l'augmentation du volume de la masselotte réduisent les défauts axiaux et la macroségrégation. Wang et al. (J. Wang et al., 2012) ont étudié la conception optimisée dans un lingot d'acier de 100 MT pour réduire la porosité de rétraction et améliorer la qualité du lingot. Ils ont proposé d'augmenter le rapport de masse de la masselotte, de réduire le cône de la masselotte, d'utiliser un meilleur matériau isolant thermique, de préchauffer le moule de la masselotte et d'optimiser la conception du cône arrière du lingot pour éliminer la porosité de rétraction. Cependant, il convient de noter que dans les publications susmentionnées, l'effet combiné de la géométrie

du moule et de la masselotte est principalement étudié sur la porosité de rétraction. Dans le travail actuel, l'influence de deux conceptions de masselotte, notamment une augmentation de la hauteur de la masselotte et à la fois une augmentation de la hauteur de la masselotte et de la hauteur des panneaux latéraux, sur la porosité de rétraction de la ligne médiane ainsi que la profondeur de la cavité de rétraction dans un acier haute résistance de 12 MT a été étudiée en utilisant le code de modélisation par éléments finis 3D THERCAST®. Le critère de Niyama a été utilisé pour prédire la possibilité de formation de porosité de la ligne médiane dans le modèle de solidification.

AI.3 Matériaux et méthodes

La masse liquide avec une composition chimique comprenant 0.32 C, 1.08 Cr, 0.34 Mo, et 0.57 Mn a été versée par le bas dans un moule en fonte polygonal pour produire un lingot de 12 MT. La température de coulée était d'environ 1580 °C. Une masselotte en fonte, revêtue de réfractaire (panneau latéral), se trouvait dans la partie supérieure du moule. Deux couvertures exothermiques ont été placées sur le métal en fusion après la coulée. La Figure A I.1 montre l'assemblage de la configuration de coulée du lingot de 12 MT. Après la solidification complète, la profondeur de la cavité de rétraction a été mesurée expérimentalement.

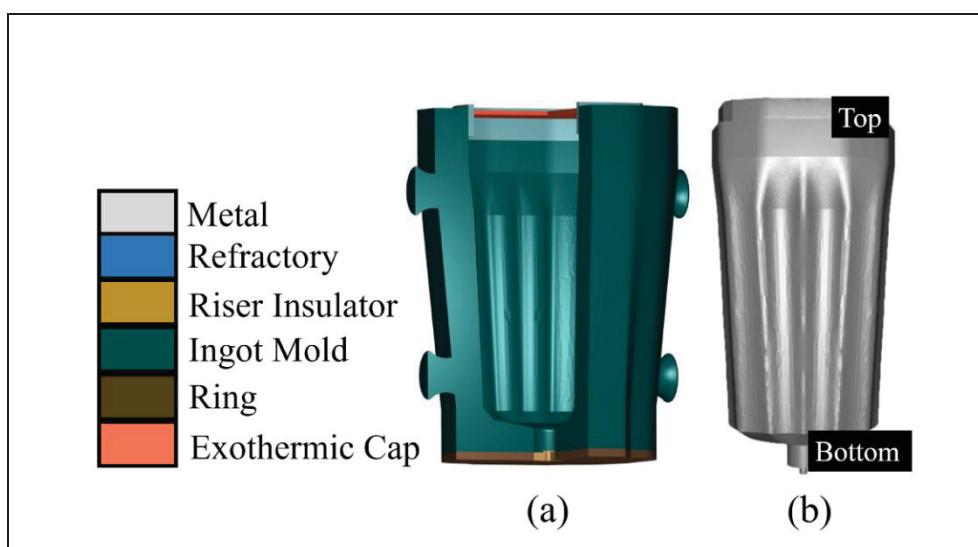


Figure A I.1 (a) Assemblage du lingot de 12 MT (modèle à 120°), (b) Lingot de 12 MT (modèle à 360°)

La simulation de coulée avec le logiciel THERCAST® a été utilisée pour simuler le remplissage du moule et le comportement thermomécanique du métal en fusion pendant la solidification pour un lingot de 12 MT (Transvalor, 2017). Il contient un solveur thermomécanique par éléments finis en 3D, basé sur une méthode Lagrangien-Eulérien arbitraire (ALE) pour calculer la convection thermique dans le bassin liquide et la zone pâteuse, et un lagrangien pour calculer la déformation dans les régions solides (Prafull Patil et al., 2017). Les paramètres d'entrée de la simulation, y compris les propriétés thermophysiques, les propriétés thermomécaniques, le calcul de la thermodiffusion et les conditions initiales des matériaux, ont été obtenus à partir du logiciel JMatPro® version11.0 (Sente.Software.Ltd, 2005), de la base de données des matériaux THERCAST® (TherCast2.1®, 2021), et de l'industrie (Finkl-Steel-Sorel). Après la simulation, le modèle de solidification a été validé en comparant les résultats de prédiction et les résultats expérimentaux tels que la profondeur de la cavité de rétraction. Un bon accord a été observé entre les résultats de simulation et d'expérience. Deux conceptions différentes de la masselotte ont été créées en termes d'augmentation du rapport de masse (poids du métal de la masselotte par rapport au poids total du métal) par rapport à la conception originale, avec un rapport de masse de 21.35% et une diminution du rapport de minceur du lingot de 12 MT. Ensuite, les deux nouvelles conceptions énumérées dans le Tableau A I.1 ont été simulées en considérant les mêmes paramètres d'entrée que les conceptions originales.

Tableau A I.1Différents Designs de la Masselotte

Type	Symbole	Augmentation du rapport de masse
Original	OD	-
Augmentation de la hauteur de la masselotte	ND1	10%
Augmentation de la hauteur de la masselotte et de la hauteur des panneaux latéraux	ND2	8.15%

AI.4 Résultats et discussions

AI.4.1 Porosité en ligne centrale

Le modèle de solidification disponible dans le code THERCAST® pour prédire la porosité en ligne centrale est basé sur les critères de Niyama (Prafull Patil et al., 2017; Transvalor, 2017) qui sont associés au gradient thermique en amont du front de solidification et au taux de refroidissement. Pendant la solidification, un faible gradient thermique et un taux de refroidissement élevé du métal en fusion dans le front de solidification entraînent le gel du métal en solidification avant que l'alimentation en liquide depuis la masselotte n'atteigne le front de solidification. Par conséquent, le vide se forme devant le front de solidification (Prafull Patil et al., 2017). Cependant, la taille et la forme précises des pores ne sont pas calculées par ce modèle, bien que le risque, la possibilité et les zones de formation de porosités puissent être prédits si la valeur de Niyama est supérieure à 1. En effet, il existe un potentiel de formation de porosités de rétraction (P. Patil et al., 2015). Le critère de Niyama est représenté par la formule mentionnée:

$$Niyama = \frac{\sqrt{\|\dot{T}\|}}{\|\Delta T\|} \quad \text{for } f_l = f_{lNi} \quad (\text{A I.1})$$

Où \dot{T} représente le taux de refroidissement et indique le taux de variation de la température d'un point dans le matériau avec le temps, ΔT est le gradient de température qui représente la différence de température entre un point et ses voisins dans le matériau, f_l indique la fraction liquide et f_{lNi} est la fraction liquide seuil. Le critère de Niyama est calculé à une fraction liquide seuil qui est considérée comme $f_{lNi} = 0.3$ dans THERCAST®. Le critère illustre donc que, pendant le refroidissement à un point dans le matériau, si le passage à un état de solidification donné par f_{lNi} se produit avec une chute de température importante ou une faible différence entre sa température et celle des points voisins ou les deux à la fois, alors ces éléments indiquent un risque de formation de micropores à ce point dans le matériau. En effet, l'équation de Niyama ci-dessus est l'inverse de l'expression du critère de Niyama comme on peut le voir

dans la littérature. Le risque élevé de formation de micropores est alors représenté par les faibles valeurs de critère, où 0 est la valeur minimale. Cependant, il est courant de supposer que les valeurs de critère élevées sont critiques. Ainsi, le résultat représenté par THERCAST® est conforme aux valeurs de critère élevées, ce qui représente une forte possibilité de formation de micropores (Transvalor, 2017).

Les résultats du risque de formation de microporosité en ligne centrale à la fin de la solidification pour la conception d'origine (OD) et les deux nouvelles conceptions (ND1 et ND2) ont été obtenus en utilisant les critères de Niyama dans ce travail. Les valeurs maximales de Niyama dans le corps du lingot ont été obtenues à 1.53, 1.15, et 1.2 pour OD, ND1, et ND2, respectivement, ce qui illustre la réduction de la possibilité de microporosité de retrait dans les nouvelles conceptions.

Selon les résultats, la profondeur totale de la microporosité en ligne centrale dans le corps du lingot par rapport à un point de référence (indiqué dans la Figure A I.2) était de 1300 mm, 1180 mm et 1267 mm respectivement dans OD, ND1 et ND2. La profondeur de la microporosité dans le corps du lingot a été réduite dans ND1 et ND2. Une relation directe entre la profondeur de formation de la microporosité dans le corps du lingot et le rapport de masse était évidente. La moindre profondeur de la microporosité en ligne centrale dans le corps du lingot a été observée dans ND1 avec le rapport de masse le plus élevé de 10% de plus que la conception d'origine. Par conséquent, une augmentation du rapport de masse a amélioré l'alimentation en liquide vers le corps du lingot et a entraîné un déplacement vers le haut de l'emplacement de la microporosité en ligne centrale dans le corps du lingot.

De plus, la Figure A I.2 révèle la différence dans la ligne de dispersion de la microporosité en ligne centrale dans OD, ND1 et ND2. La microporosité de retrait en ligne centrale s'est formée dans deux zones distinctes dans ND1, concentrées à 512 mm et 486 mm de longueur. Selon les résultats, il y avait 3.66% de zones avec des critères de Niyama inférieurs à 1 dans la ligne de dispersion de la microporosité de retrait dans ND1. De plus, trois zones distinctes ont été observées dans ND2, concentrées à 63 mm, 146 mm et 143 mm de longueur. Le pourcentage

de la zone avec des critères de Niyama inférieurs à 1 dans la ligne de dispersion de la microporosité de retrait était de 70% dans ND2. Par conséquent, l'emplacement de concentration de la microporosité en ligne centrale a été réduit en augmentant la hauteur de la masselotte et en augmentant à la fois la hauteur de la masselotte et la hauteur des panneaux latéraux. On peut ainsi constater que l'effet de la géométrie de la masselotte et de la capacité thermique est plus important que la géométrie seule sur la réduction de la condensation de la microporosité en ligne centrale. Ainsi, les nouveaux designs pourraient améliorer la qualité du lingot en termes d'élimination de la microporosité. Comme l'ont rapporté Wang et al. (J. Wang et al., 2012) une hauteur de masselotte plus élevée représente une capacité thermique plus importante, une alimentation de liquide plus élevé dans la partie centrale du lingot, et influe sur la porosité de retrait en ligne centrale.

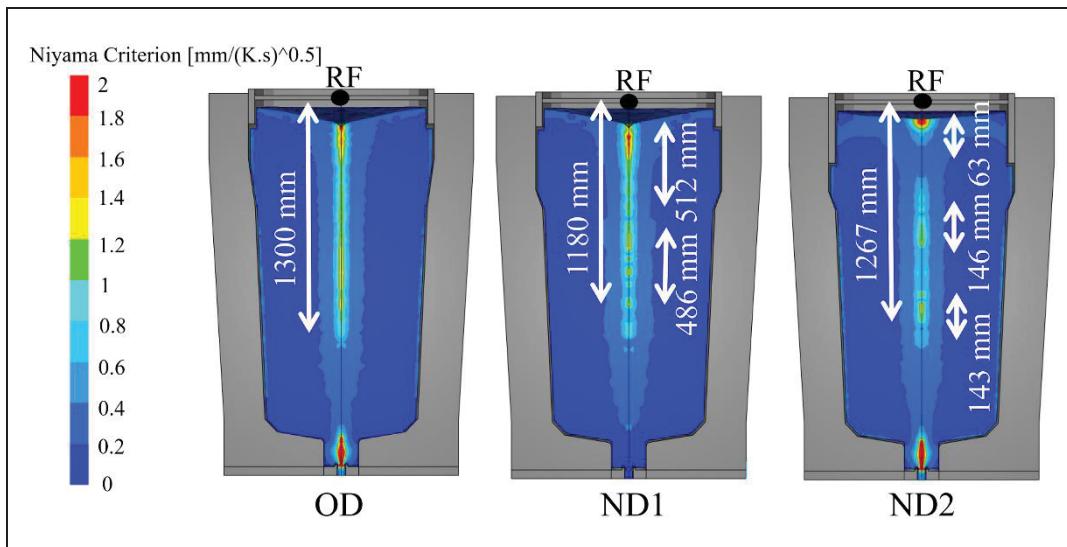


Figure A I.2 Possibilité de microporosité en ligne centrale à la fin de la solidification, RF indique le point de référence pour la mesure de la profondeur

AI.4.2 Cavité de rétraction

La cavité de rétraction macroscopique se forme dans la région de la masselotte en raison de la contraction thermique et du passage de l'état liquide à solide. Il y a une estimation basée sur le changement de la fraction liquide dans la zone liquide et pâteuse dans THERCAST®. Le principe de calcul est basé sur le calcul de la perte de volume obtenue dans le métal liquide

(Transvalor, 2017). La Figure A I.3 illustre le déplacement du lingot dû à la contraction à la fin de la solidification dans OD, ND1 et ND2. Selon les résultats, les déplacements verticaux du métal par rapport au point le plus haut du composant du moule en raison de la contraction étaient de 158.2 mm, 144 mm, et 88.9 mm dans OD, ND1, et ND2, respectivement, à la fin de la solidification. Les résultats ci-dessus révèlent que la surface supérieure du métal liquide refroidi plus lentement en augmentant la hauteur de la masselotte et en augmentant à la fois la hauteur de la masselotte et la hauteur des panneaux latéraux. Ainsi, la baisse de la surface du métal dans la région de la masselotte a été réduite en prolongeant le temps de solidification et en réduisant la vitesse de refroidissement du métal. En termes de rendement en matériau, moins de matériau solide a été gaspillé dans ND2 et ND1 respectivement qu'avec OD en raison de l'élagage de la zone de cavité de rétraction pour aplanir la surface supérieure du lingot. Ainsi, l'efficacité de l'utilisation du matériau augmente avec le changement de conception de la masselotte.

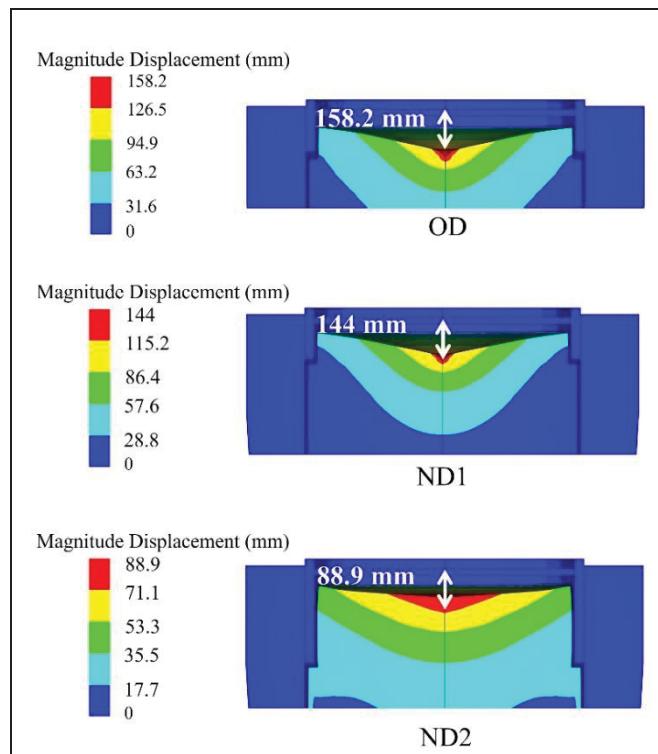


Figure A I.3 Vue de la magnitude du déplacement de la masselotte et de la rétraction dans différents designs

AI.4.3 Temps de solidification

Les résultats de la simulation 3D par éléments finis ont montré que les variations dans la conception de la masselotte affectent significativement le temps de solidification. Selon la Figure A I.4 une augmentation du temps de solidification d'environ 2.56% et 34% a été obtenue par une augmentation de la hauteur de la masselotte (ND1) et à la fois de la hauteur de la masselotte et de la hauteur du panneau latéral (ND2) par rapport à la conception d'origine (OD). On a observé que l'augmentation à la fois de la hauteur du matériau réfractaire et de la hauteur de la masselotte prolongeait davantage le temps de solidification que l'augmentation uniquement de la hauteur de la masselotte. Les variations de la masselotte dans ND1 et ND2 ont augmenté le volume de métal fondu dans la masselotte et amélioré la pression d'alimentation du métal liquide qui se trouve dans la masselotte sur le centre du corps de lingot. D'autre part, la solidification du métal liquide à l'intérieur de la masselotte a été retardée, et le temps d'alimentation pour les couches inférieures du corps de lingot et les dernières zones solidifiées a été augmenté. Le taux de refroidissement du métal fondu a été réduit en augmentant le temps de solidification. Ainsi, les variations de la masselotte, en particulier dans ND2, ont réduit la formation de porosité de rétraction centrale le long du centre du lingot. Qian et al. (Qian et al., 2015) ont constaté que le temps de solidification est un paramètre important influençant significativement la porosité de rétraction, et cela dépend fortement des conceptions du moule et de la masselotte. Ils ont montré qu'une augmentation du temps de solidification, en réglant la température de préchauffage dans une masselotte, réduit les défauts de porosité de rétraction.

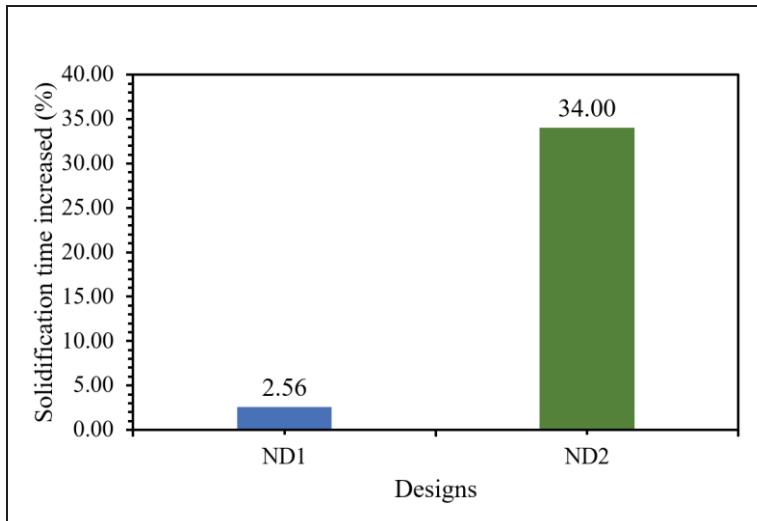


Figure A I.4 Le pourcentage de temps de solidification a augmenté par rapport aux conceptions d'origine

AI.5 Conclusions

La simulation par éléments finis 3D a été réalisée à l'aide du code THERCAST® pour étudier l'effet du changement de la masselotte sur la possibilité de microporosité de rétraction et de cavité de rétraction dans un lingot d'acier haute résistance de 12 MT. Dans le présent travail, une nouvelle conception comprenant une augmentation de la hauteur de la masselotte et une autre contenant à la fois une hauteur de masselotte accrue et une hauteur de panneau latéral accrue ont été étudiées. Les résultats obtenus sont les suivants:

1. Le changement de conception de la masselotte a amélioré la qualité du lingot en termes de réduction de la microporosité de rétraction de la ligne médiane.
2. La ligne de concentration de la microporosité a été affectée par le changement de géométrie de la masselotte et de la capacité thermique de la masselotte. L'effet de la combinaison des deux a été plus important que celui d'un seul pour atténuer la microporosité de la ligne médiane.

3. Les nouveaux designs, en particulier ND2, ont augmenté le rendement en matière de lingot en termes de découpe dans la zone de la masselotte, en raison d'une augmentation du temps de solidification et d'une diminution de la profondeur de la cavité de rétraction dans la zone de la masselotte.

AI.6 Remerciements

Le soutien technique et financier de Finkl Steel-Sorel Co., du Conseil de recherches en sciences naturelles et en génie du Canada (CRSNG) et de l'École de technologie supérieure est grandement apprécié.

ANNEXE II

INFLUENCE OF HOT TOP GEOMETRY ON THE SOLIDIFICATION TIME AND MACROSEGREGATION IN LARGE SIZE CAST INGOT USING FINITE ELEMENT MODELING

Neda Ghodrati¹, Abdelhalim Loucif², Morin Jean-Benoit², Henri Champliaud¹, et
Mohammad Jahazi¹

¹ Department of Mechanical Engineering, École de Technologie Supérieure, 1100 Notre-Dame St. W, Montreal, QC H3C 1K3, Canada

² Finkl Steel—Sorel, 100 McCarthy, Saint-Joseph-de-Sorel, QC J3R 3M8, Canada

Ce résumé étendu a été présenté lors de *COM2023*, la 62e Conférence des Métallurgistes, du 21 au 24 août 2023, à Toronto, en Ontario, au Canada.

AII.1 Introduction

Dans les industries lourdes telles que l'énergie, le transport et la machinerie, les lingots en acier forgé de grande taille sont fréquemment utilisés. Le processus de coulée par le fond est généralement utilisé pour produire des lingots à grande échelle (Ghodrati et al., 2024; Ghodrati, Loucif, et al., 2022a; Yu et al., 2022). La macroségrégation, qui correspond à la distribution hétérogène des éléments d'alliage sur de grandes distances, est un défaut qui se forme pendant la phase de solidification. Alors que pour les lingots de petite taille, l'application d'un traitement thermique d'homogénéisation permet d'éliminer ou de réduire significativement la macroségrégation, dans le cas des lingots de grande taille, il peut arriver que même des temps d'homogénéisation très longs ne permettent pas d'éliminer les zones macro-ségréguées (Ge, Ren, Cai, et al., 2018; E. J. Pickering et al., 2015; Yu et al., 2022). Le moule, la masselotte, le matériau réfractaire, le coureur et la trompette sont les principaux composants des configurations de lingots coulés. Le sommet du moule est l'endroit où la masselotte est placée, et elle est généralement recouverte d'un panneau latéral en matériau réfractaire. La masselotte contrôle le flux de chaleur au sommet du lingot et assure l'alimentation continue des lingots pendant leur solidification; par conséquent, elle joue un rôle important dans le processus de

solidification et donc dans la sensibilité à la macroségrégation du lingot (Ghodrati, Baiteche, et al., 2022). En raison de cela, le développement de nouveaux designs de masselotte pour réduire les défauts de coulée tels que la macroségrégation est important. Des études numériques de la macroségrégation ont été étendues ces dernières années en raison des coûts significatifs et des difficultés liées à l'étude expérimentale des grands lingots. Tashiro et al. (Tashiro et al., 1983) ont utilisé la modélisation par éléments finis pour étudier les impacts des conceptions de moules et de masselottes sur le taux de solidification et le développement de la porosité centrale. Ils ont étudié l'influence de l'isolation et de la réduction de la capacité thermique de la masselotte sur les caractéristiques de solidification d'un alliage à 0.25 C-3.5Ni-Cr-Mo-V. L'impact de l'isolation du matériau réfractaire de la masselotte sur les échanges thermiques et la macroségrégation d'un lingot d'acier de 6.2 tonnes a été étudié par Kumar et al. (Kumar et al., Juin 2012). L'utilisation de matériau réfractaire exothermique a entraîné une augmentation de la macroségrégation axiale dans la masselotte et en dessous de la masselotte, selon leurs résultats. Wang et al. (J. Wang et al., 2012) ont rapporté que l'amélioration du matériau d'isolation thermique dans la masselotte, le préchauffage de la masselotte et l'ajout de briques isolantes à la masselotte ont tous contribué à une diminution de la porosité de rétraction d'un lingot en acier de 100MT. Cependant, très peu de données sont disponibles sur l'impact de la hauteur de la masselotte sur l'étendue et la sévérité de la macroségrégation. Dans le présent travail, la modélisation de macroségrégation par éléments finis en 3D et des travaux expérimentaux sont utilisés pour examiner l'effet de la hauteur de la masselotte sur la variation de la macroségrégation dans un lingot de grande taille en acier à faible teneur en carbone et à haute résistance. Initialement, le modèle MEV a été validé par des résultats expérimentaux, dont les détails sont rapportés dans la référence (Ghodrati, Baiteche, et al., 2022), puis a été utilisé pour modifier les paramètres de la masselotte et observer leur impact sur la macroségrégation.

AII.2 Matériaux et méthodes

Un lingot de 12MT avec une composition chimique comprenant 0.32 C, 1.08 Cr, 0.34 Mo, et 0.57 Mn a été produit en utilisant le processus de coulée par le bas dans un moule en fonte polygonal. La masselotte était recouverte de deux capuchons exothermiques sur sa surface

supérieure et à l'intérieur par le panneau latéral. Une fois la solidification terminée, une tranche a été coupée dans la direction longitudinale du lingot depuis son centre. Les 370 échantillons ont été prélevés dans différentes régions de la masselotte et du cœur du lingot, puis analysés chimiquement pour produire une carte de macroségrégation de l'ensemble du lingot. Le taux de ségrégation de chaque élément a été calculé à l'aide de la formule $R^i = (\omega^i - \omega_0^i) / \omega_0^i$. Ici, R^i est le taux de ségrégation de l'élément soluté i , ω^i est la concentration locale de soluté et ω_0^i est sa concentration initiale. Une valeur positive ou négative de R^i représente respectivement une ségrégation positive ou négative (Ghodrati, Baiteche, et al., 2022). La simulation du remplissage du moule et du comportement thermomécanique du métal fondu pendant la solidification a été réalisée en utilisant le code à éléments finis THERCAST® (Ghodrati, Baiteche, et al., 2022; Ghodrati, Loucif, et al., 2022a; TherCast2.1®, 2021). Le modèle de macroségrégation a été validé en comparant les prédictions et les résultats expérimentaux de la macroségrégation du carbone, en tant qu'élément le plus important influençant les propriétés mécaniques. Les détails concernant les conditions aux limites sont rapportés dans la référence (Ghodrati, Baiteche, et al., 2022). La Figure A II.1 montre l'assemblage de la configuration de coulée du lingot de 12MT. Deux nouveaux designs de masselotte (Tableau A II.1) ont été étudiés en termes de changement de hauteur de la masselotte et de rapport de masse (rapport du poids de la masse de la masselotte sur le poids total de la masse). Le rapport de masse est un paramètre important influençant l'alimentation en liquide pendant la solidification de la masselotte vers le corps. Comme l'a rapporté Scepi, le rapport de masse de la masselotte du lingot ne doit pas être inférieur à 23% (Scepi et al., 1981). Deux nouveaux scénarios de la masselotte ont été étudiés en fonction de rapports de masse plus élevés ou plus bas pour examiner leur impact sur la sévérité de la ségrégation. Les résultats obtenus pour les deux nouveaux designs sont comparés à ceux obtenus en utilisant la masselotte existante. De plus, les mêmes paramètres d'entrée utilisés pour la géométrie actuelle de la masselotte utilisée par l'industrie, ci-après appelée Conception Originale, ont été utilisés pour la validation des deux nouvelles géométries proposées.

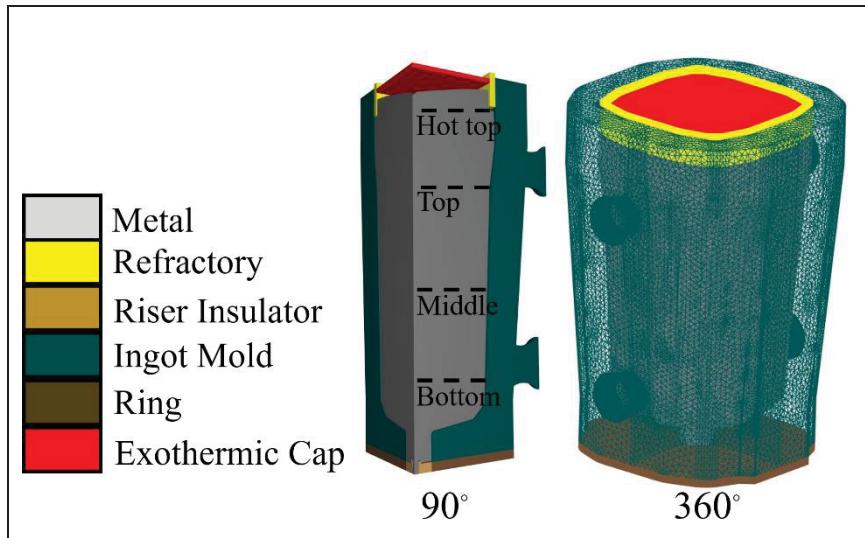


Figure A II.1 L'assemblage des composants de la configuration de coulée du lingot de 12MT

Tableau A II.1 Paramètres de la masselotte dans les différents designs

Description	Symbol	Hauteur de la masselotte (mm)	Hauteur des panneaux latéraux (mm)
Design original	OD	381	203
Augmentation de la hauteur de la masselotte	ND1	546	368
Diminution de la hauteur de la masselotte	ND2	181	203

AII.3 Résultats et discussions

AII.3.1 Macroségrégation

Le ratio de ségrégation des éléments d'alliage a été calculé par le modèle de macroségrégation dans THERCAST®. Le ratio de ségrégation du carbone a été obtenu sur un grand nombre de nœuds dans la direction radiale et à diverses positions du lingot. Ensuite, les valeurs maximales et minimales du ratio de ségrégation ont été calculées dans chaque direction horizontale. Le Tableau A II.2 rapporte les ratios de ségrégation du carbone dans la direction radiale pour les positions inférieure, médiane, supérieure et de la masselotte (Figure A II.1) dans OD, ND1, et

ND2. Les modifications de la conception de la masselotte entraînent une variation de la plage de ratio de ségrégation dans la direction radiale à différentes positions du lingot. Plus précisément, les résultats montrent que la diminution de la plage de ségrégation maximale dans ND1 est plus importante que dans ND2 aux parties inférieure, médiane, supérieure et de la masselotte du lingot. La plage de ségrégation minimale varie quelque peu dans les nouvelles conceptions par rapport à l'originale.

Tableau A II.2 Plage de ratio de ségrégation du carbone dans la direction radiale à différents emplacements du lingot

Conception	Bas		Milieu		Haut		Masselotte	
	Max	Min	Max	Min	Max	Min	Max	Min
OD	0.22	-0.14	0.12	-0.21	0.11	-0.12	0.53	-0.11
ND1	0.06	-0.14	0.03	-0.19	0.05	-0.20	0.30	0.05
ND2	0.05	-0.14	0.21	-0.20	0.06	-0.12	0.49	-0.09

AII.3.2 Temps de solidification

Une augmentation de 43.3% de la hauteur de la masselotte dans ND1 a entraîné un retard dans le temps de solidification du lingot. Le temps de solidification de ND1 a été prolongé de 27.5%. Par rapport à la conception originale, ND2 avait une hauteur de masselotte réduite jusqu'à 52.5%, ce qui a entraîné une réduction de 5 % du temps de solidification. Le Tableau A II.3 présente la variation du temps de solidification en termes de pourcentage de changement. Par rapport à OD, une valeur positive indique un temps de solidification plus long et une valeur négative, un temps de solidification plus court. Par conséquent, l'augmentation du rapport de masse suite à l'augmentation de la hauteur de la masselotte a prolongé le temps de solidification, réduit le taux de solidification et augmenté l'alimentation en liquide vers la partie centrale du corps du lingot.

Tableau A II.3 La variation en pourcentage du temps de solidification dans différentes conceptions

Conception	% Variation du temps de solidification
ND1	+27.5%
ND2	-5%

AII.4 Conclusion

En utilisant la méthode des éléments finis, deux nouveaux designs de masselotte ont été simulés en tenant compte du changement de hauteur de la masselotte. Le temps de solidification est sensible à la hauteur de la masselotte et au rapport de masse. Les résultats montrent qu'à mesure que la hauteur de la masselotte augmente, la plage de macroségrégation est réduite par la prolongation du temps de solidification.

AII.5 Remerciements

Le Conseil de recherches en sciences naturelles et en génie du Canada (CRSNG), Finkl Steel-Sorel Co. et l'École de technologie supérieure ont fourni une assistance technique et financière, que nous apprécions profondément.

ANNEXE III

MISE EN ŒUVRE DES RÉSULTATS OBTENUS À PARTIR DES LINGOTS D'ACIER DE 12 MT DANS DES LINGOTS D'ACIER PLUS IMPORTANTS DE 20 MT POUR RÉDUIRE LA MACROSEGREGATION EN MODIFIANT LA MASSELOTTE

Cette section résume les efforts entrepris dans la production et l'analyse des lingots d'acier de 20 MT. Les résultats de ces initiatives sont prévus pour publication dans un avenir proche.

AIII.1 Introduction

Dans ce projet, nous nous sommes appuyés sur des recherches précédentes sur l'influence des caractéristiques de la masselotte sur les défauts à l'échelle macro, en mettant particulièrement l'accent sur la gravité et la formation de la macroségrégation dans un lingot d'acier à haute résistance moyenne-carbone de 12 MT, et avons appliqué ces connaissances à un lingot d'acier plus grand de 20 MT. Notre objectif principal était de modifier la conception de la masselotte pour réduire la macroségrégation, la microporosité et les cavités de rétraction, améliorant ainsi la qualité globale et l'intégrité structurale du lingot d'acier de 20 MT.

Pour atteindre ces objectifs, nous avons mené une série étendue d'expériences et de simulations. Nous avons développé un modèle MEF 3D de 90°, représentant un quart du système de coulée complet, en utilisant le code MEF commercial THERCAST®. Ce modèle simule les processus de remplissage et de solidification avec un algorithme à deux phases solide-liquide moyennées dans le volume. Il intègre des phénomènes thermo-mécaniques tels que le remplissage du moule, le refroidissement, la convection solutale et l'écoulement induit par la rétraction pour prédire la macroségrégation et le risque de porosité et de cavités de rétraction avec différentes géométries de la masselotte.

La simulation de référence a été réalisée en utilisant la configuration de coulée industrielle d'origine et validée par le biais d'essais expérimentaux complets, comprenant la mesure de la température sur la surface extérieure du moule pendant le processus de coulée. Après

validation, trois nouvelles configurations de la masselotte ont été appliquées au modèle, et des simulations ont été effectuées pour chaque configuration. Les sections suivantes fournissent un compte rendu détaillé des méthodologies employées, des dispositifs expérimentaux, des paramètres de simulation et des résultats obtenus.

AIII.2 Experimental measurements

Dans cette étude, un acier cylindrique à haute résistance au carbone moyen de 20 MT, contenant 0.34% C, 0.90% Mn, 0.52% Mo, 1.85% Cr, 0.65% Ni, et 0.35% Si en poids, a été fabriqué à l'aide d'un système de coulée par le bas dans un moule en fonte positionné avec son extrémité la plus large tournée vers le haut. Les dimensions de la cavité du moule étaient d'environ 2567 mm de hauteur, avec un diamètre supérieur de 1353 mm et un diamètre inférieur de 1167 mm. La masselotte, se tenant à une hauteur de 330.38 mm, était isolée avec des carreaux de la même hauteur. De plus, deux couvertures exothermiques composées de composés Al, SiO₂ et Al₂O₃, générant une chaleur significative au contact du métal en fusion, ont été placées sur la surface supérieure de la masselotte, générant une chaleur significative au contact du métal en fusion. La réaction exothermique principale, régie par la composition de la couverture exothermique, est représentée par l'équation chimique ($2\text{Al} + \text{Fe}_2\text{O}_3 = 2\text{Fe} + \text{Al}_2\text{O}_3 + \text{Q}$) (Hurtuk, 2008; Yadong et al., 2019). La Figure A III.1 illustre la configuration de la lingotière industrielle, montrant la masselotte, le lingot de 20 MT, la trompette et le moule.

Le métal en fusion, provenant d'un four à arc électrique, a subi un traitement dans un four à poche et un dégazage sous vide. Ensuite, il a été versé par le bas dans le moule en fonte à une température de 1560 °C pendant une durée de 20 minutes. Tout au long des processus de coulée et de solidification, la température du moule a été méticuleusement surveillée à l'aide de six thermocouples placés stratégiquement, situés à une profondeur de 25 mm dans la paroi du moule à partir de la surface extérieure, comme le montre la Figure A III.2. Deux thermocouples ont été positionnés à l'intérieur de la masselotte (TC1 et TC2), tandis que les quatre autres ont été répartis dans les parties supérieure (TC3), médiane (TC4) et inférieure du moule (TC5, TC6), comme détaillé dans le Tableau A III.1. L'énergie totale libérée lors de l'allumage des deux couvertures exothermiques à la fin du remplissage s'est élevée à 13 MJ.

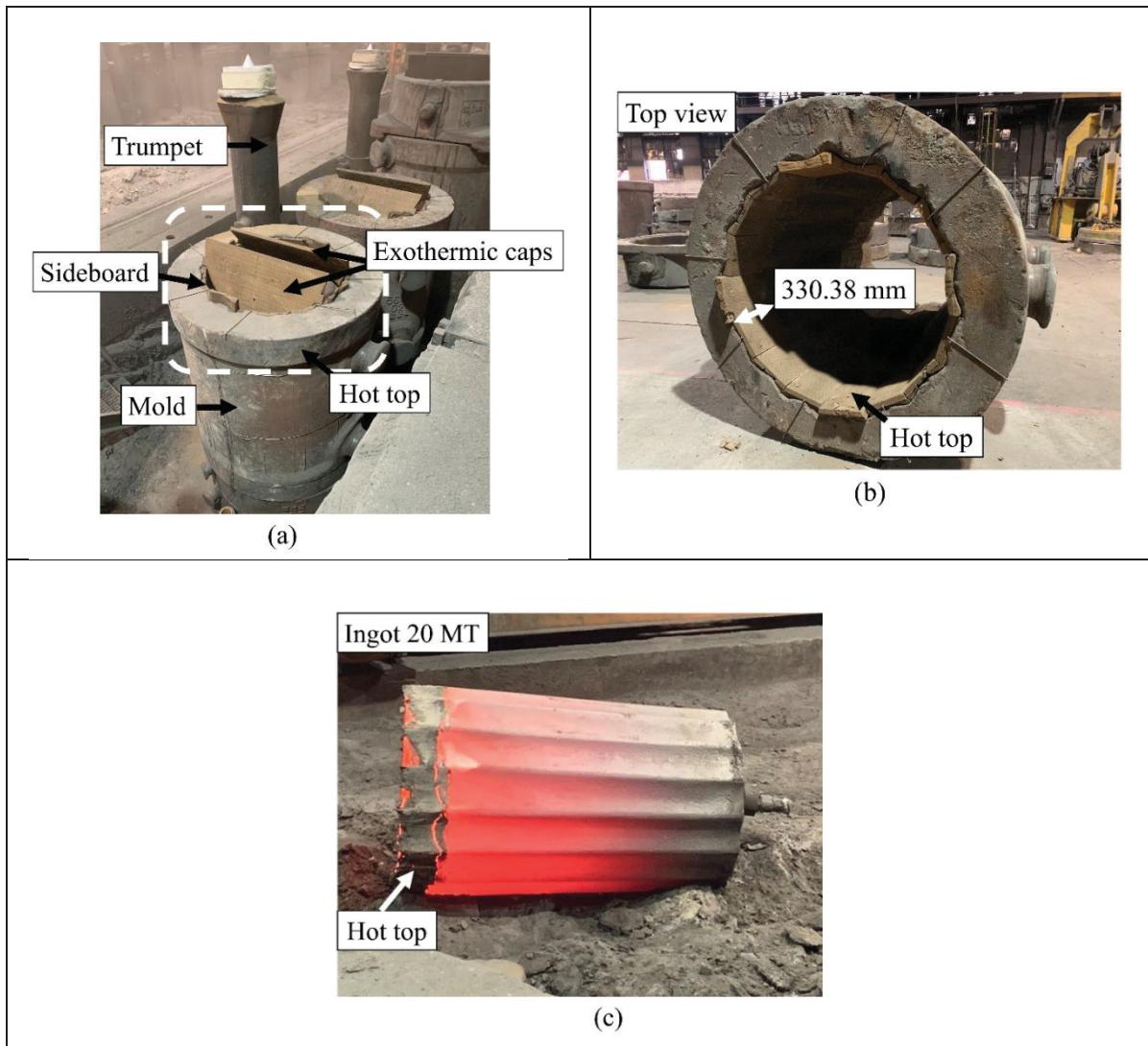


Figure A III.1 (a) Configuration de coulée de lingot industriel par le bas pour 20 MT, (b) La masselotte vue d'en haut, (c) Lingot de 20 MT après la coulée

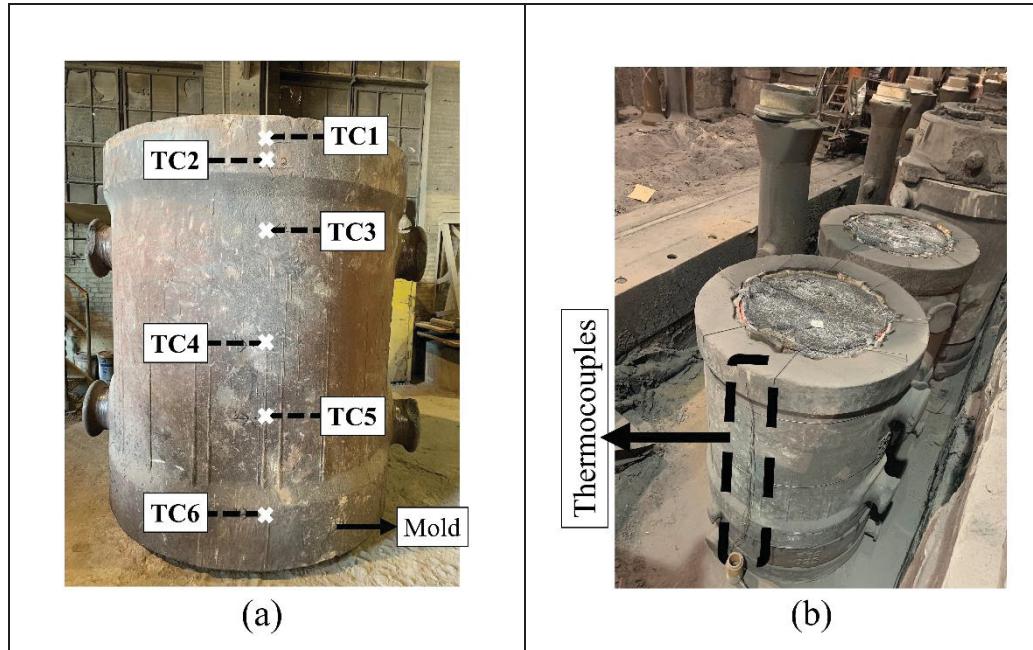


Figure A III.2 (a) La position des 6 thermocouples (TC1 à TC6) sur la surface externe du moule du lingot de 20 MT, (b) Le moule, avec les thermocouples, est installé dans le système de coulée

Tableau A III.1 La position des thermocouples sur la surface du moule

Nombre de thermocouples (TC)	Distance depuis la surface supérieure du moule
TC1	127 mm
TC2	228 mm
TC3	508 mm
TC4	1066 mm
TC5	1422 mm
TC6	1905 mm

AIII.3 Modélisation

Le logiciel de simulation de coulée THERCAST® a été utilisé pour modéliser le remplissage du moule et le comportement thermomécanique du métal en fusion pendant la solidification pour une coulée de 20 MT (Transvalor, 2017). Ce logiciel comprend un solveur thermomécanique à éléments finis 3D, utilisant une méthode Lagrangien-Eulerien arbitraire (ALE) pour calculer la convection thermique dans le bain de fusion liquide et la zone pâteuse,

et une méthode Lagrangienne pour calculer la déformation dans les régions solides (Prafull Patil et al., 2017). Le modèle géométrique de l'installation de coulée a été réalisé à l'aide du logiciel CATIA™ (CATIA.V5.R20, 2020) (Figure A III.3). Exploitant la symétrie, un segment de 90° du modèle a été utilisé dans les simulations MEF pour réduire le temps de simulation. Les composants du lingot et du moule ont été discrétisés spatialement à l'aide de 907,850 éléments tétraédriques linéaires tridimensionnels. Une taille de maillage moyenne de 30 mm, affinée à 15 mm et 8 mm dans des régions spécifiques, a été sélectionnée sur la base d'analyses préliminaires d'optimisation de la taille du maillage précédemment menées sur une lingotière de 12 MT dans des études antérieures (Figure A III.3b). Le débit de métal en fusion est resté constant tout au long du processus de remplissage, calculé à 575,000 mm³/s pour le segment de symétrie de 90. À la fin du remplissage, l'allumage des deux couvertures exothermiques a libéré une énergie totale de 13 MJ. Les données initiales, y compris le temps de coulée, le volume du lingot pour le calcul du débit et la composition chimique des couvertures pour le calcul de l'énergie d'allumage, ont été fournies par le partenaire industriel (Finkl-Steel-Sorel).

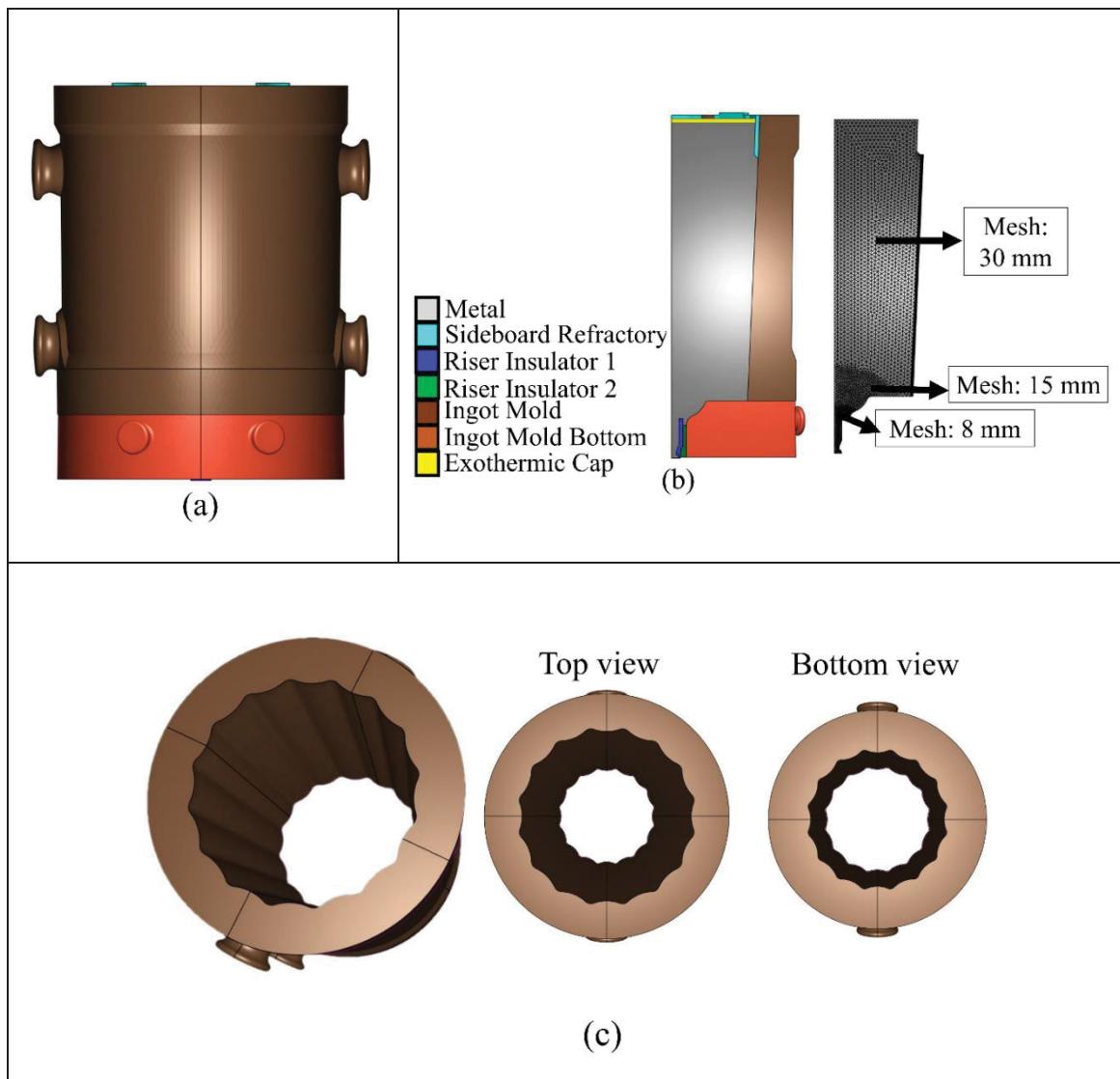


Figure A III.3 (a) Modèle 3D complet de 360° créé pour reproduire le système de coulée réel (Vue de face de l'ensemble du système), (b) Composants individuels du système présentant un modèle de 90° et une image du maillage avec 907,850 éléments (taille de grille de 30 mm avec un raffinement de maillage moyen de 15 mm à 8 mm), (c) Moule en fonte coulé avec la grande extrémité vers le haut

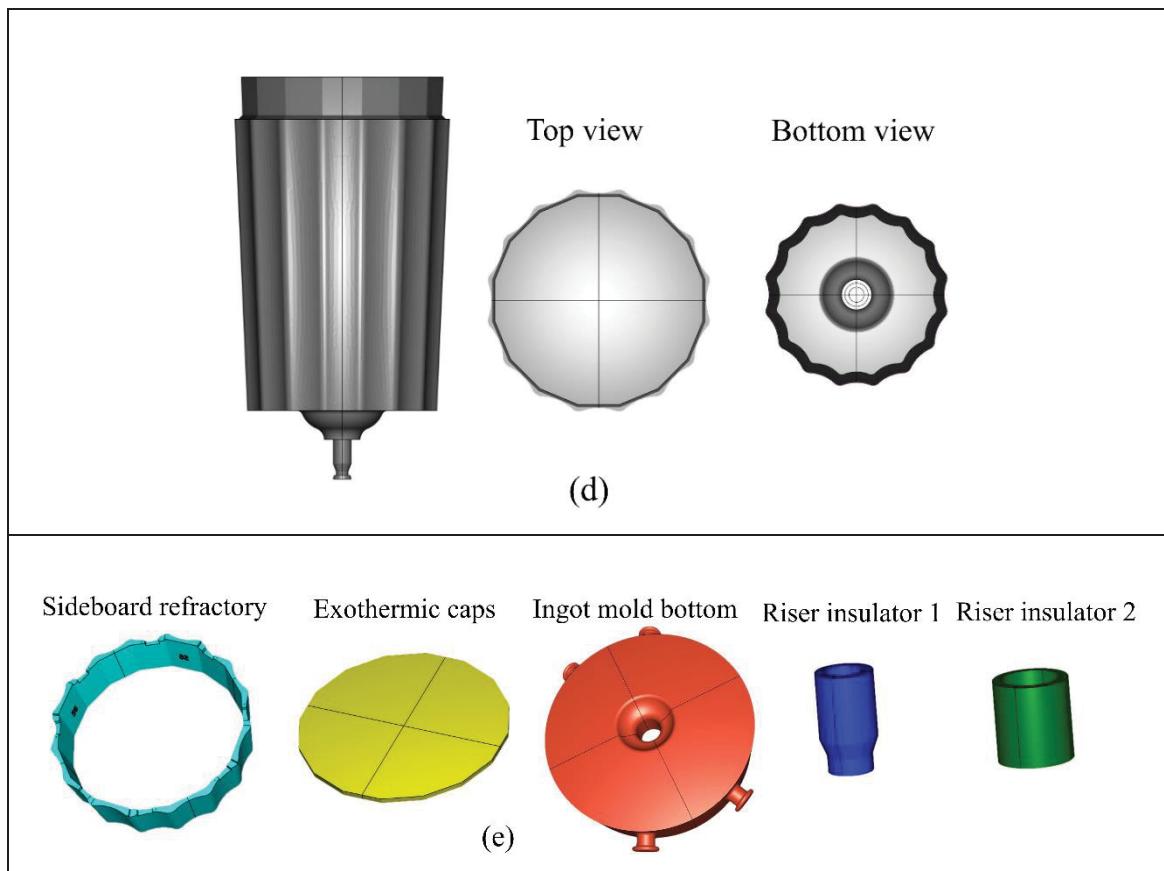


Figure A III.3 (d) Lingot cylindrique affiché avec des vues de dessus et de dessous, (e) Composants divers comprenant le dispositif de coulée

Les paramètres d'entrée de la simulation, y compris les propriétés thermophysiques, les propriétés thermomécaniques, le calcul de la thermodiffusion et les conditions aux limites, ont été sélectionnés à partir du modèle validé du coulage de 12 MT. Comme détaillé dans les chapitres 2 à 5, ces données ont été obtenues à partir du logiciel JMatPro® version 11.0 (Sente.Software.Ltd, 2005), de la base de données des matériaux THERCAST® (TherCast2.1®, 2021), de la littérature (C Zhang et al., 2018) et du partenaire industriel Finkl-Steel-Sorel (Finkl-Steel-Sorel). L'alliage utilisé était un AISI 4130 modifié, choisi en fonction du modèle validé de 12 MT, qui présente une composition chimique similaire à celle de l'acier utilisé dans les mesures expérimentales de cette étude. La composition chimique est fournie dans le Tableau A III.2. Les paramètres d'entrée pour la simulation sont compilés dans le Tableau A III.3 et Tableau A III.4.

Tableau A III.2 Composition chimique nominale de l'acier étudié (wt.%)

C	Mn	P	S	Si	Ni	Cr	Mo	Cu	Fe
0.32	0.57	0.015	0.001	0.27	0.23	1.08	0.34	0.16	Équilibre

Tableau A III.3 Les propriétés du système de coulée

Nom	Propriété	Unité	Valeur	Référence
Acier	Densité de référence	Kg/m ³	6.93e-6	(Sente.Software.Ltd, 2005; TherCast2.1®, 2021)
	Température de fusion du fer pur	°C	1540	(TherCast2.1®, 2021)
	Température de référence (liquidus)	°C	1502	(Sente.Software.Ltd, 2005)
	Coefficient de dilatation thermique	1/K	8.853e-5	(TherCast2.1®, 2021)
	Chaleur latente de fusion	kJ/kg	265	(TherCast2.1®, 2021)
	Émissivité	-	0.8	(TherCast2.1®, 2021; C Zhang et al., 2018)
Moule en fonte	Densité	Kg/m ³	7000	(TherCast2.1®, 2021)
	Conductivité thermique	W/(m.K)	30	(TherCast2.1®, 2021)
Panneaux latéraux réfractaires	Densité	kg/m ³	2353	(TherCast2.1®, 2021; C Zhang et al., 2018)
	Conductivité thermique	W/(m.K)	1.2	(TherCast2.1®, 2021; C Zhang et al., 2018)
Isolant réfractaire de riser	Densité	kg/m ³	868	(TherCast2.1®, 2021)
	Conductivité thermique	W/(m.K)	0.45	(TherCast2.1®, 2021)
Couverture exothermique	Densité	kg/m ³	500	(TherCast2.1®, 2021)
	Conductivité thermique	W/(m.K)	0.2	(Finkl-Steel-Sorel)
l'anneau (ring) en ciment	Densité	kg/m ³	1700	(TherCast2.1®, 2021)
	Conductivité thermique	W/(m.K)	1.23	(TherCast2.1®, 2021)

Tableau A III.4 Paramètres d'entrée initiaux

Propriété	Unité	Valeur	Référence
Temps de remplissage	min	20	(Finkl-Steel-Sorel)
Température initiale du moule et des composants du moule	°C	50	(Finkl-Steel-Sorel)
Température environnementale extérieure	°C	20	(Finkl-Steel-Sorel)
Température de coulée	°C	1560	(Finkl-Steel-Sorel)
Propriété	Unité	Valeur	Référence
Température de surchauffe	°C	58	(Finkl-Steel-Sorel; Sente.Software.Ltd, 2005)
Température du liquidus	°C	1502	(Sente.Software.Ltd, 2005)
Débit pour le modèle à symétrie 90°	mm ³ /s	575,000	(Finkl-Steel-Sorel)
Énergie d'allumage de deux couvertures exothermiques	MJ	13	(Finkl-Steel-Sorel)

AIII.4 Validation du modèle

La simulation de référence a été réalisée en utilisant le dispositif de coulée industrielle original et validée par des essais expérimentaux détaillés, comprenant la mesure de la température de la surface du moule pendant le processus de coulée. Les variations de température prévues au fil du temps sur la surface externe du moule ont été comparées aux valeurs mesurées par des thermocouples (TCs), comme illustré dans la Figure A III.2 et énumérées dans le Tableau A III.1. Dans la Figure A III.4, la phase initiale montre une augmentation rapide de la température, reflétant le contact séquentiel entre le métal fondu et le moule lors du versement. Cette montée en température ralentit ensuite en raison de la dissipation thermique depuis la paroi du moule. Environ 4.5 to 6 heures après avoir atteint leurs températures maximales, une baisse est observée. Le panneau isolant dans la masselotte, avec sa conductivité plus faible, modère l'augmentation de température, entraînant les températures maximales les plus basses enregistrées par TC1 et TC2. Il y a une concordance claire entre les valeurs prévues par le modèle et les températures mesurées, en particulier dans la zone de la masselotte. Les différences de température, allant de 8 à 40 °C, entre les lectures des thermocouples et les

prédictions de la simulation peuvent être attribuées à des incertitudes dans les valeurs de conductivité thermique à la fois pour le moule en fonte et les panneaux réfractaires utilisés dans le modèle. La conductivité thermique du moule en fonte a été obtenue à partir de la base de données JMatPro® (Sente.Software.Ltd, 2005; Transvalor, 2017) et la conductivité des réfractaires a été fournie par la fiche technique du fabricant.

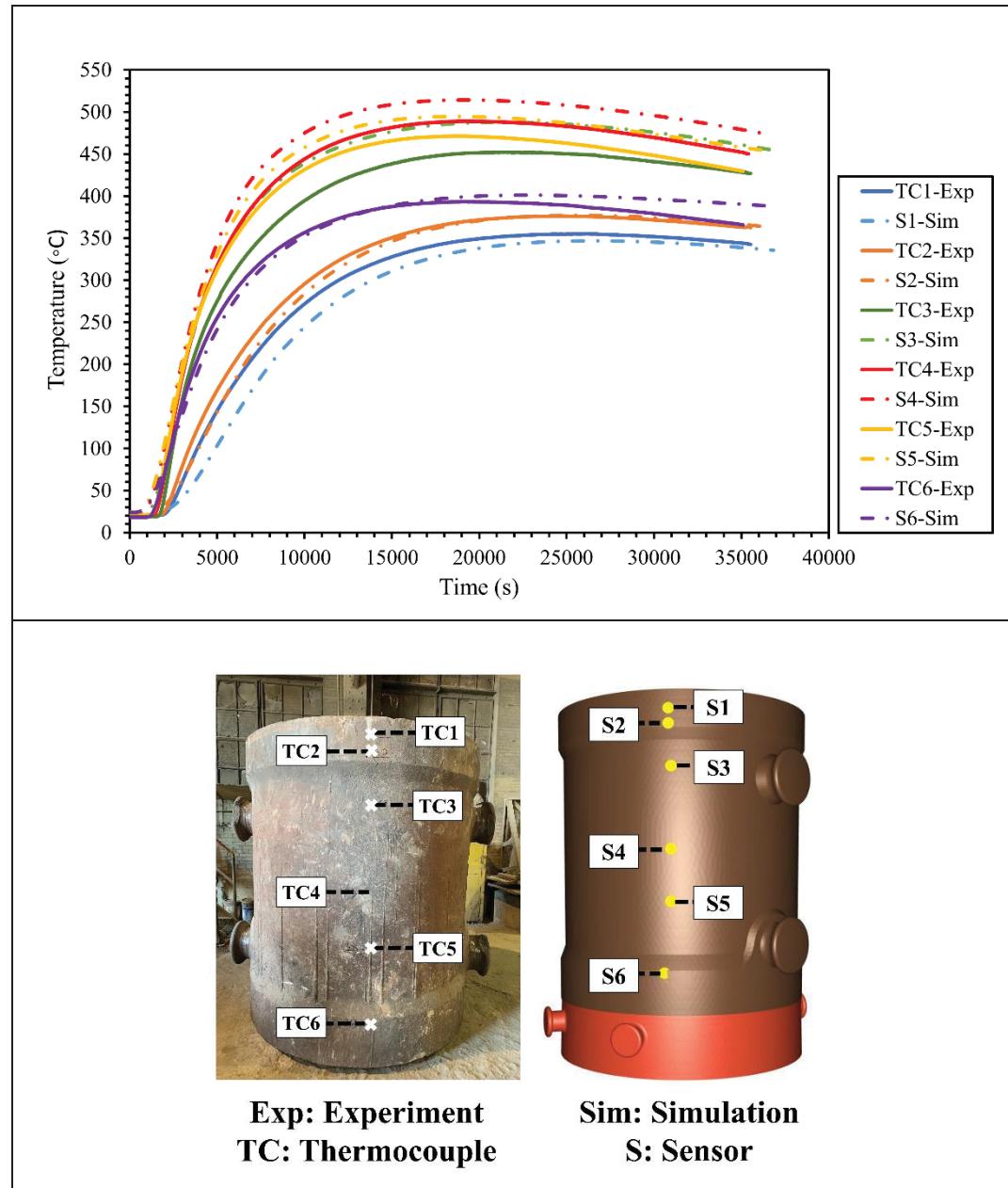


Figure A III.4 Profils de température sur la surface externe du moule pendant la solidification d'un lingot de 20 MT: comparaison entre les mesures expérimentales avec des thermocouples (TC) et les températures prévues dérivées de la simulation thermomécanique utilisant des capteurs

AIII.5 Configurations de la masselotte

Trois configurations de masselottes différentes (Tableau A III.5), étiquetées ND1 à ND3, ont été étudiées en fonction des contraintes et des exigences du partenaire industriel, ainsi que des connaissances acquises lors de l'étude précédente sur l'lingot de 12 MT. La conception d'origine (OD) a un rapport de masse d'environ 14 % et présente un panneau latéral complet (réfractaire) recouvrant la masselotte avec une conductivité thermique de 1.23 W/(m.K) (Figure A III.5a). Les caractéristiques clés de chaque nouvelle conception par rapport à la conception d'origine sont les suivantes:

- Dans ND1, la hauteur du panneau latéral a été augmentée de 50.8 mm, et le moule a été rempli avec du métal fondu jusqu'à la surface supérieure du moule, ce qui a entraîné une augmentation de 50.8 mm de la surface métallique vers la surface du moule à la fin du remplissage (Figure A III.5b).
- Dans ND2 (Figure A III.5c), il y a eu un décalage de la position du panneau latéral vers la surface supérieure de la masselotte.
- Pour ND3 (Figure A III.5d), un matériau cimentaire a été utilisé pour recouvrir l'intérieur de la paroi de la masselotte au lieu du matériau réfractaire des panneaux latéraux pour réduire le coût du matériau réfractaire par coulée, car les panneaux latéraux sont changés à chaque coulée. La chaleur spécifique et la densité du ciment sont 935.4 J/kg/K et 1700 kg/m³, respectivement, tandis que ces valeurs pour le matériau réfractaire du panneau latéral sont 980 J/kg/K et 2353 kg/m³. La Figure A III.6 illustre la conductivité thermique du ciment et du matériau réfractaire. En comparant les propriétés thermophysiques du ciment et du matériau réfractaire du panneau latéral, le ciment a été choisi pour être utilisé à la place du panneau latéral.

Tableau A III.5 Caractéristiques des configurations de conception étudiées

Description	Symbole	Hauteur de la masselotte	Hauteur du revêtement	Type de revêtement	Conductivité thermique
Conception originale	OD	330.38 mm	330.38 mm	Réfractaire	1.23 W/(m.K)
Augmentation de la hauteur du panneau latéral de 50.8 mm	ND1	330.38 mm	381.18 mm	Réfractaire	1.23 W/(m.K)
Déplacement du panneau latéral vers le haut de 50.8 mm	ND2	330.38 mm	330.38 mm	Réfractaire	1.23 W/(m.K)
Utilisation de ciment au lieu de panneau latéral	ND3	330.38 mm	330.38 mm	Ciment	1.23 W/(m.K)

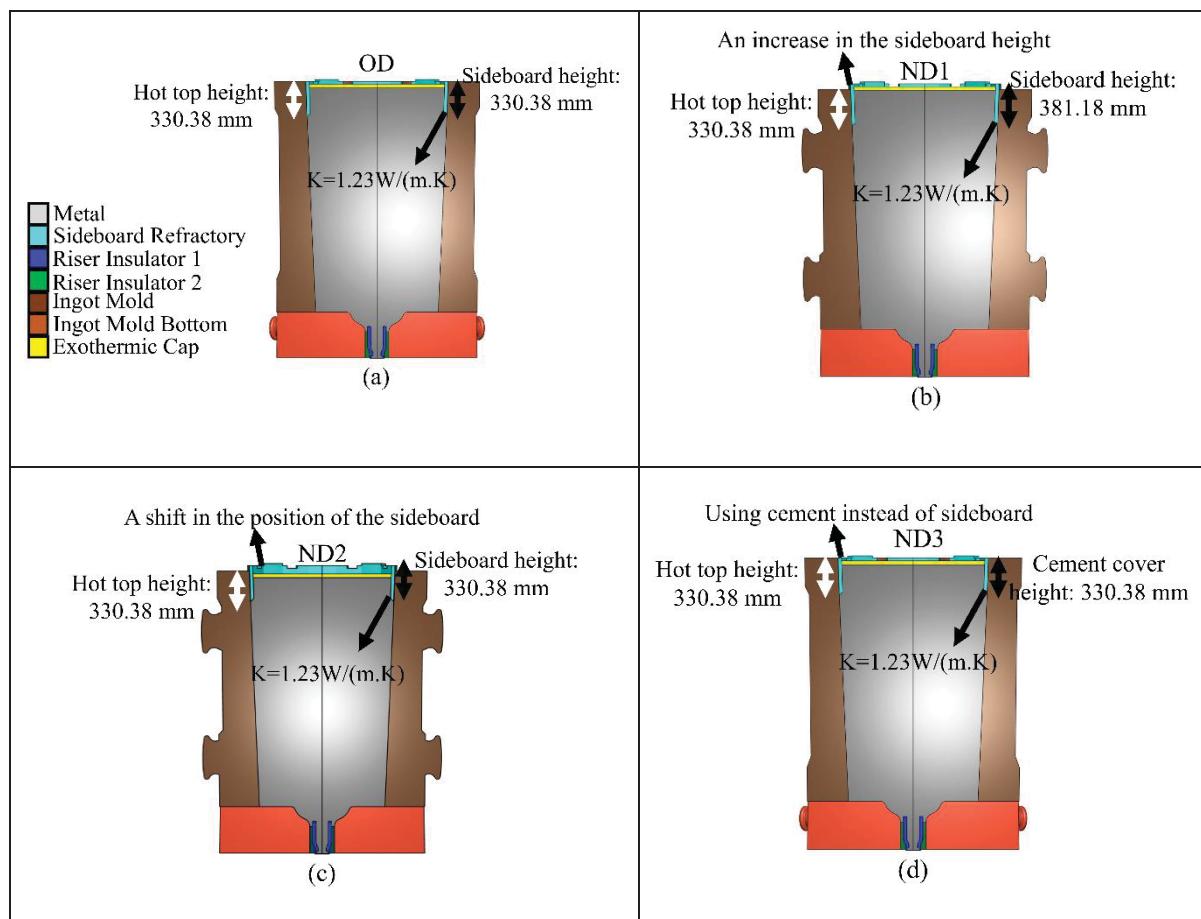


Figure A III.5 Les conceptions étudiées: (a) OD : originale ou de référence, (b) ND1: une augmentation de la hauteur du panneau latéral de 50.8 mm, (c) ND2: décalage du panneau latéral vers le haut de 50.8 mm (d) ND3: utilisation de ciment à la place du panneau latéral

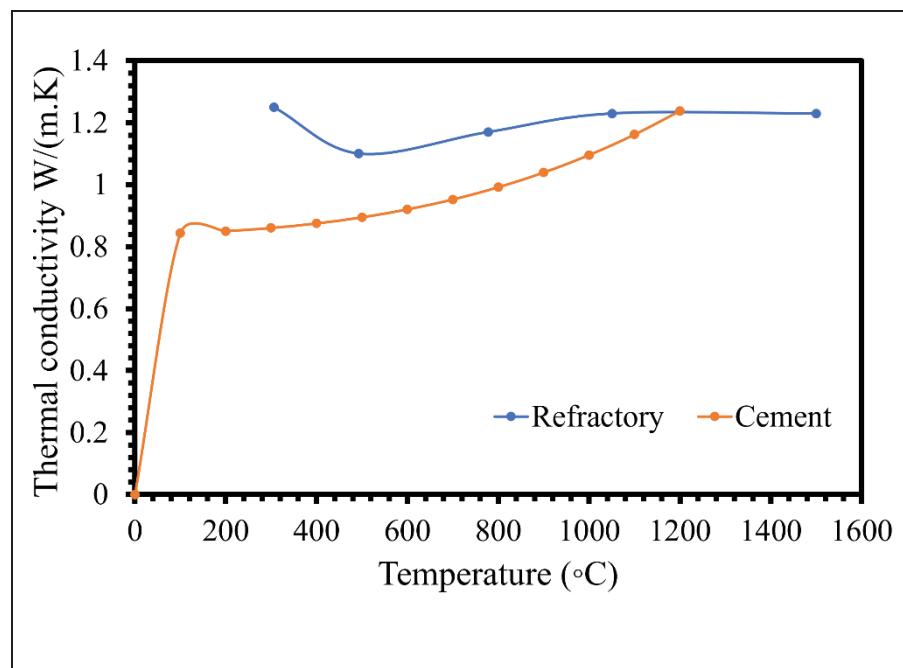


Figure A III.6 La conductivité thermique du ciment et des isolants réfractaires

AIII.6 Résultats et discussions

AIII.6.1 Macroségrégation

Les temps de solidification totaux à la fin de la solidification étaient les suivants: 7 heures et 41 minutes, 8 heures et 12 minutes, 7 heures et 11 minutes, et 7 heures et 43 minutes respectivement dans OD, ND1, ND2 et ND3. Le taux de macroségrégation indiqué dans la Figure A III.7 illustre l'évolution dynamique du taux de macroségrégation en carbone dans la direction radiale à travers les zones inférieure, moyenne, supérieure et la ligne centrale du lingot pour chaque conception. Cela comprend des mesures à 164 mm, 364 mm, 564 mm, 764 mm, 964 mm, 1164 mm, 1364 mm, 1564 mm, 1764 mm, et 1964 mm de hauteur à partir du bas du lingot, comme indiqué dans la Figure A III.7a-j et la ligne centrale dans la Figure A III.7k.

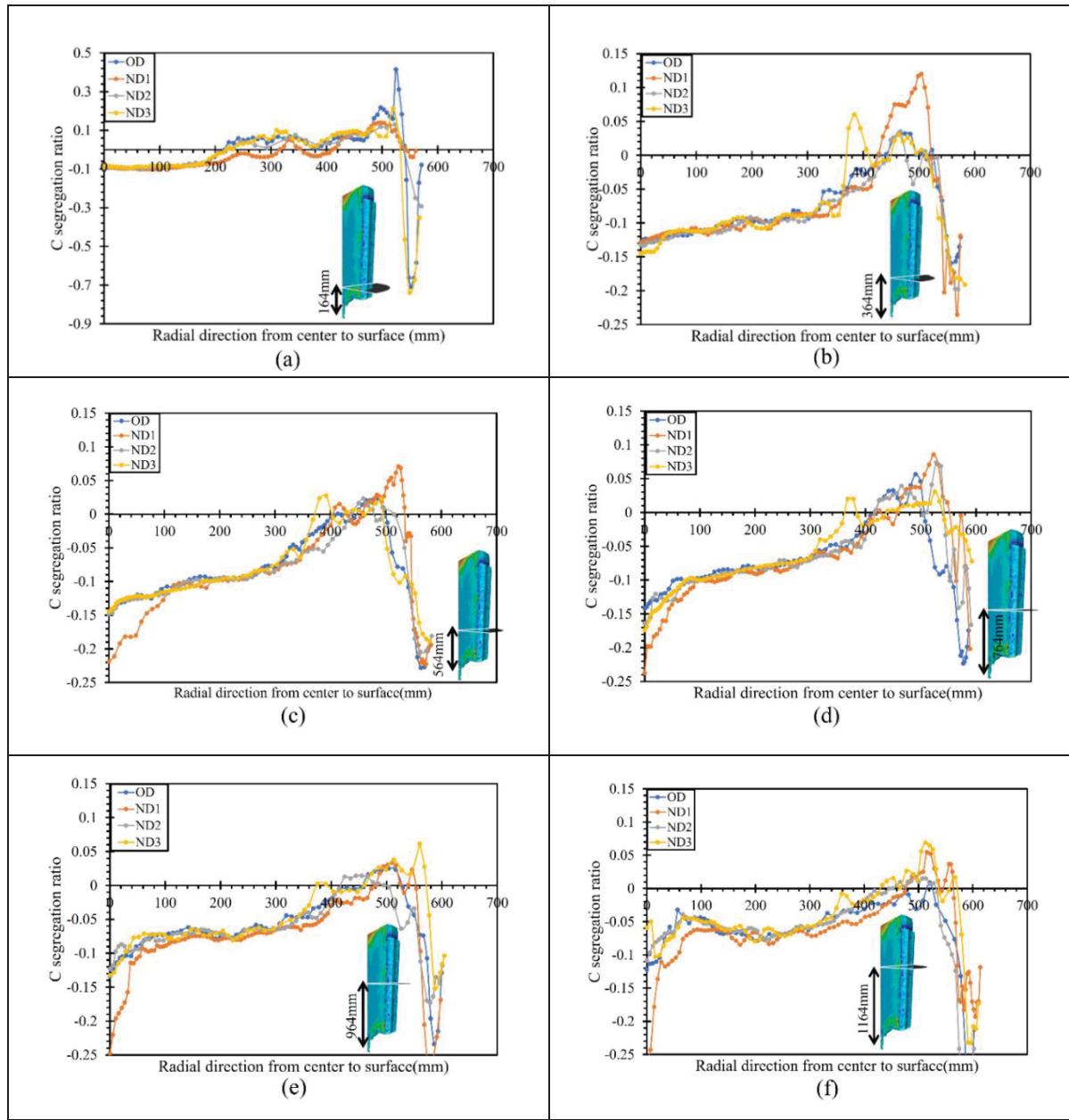


Figure A III.7 Évolution dynamique du taux de macroségrégation en carbone dans la direction radiale : (a) 164 mm de hauteur à partir du bas du lingot, (b) 364 mm de hauteur à partir du bas du lingot, (c) 564 mm de hauteur à partir du bas du lingot, (d) 764 mm de hauteur à partir du bas du lingot, (e) 964 mm de hauteur à partir du bas du lingot, (f) 1164 mm de hauteur à partir du bas du lingot

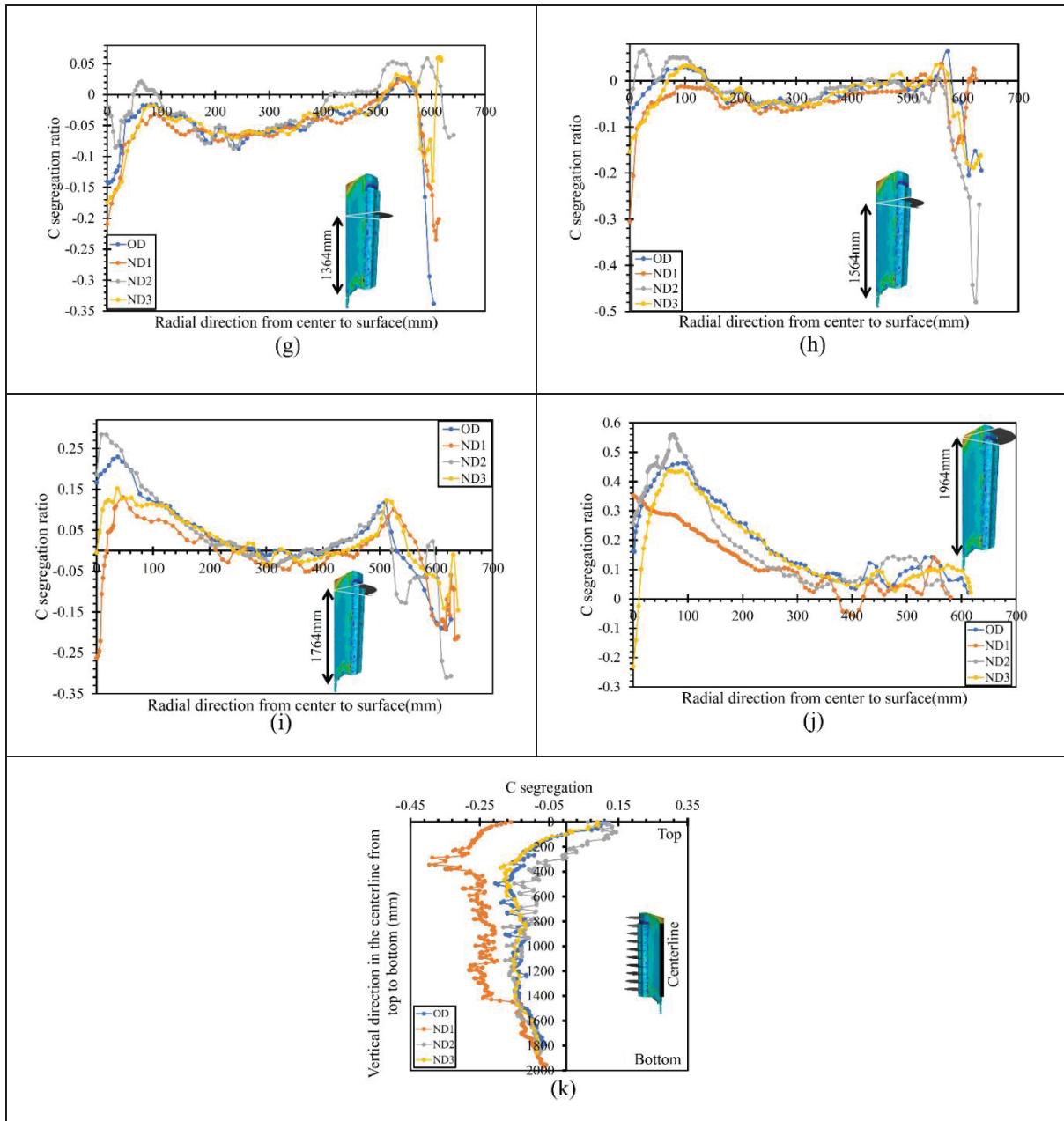


Figure A III.7 Évolution dynamique du taux de macroségrégation en carbone dans la direction radiale : (g) 1364 mm de hauteur à partir du bas du lingot, (h) 1564 mm de hauteur à partir du bas du lingot, (i) 1764 mm de hauteur à partir du bas du lingot, (j) 1964 mm de hauteur à partir du bas du lingot, (k) Ligne centrale du corps du lingot

La variation de l'évolution de la ségrégation variait significativement en fonction de la distance de la surface du mur vers le centre. Au bas du lingot, cette variation était perceptible sur une distance de 300 mm depuis la surface du mur. Près du milieu du lingot, la variation s'étendait

sur une distance de 250 mm depuis la surface du mur vers le centre et une distance de 100 mm du centre. Dans le milieu et près du sommet du lingot, la variation était observée sur une distance de 250 mm depuis la surface du mur vers le centre et une distance de 100 mm du centre. Au sommet du lingot, la variation était observée sur une distance de 200 mm depuis la surface du mur vers le centre et une distance de 150 mm du centre. Sur l'ensemble du dessus du lingot, la variation était perceptible sur presque toute la direction radiale. Selon les résultats, la variation dans la masselotte avait un impact significatif sur l'évolution de la ségrégation dans la direction radiale, en particulier près du mur du lingot dans la zone inférieure. Dans les sections moyennes et supérieures du lingot, la ségrégation le long de la ligne centrale était également affectée par la configuration de la masselotte. De plus, dans la masselotte elle-même, toute la direction radiale était influencée par sa conception. Cela indique que la configuration de la masselotte joue un rôle crucial dans la détermination des motifs de ségrégation dans tout le lingot.

La plage de ségrégation, comprenant les valeurs maximales (Max) et minimales (Min), a été déterminée aux emplacements ci-dessus pour chacune des conceptions. Le Tableau A III.6 montre le rapport de ségrégation du carbone dans toutes les conceptions.

Tableau A III.6 La plage du rapport de ségrégation du carbone sur l'ensemble du lingot de 20 MT

La plage du rapport de ségrégation du carbone dans la direction radiale.				
Hauteur à partir du bas (mm)	OD	ND1	ND2	ND3
164 mm (corps)	(-0.70, +0.41)	(-0.10, +0.14)	(-0.29, +0.013)	(-0.74, +0.21)
364 mm (corps)	(-0.16, +0.032)	(-0.23, +0.12)	(-0.19, +0.035)	(-0.19, +0.06)
564 mm (corps)	(-0.23, +0.02)	(-0.22, +0.07)	(-0.20, +0.02)	(-0.19, +0.03)
764 mm (corps)	(-0.22, +0.06)	(-0.24, +0.09)	(-0.17, +0.07)	(-0.17, +0.03)
964 mm (corps)	(-0.23, +0.02)	(-0.27, +0.03)	(-0.17, +0.01)	(-0.15, +0.06)
1164 mm (corps)	(-0.31, +0.01)	(-0.19, +0.05)	(-0.33, +0.02)	(-0.23, +0.07)
1364 mm (corps)	(-0.34, +0.03)	(-0.23, +0.03)	(-0.09, +0.06)	(-0.17, +0.06)
1564 mm (corps)	(-0.2, +0.06)	(-0.3, +0.04)	(-0.48, +0.07)	(-0.19, +0.03)
1764 mm (Interface masselotte/corps)	(-0.19, +0.23)	(-0.25, +0.13)	(-0.31, +0.28)	(-0.15, +0.15)
1964 mm (masselotte)	(+0.02, +0.46)	(-0.06, +0.34)	(+0.02, +0.56)	(-0.23, +0.44)
La ligne centrale du corps du lingot	(-0.21, 0.11)	(-0.40, -0.06)	(-0.18, +0.14)	(-0.19, +0.09)

Les résultats du Tableau A III.6 ont indiqué plusieurs tendances dans l'intensité de la ségrégation selon les différentes conceptions de masselottes. ND2 et ND3 ont présenté une intensité de ségrégation plus faible dans la direction radiale dans la moitié inférieure du lingot. Dans la moitié supérieure, ND1 et ND3 ont montré une sévérité de ségrégation réduite dans la direction radiale. De plus, ND2 et ND3 ont démontré une intensité de ségrégation plus faible le long de la ligne centrale dans la moitié supérieure du lingot. Des variations dans la ségrégation le long de la ligne centrale ont été observées jusqu'à 1400 mm sous la masselotte. La Figure A III.8 montre le profil du rapport de ségrégation du carbone à la fin de la solidification pour chaque nouvelle conception. La ligne pointillée noire dans les images indique l'interface entre la masselotte et le corps. Traditionnellement, l'industrie coupe la masselotte de cette zone pour garantir la qualité du corps et pour éliminer les zones avec une ségrégation positive accumulée et des inclusions. Les différents taux de refroidissement sur la

surface de la masselotte ont entraîné des profondeurs variables de la cavité de rétraction. La pression vers le bas, résultant de la contraction de la surface de la masselotte, a conduit à la relocalisation de l'accumulation de ségrégation positive. Les zones de ségrégation positive avec des niveaux de ségrégation dépassant 20% se sont principalement accumulées dans la masselotte pour ND1 et ND3. En revanche, la zone de ségrégation positive s'est étendue dans le corps de 56 dans OD et de 120 mm dans ND2.

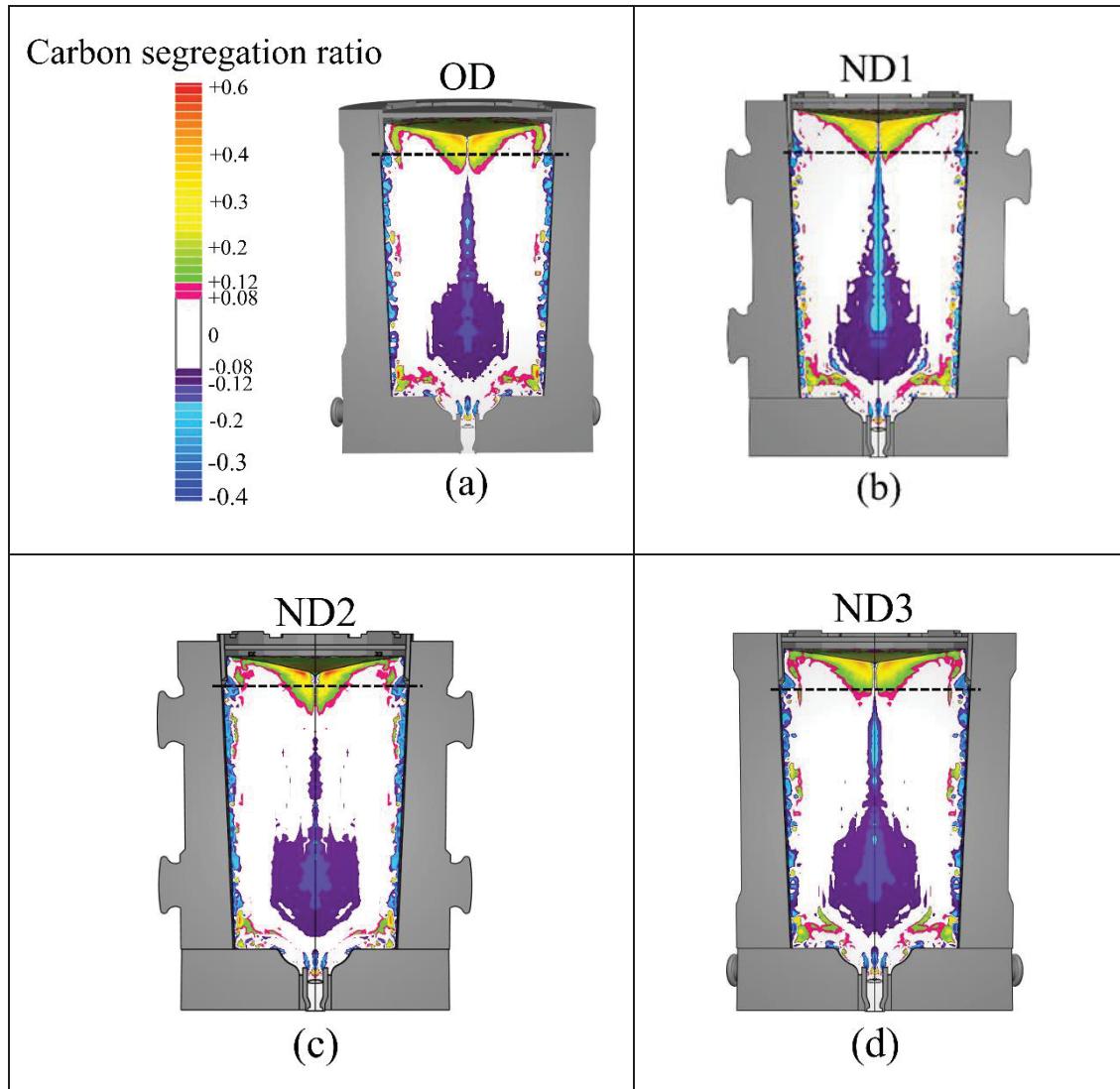


Figure A III.8 Le profil de la ségrégation du carbone à la fin de la solidification pour différentes configurations de masselotte : (a) OD, (b) ND1, (c) ND2 et (d) ND3. La ligne pointillée noire indique l'interface entre le corps et la masselotte

AIII.6.2 Microporosité

Dans le présent travail, les critères de Niyama, associés au gradient thermique devant le front de solidification et au taux de refroidissement, ont été utilisés pour prédire la porosité centrale. Les résultats sont rapportés dans la Figure A III.9. Une valeur de Niyama supérieure à 1 indique un potentiel de formation de porosité de rétraction. Le risque de formation de microporosité a augmenté à 800 mm sous le sommet du corps dans ND2 comme indiqué dans la Figure A III.9.

Dans cette zone, l'intensité de la ségrégation a été réduite dans ND (Figure A III.7k). OD, ND1 et ND3 présentent des tendances comparables en ce qui concerne la probabilité de formation de microporosité.

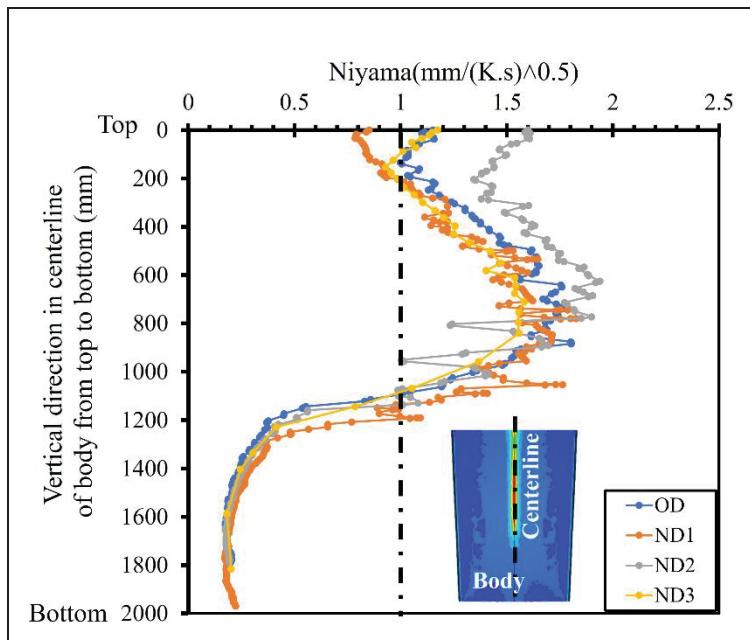


Figure A III.9 Risque prédict de formation de microporosité au niveau de la ligne centrale du corps du lingot de 20 MT pour chaque configuration. La ligne en pointillés indique la valeur de Niyama de 1

AIII.7 Conclusion

En conclusion, cette étude met en évidence le rôle critique de la conception de la masselotte dans l'influence de l'intensité et de l'évolution de la ségrégation au sein du lingot. Les configurations ND2 et ND3 ont efficacement traité les préoccupations en matière de ségrégation, ciblant des zones spécifiques - la moitié inférieure et supérieure du lingot, respectivement. En revanche, les configurations ND1 et ND3 ont présenté une gravité de ségrégation réduite dans la moitié supérieure. Ces résultats soulignent l'importance de la conception de la masselotte et des taux de refroidissement dans la gestion de la ségrégation et garantissent l'uniformité du matériau.

Bien que ND2 ait montré une réduction prometteuse de la ségrégation, la présence de cavités de retrait significatives pose des défis concernant le mouvement de la ségrégation positive à l'intérieur du corps, nécessitant une optimisation supplémentaire de la conception. Pour atténuer la ségrégation radiale, ND1 et ND3 sont des choix recommandés. De plus, l'intégration de matériau cimentaire, comme démontré dans ND3, offre un potentiel de réduction des coûts de matériau réfractaire par coulée tout en réduisant les niveaux de ségrégation. En fin de compte, ND1 a été sélectionné pour application dans l'industrie, soulignant les implications pratiques de cette recherche. Dans l'ensemble, ces résultats mettent en évidence les considérations complexes impliquées dans la conception des lingots pour optimiser les propriétés des matériaux et l'efficacité de la fabrication.

LISTE DE RÉFÉRENCES

- Abootorabi, A., Korojy, B., & Jabbareh, M. A. (2019). Effect of mould design on the Niyama criteria during solidification of CH3C 80t ingot. *Ironmaking & Steelmaking*, 722-730. doi:<https://doi.org/10.1080/03019233.2019.1583879>
- Abootorabi, A., Korojy, B., & Jabbareh, M. A. (2020). Effect of mould design on the Niyama criteria during solidification of CH3C 80t ingot. *Ironmaking & Steelmaking*, 47(7), 722-730. doi:10.1080/03019233.2019.1583879
- Ahmad, N., Combeau, H., Desbiolles, J.-L., Jalanti, T., Lesoult, G., Rappaz, J., . . . Stomp, C. (1998). Numerical Simulation of Macrosegregation: a Comparison between FVM and FEM Predictions and a confrontation with Experiments. *Metallurgical and Materials Transactions a-Physical Metallurgy and Materials Science*, 29(2), 617-630.
- Ahmadein, M., Wu, M., Li, J., Schumacher, P., & Ludwig, A. (2013). Prediction of the as-cast structure of Al-4.0 Wt Pct Cu ingots. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 44, 2895-2903. doi:<https://doi.org/10.1007/s11661-012-1606-6>
- Baghani, A. (2019). *Modeling of macrosegregation and shrinkage cavity during solidification of a multi-components steel ingot*. L'Université de l'Iowa,
- Balcar, M., Zelezny, R., Sochor, L., Fila, P., & Martínek, L. (2008). The development of a chill mould for tool steels using numerical modelling. *Mater Technol*, 42(4), 183-191.
- Beckermann, C. (2000). *Modeling of macrosegregation: past, present and future*: Citeseer.
- Beckermann, C. (2002). Modelling of macrosegregation: applications and future needs. *International Materials Reviews*, 47(5), 243-261. doi: <https://doi.org/10.1179/095066002225006557>
- Beckermann, C., & Viskanta, R. (1988). Double-diffusive convection during dendritic solidification of a binary mixture. *PhysicoChemical Hydrodynamics*, 10(2), 195-213.
- Beckermann, C., & Viskanta, R. (1993). Mathematical modeling of transport phenomena during alloy solidification.
- Beckermann, C., & Wang, C. Y. (1996). Equiaxed dendritic solidification with convection: Part III. Comparisons with NH₄Cl-H₂O experiments. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 27(9), 2784-2795. doi:10.1007/BF02652371
- Bellet, M., Boughanmi, O., & Fidel, G. (2012). A partitioned resolution for concurrent fluid flow and stress analysis during solidification: application to ingot casting. *IOP*

Conference Series: Materials Science and Engineering, 33(1), 012052.
doi:10.1088/1757-899X/33/1/012052

Bellet, M., & Fachinotti, V. D. (2004). ALE method for solidification modelling. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 193(39-41), 4355-4381.

Bellet, M., Jaouen, O., & Poitrault, I. (2005). An ALE-FEM approach to the thermomechanics of solidification processes with application to the prediction of pipe shrinkage. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*.

Bennon, W. D., & Incropera, F. P. (1987a). A continuum model for momentum, heat and species transport in binary solid-liquid phase change systems—I. Model formulation. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 30(10), 2161-2170. doi:[https://doi.org/10.1016/0017-9310\(87\)90094-9](https://doi.org/10.1016/0017-9310(87)90094-9)

Bennon, W. D., & Incropera, F. P. (1987b). A continuum model for momentum, heat and species transport in binary solid-liquid phase change systems—II. Application to solidification in a rectangular cavity. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 30(10), 2171-2187. doi:[https://doi.org/10.1016/0017-9310\(87\)90095-0](https://doi.org/10.1016/0017-9310(87)90095-0)

Boettinger, W. J., Kattner, U. R., Coriell, S. R., Chang, Y. A., & Mueller, B. A. (1995, 1995-12-31). *Development of multicomponent solidification micromodels using a thermodynamic phase diagram data base*, États-Unis.

Brody, H. D. (1965). *Solute redistribution in dendritic solidification*. Institut de Technologie du Massachusetts.

Campbell, J. (2015). Complete Casting Handbook - Metal Casting Processes, Metallurgy, Techniques and Design.

CATIA.V5.R20. (2020). CATIA V5 R20. Avions Marcel Dassault, France.

Chiang, K. C., & Tsai, H. L. (1992). Shrinkage-induced fluid flow and domain change in two-dimensional alloy solidification. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 35(7), 1763-1770. doi:[https://doi.org/10.1016/0017-9310\(92\)90146-J](https://doi.org/10.1016/0017-9310(92)90146-J)

Ciobanas, A. I., & Fautrelle, Y. (2007a). Ensemble averaged multi-phase Eulerian model for columnar/equiaxed solidification of a binary alloy: II. Simulation of the columnar-to-equiaxed transition (CET). *Journal of Physics D: Applied Physics*, 40(14), 4310. doi:10.1088/0022-3727/40/14/031

Ciobanas, A. I., & Fautrelle, Y. (2007b). Ensemble averaged multiphase Eulerian model for columnar/equiaxed solidification of a binary alloy: I. The mathematical model. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 40(12), 3733. doi:10.1088/0022-3727/40/12/029

- Clyne, T. W., & Kurz, W. (1981). Solute redistribution during solidification with rapid solid state diffusion. *Metallurgical Transactions A*, 12(6), 965-971. doi:10.1007/BF02643477
- Combeau, H., Založník, M., Hans, S., & Richy, P. E. (2009). Prediction of Macrosegregation in Steel Ingots: Influence of the Motion and the Morphology of Equiaxed Grains. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 40(3), 289-304. doi:10.1007/s11663-008-9178-y
- Du, Q., Eskin, D. G., & Katgerman, L. (2007). Modeling Macrosegregation during Direct-Chill Casting of Multicomponent Aluminum Alloys. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 38(1), 180-189. doi:10.1007/s11661-006-9042-0
- Duan, Z.-H., Shen, H.-F., & Liu, B.-C. (2015). A Numerical Study of the Effect of Multiple Pouring on Macrosegregation in a 438-Ton Steel Ingot. *Acta Metallurgica Sinica (English Letters)*, 28(9), 1123-1133. doi:10.1007/s40195-015-0303-z
- Duan, Z., Tu, W., Shen, B., Shen, H., & Liu, B. (2016). Experimental Measurements for Numerical Simulation of Macrosegregation in a 36-Ton Steel Ingot. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 47(7), 3597-3606. doi:10.1007/s11661-016-3531-6
- Ehlen, G., Ludwig, A., Sahm, P., & Bührig-Polaczek, A. (2003). Split-Solid-Model to Simulation the Formation of Shrinkage Cavities and Macrosegregation in Steel Casting. Dans *Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes-X* (pp. 285-292).
- El-Bealy, M. (2000). Modeling of interdendritic strain and macrosegregation for dendritic solidification processes: Part I. Theory and experiments. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 31(2), 331-343. doi:10.1007/s11663-000-0052-9
- El-Bealy, M., & Fredriksson, H. (1996). Modeling of the peritectic reaction and macrosegregation in casting of low carbon steel. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 27(6), 999-1014. doi:10.1007/s11663-996-0015-x
- Felicelli, S. D., Heinrich, J. C., & Poirier, D. R. (1991). Simulation of freckles during vertical solidification of binary alloys. *Metallurgical Transactions B*, 22(6), 847-859. doi:10.1007/BF02651162
- Felicelli, S. D., Heinrich, J. C., & Poirier, D. R. (1993). Numerical model for dendritic solidification of binary alloys. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 23(4), 461-481. doi:10.1080/10407799308914911
- Felicelli, S. D., Poirier, D. R., Giamei, A. F., & Heinrich, J. C. (1997). Simulating convection and macrosegregation in superalloys. *JOM*, 49(3), 21-25. doi:10.1007/BF02914651

- Felicelli, S. D., Poirier, D. R., & Heinrich, J. C. (1998). Modeling freckle formation in three dimensions during solidification of multicomponent alloys. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 29(4), 847-855. doi:10.1007/s11663-998-0144-5
- Ferreira, A. F., Chrisóstimo, W. B., Sales, R. C., Garção, W. J. L., & de Paula Sousa, N. (2019). Effect of pouring temperature on microstructure and microsegregation of as-cast aluminum alloy. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 104(1), 957-965. https://doi.org/10.1007/s00170-00019-03979-00176. doi:10.1007/s00170-019-03979-6
- Ferreira, I. L., Voller, V. R., Nestler, B., & Garcia, A. (2009). Two-dimensional numerical model for the analysis of macrosegregation during solidification. *Computational Materials Science*, 46(2), 358-366. doi:https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2009.03.020
- Finkl-Steel-Sorel. <http://www.sorelforg.com/>.
- Flemings, M. C. (1974). Solidification processing. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 5, 2121-2134.
- Flemings, M. C. (1976). Principles of Control of Soundness and Homogeneity of Large Ingots. *Scandinavian Journal of Metallurgy*, 5(1), 1-15.
- Flemings, M. C. (1991). Behavior of metal alloys in the semisolid state. *Metallurgical Transactions A*, 22(5), 957-981. doi:10.1007/BF02661090
- Flemings, M. C. (2000). Our Understanding of Macrosegregation: Past and Present. *Isij International*, 40(9), 833-841. doi:10.2355/isijinternational.40.833
- Fridberg, J., Torndahl, L.-E., & Hillert, M. (1969). Diffusion in iron. *Jernkontorets Ann*, 153(6), 263-276.
- Fujii, T., Poirier, D. R., & Flemings, M. C. (1979). Macrosegregation in a multicomponent low alloy steel. *Metallurgical Transactions B*, 10(3), 331-339. doi:10.1007/BF02652503
- Ganesan, S., & Poirier, D. R. (1989). Solute redistribution in dendritic solidification with diffusion in the solid. *Journal of Crystal Growth*, 97(3), 851-859. doi:https://doi.org/10.1016/0022-0248(89)90587-3
- Ganesan, S., & Poirier, D. R. (1990). Conservation of mass and momentum for the flow of interdendritic liquid during solidification. *Metallurgical Transactions B*, 21(1), 173-181. doi:10.1007/BF02658128

- Gao, Z., Jie, W., Liu, Y., & Luo, H. (2017). Solidification modelling for coupling prediction of porosity and segregation. *Acta materialia*, 127, 277-286. doi:<https://doi.org/10.1016/j.actamat.2017.01.042>
- Ge, H., Li, J., Han, X., Xia, M., & Li, J. (2016). Dendritic model for macrosegregation prediction of large scale castings. *Journal of Materials Processing Technology*, 227, 308-317.
- Ge, H., Ren, F., Cai, D., Hao, J., Li, J., & Li, J. (2018). Gradual-cooling solidification approach to alleviate macrosegregation in large steel ingots. *Journal of Materials Processing Technology*, 262, 232-238. doi:[10.1016/j.jmatprotec.2018.06.041](https://doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2018.06.041)
- Ge, H., Ren, F., Li, J., Han, X., Xia, M., & Li, J. (2017). Four-phase dendritic model for the prediction of macrosegregation, shrinkage cavity, and porosity in a 55-ton ingot. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 48, 1139-1150. doi:<https://doi.org/10.1007/s11661-016-3910-z>
- Ge, H., Ren, F., Li, J., Hu, Q., Xia, M., & Li, J. (2018). Modelling of ingot size effects on macrosegregation in steel castings. *Journal of Materials Processing Technology*, 252, 362-369.
- Ghodrati, N., Baiteche, M., Loucif, A., Gallego, P. I., Jean-Benoit, M., & Jahazi, M. (2022). Influence of hot top height on macrosegregation and material yield in a large-size cast steel ingot using modeling and experimental validation. *Metals*, 12(11), 1906. doi:<https://doi.org/10.3390/met12111906>
- Ghodrati, N., Champliaud, H., Morin, J.-B., & Jahazi, M. (2024). Influence of the Hot-Top Thermal Regime on the Severity and Extent of Macrosegregation in Large-Size Steel Ingots. *Journal of Manufacturing and Materials Processing*, 8(2), 74. doi:<https://www.mdpi.com/2504-4494/8/2/74>
- Ghodrati, N., Loucif, A., Morin, J.-B., Champliaud, H., & Jahazi, M. (2023, Août 21-24, 2023). Influence of Hot Top Geometry on the Solidification Time and Macrosegregation in Large-Size Cast Ingot Using Finite Element Modeling. Article présentée à 62nd Conference of Metallurgists, COM 2023, Toronto, Ontario, Canada.
- Ghodrati, N., Loucif, A., Morin, J.-B., & Jahazi, M. (2022, Août . 02-04, 2022). Modeling of the influence of hot top design on microporosity and shrinkage cavity in large-size cast steel ingots. Article présentée à the 8th International Congress on the Science and Technology of Steelmaking, Montréal, QC, Canada p. 239-244. <https://doi.org/10.33313/531/031>
- Gouttebroze, S., Bellet, M., & Combeau, H. (2007). 3D macrosegregation simulation with anisotropic remeshing. *Comptes Rendus Mécanique*, 335(5), 269-279. doi:<https://doi.org/10.1016/j.crme.2007.05.005>

- Gouttebroze, S., Fachinotti, V. D., Bellet, M., & Combeau, H. (2005). 3D-FEM modeling of macrosegregation in solidification of binary alloys. *International Journal of Forming Processes*, 8, pages 203-217.
- Gu, J. P., & Beckermann, C. (1999). Simulation of convection and macrosegregation in a large steel ingot. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 30(5), 1357-1366. doi:10.1007/s11661-999-0284-5
- Guan, R., Ji, C., Zhu, M., & Deng, S. (2018). Numerical Simulation of V-shaped Segregation in Continuous Casting Blooms Based on a Microsegregation Model. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 49(5), 2571-2583. doi:10.1007/s11663-018-1352-2
- Heidarzadeh, M., & Keshmiri, H. (2013). Influence of mould and insulation design on soundness of tool steel ingot by numerical simulation. *Journal of iron and steel research, international*, 20(7), 78-83.
- Heinrich, J., & McBride, E. (2000). Calculation of pressure in a mushy zone. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 47(1-3), 735-747.
- Heinrich, J. C., Felicelli, S., Nandapurkar, P., & Poirier, D. R. (1989). Thermosolutal convection during dendritic solidification of alloys: Part II. Nonlinear convection. *Metallurgical Transactions B*, 20(6), 883-891. doi:10.1007/BF02670194
- Heinrich, J. C., & Poirier, D. R. (2004). The effect of volume change during directional solidification of binary alloys. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 12(5), 881. doi:10.1088/0965-0393/12/5/008
- Hultgren, A. (1973). A and V segregation in killed steel ingots. *Scand. J. Metallurgy*, 2(5), 217-227.
- Hurtuk, D. J. (2008). Steel ingot casting. *Casting; ASM Handbook*, ASM International: Materials Park, OH, USA, 15, 911. doi:<https://doi.org/10.31399/asm.hb.v15.a0005295>
- Isobe, K. (2021). Development Technology for Prevention of Macro-segregation in Casting of Steel Ingot by Insert Casting in Vacuum Atmosphere. *Isij International*, 61(5), 1556-1566.
- Jaouen, O., Costes, F., & Lasne, P. (2011). *Finite element thermomechanical simulation of steel making from solidification to the first forming operations*. Article présentée à Proceeding 4th International Conference on Modelling and Simulation of Metallurgical Processes in Steelmaking, pp10-20.
- Kermanpur, A., Eskandari, M., Purmohamad, H., Soltani, M., & Shateri, R. (2010). Influence of mould design on the solidification of heavy forging ingots of low alloy steels by

- numerical simulation. *Materials & Design*, 31(3), 1096-1104.
doi:<https://doi.org/10.1016/j.matdes.2009.09.045>
- Khalajzadeh, V., & Beckermann, C. (2020). Simulation of shrinkage porosity formation during alloy solidification. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 51, 2239-2254. Repéré à <https://doi.org/2210.1007/s11661-11020-05699-z>.
- Kim, N. Y., Ko, D.-C., Kim, Y., Han, S. W., Oh, I. Y., & Moon, Y. H. (2020). Feasibility of Reduced Ingot Hot-Top Height for the Cost-Effective Forging of Heavy Steel Ingots. *Materials*, 13(13), 2916.
- KOBAYASHI, S. (1988a). A mathematical model for solute redistribution during dendritic solidification. *Transactions of the Iron and Steel Institute of Japan*, 28(7), 535-542.
- Kobayashi, S. (1988b). Solute redistribution during solidification with diffusion in solid phase: A theoretical analysis. *Journal of Crystal Growth*, 88(1), 87-96.
doi:[https://doi.org/10.1016/S0022-0248\(98\)90010-0](https://doi.org/10.1016/S0022-0248(98)90010-0)
- Krane, M. J. M., & Incropera, F. P. (1997). Solidification of ternary metal alloys—II. Predictions of convective phenomena and solidification behavior in Pb-Sb-Sn alloys. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 40(16), 3837-3847.
doi:[https://doi.org/10.1016/S0017-9310\(97\)00011-2](https://doi.org/10.1016/S0017-9310(97)00011-2)
- Kumar, A., Založník, M., Combeau, H., Demurger, J., & Wendenbaum, J. (Juin 2012, Juin 2012). *Experimental and Numerical Studies of the influence of hot top conditions on Macrosegregation in an industrial steel ingot*. Article présentée à the Proceedings of the first international conference on ingot casting, rolling and forging (IRCF), Aachen, Allemagne, pp 3-7.
- Kwapiński, P., & Wołczyński, W. (2023). Control of the CET localization in continuously cast copper and copper alloys' ingots. *Archives of Foundry Engineering*, 23, 91-99. .
doi:<http://dx.doi.org/10.24425/afe.2023.144303>
- Lan, P., & Zhang, J. (2014). Numerical analysis of macrosegregation and shrinkage porosity in large steel ingot. *Ironmaking & Steelmaking*, 41(8), 598-606. Repéré à <https://doi.org/510.1179/1743281213Y.0000000172>.
- Lesoult, G. (2005). Macrosegregation in steel strands and ingots: Characterisation, formation and consequences. *Materials Science and Engineering: A*, 413, 19-29. .
doi:<https://doi.org/10.1016/j.msea.2005.08.203>
- Li, H.-c., Liu, Y.-x., Zhang, Y.-h., Liu, Z., & Zhai, Q.-j. (2018). Effects of hot top pulsed magneto-oscillation on solidification structure of steel ingot. *China Foundry*, 15, 110-116. <https://doi.org/110.1007/s41230-41018-47198-z>

- Li, J., Wu, M., Hao, J., Kharicha, A., & Ludwig, A. (2012). Simulation of channel segregation using a two-phase columnar solidification model – Part II: Mechanism and parameter study. *Computational Materials Science*, 55, 419-429. doi:<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2011.12.021>
- Li, J., Wu, M., Ludwig, A., & Kharicha, A. (2012). Modelling macrosegregation in a 2.45 ton steel ingot. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 33(1), 012091. doi:10.1088/1757-899X/33/1/012091
- Li, J., Xu, X.-w., Ren, N., Xia, M.-x., & Li, J.-g. (2022). A review on prediction of casting defects in steel ingots: from macrosegregation to multi-defect model. *Journal of Iron and Steel Research International*, 29(12), 1901-1914. Repéré à <https://doi.org/10.1007/s42243-42022-00848-42247>.
- Liu, D. R., Sang, B. G., Kang, X. H., & Li, D. Z. (2010). Numerical simulation of macrosegregation in large multiconcentration poured steel ingot. *International Journal of Cast Metals Research*, 23(6), 354-363. doi:10.1179/136404610X12738456167186
- Liu, M., Wu, J., Gan, Y., Hanaor, D. A. H., & Chen, C. Q. (2016). Evaporation Limited Radial Capillary Penetration in Porous Media. *Langmuir*, 32(38), 9899-9904. doi:10.1021/acs.langmuir.6b02404
- Liu, N., Xu, C., Lv, Y., Wang, T., Wu, G., & Zhang, Z. (2022). Effect of electromagnetic induction coil position on feeding effect in steel ingot. *AIP Advances*, 12(4). doi:<https://doi.org/10.1063/5.0088683>
- Liu, W. (2005). *Finite element modelling of macrosegregation and thermomechanical phenomena in solidification processes*. (Thèse de doctorat, Ecole Des Mines De Paris).
- Loucif, A., Ben Fredj, E., Harris, N., Shahriari, D., Jahazi, M., & Lapierre-Boire, L.-P. (2018). Evolution of A-Type Macrosegregation in Large Size Steel Ingots After Multistep Forging and Heat Treatment. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 49(3), 1046-1055. doi:10.1007/s11663-018-1255-2
- Loucif, A., Zhang, C., Morin, J. B., & Jahazi, M. (2022). *A FEM Analysis on the Influence of Manganese on Carbon and Chromium Macrosegregation in Large Size Steel Ingots*. Paper presented at the Materials Science Forum.
- Ludwig, A., & Wu, M. (2005). Modeling the columnar-to-equiaxed transition with a three-phase Eulerian approach. *Materials Science and Engineering: A*, 413, 109-114.
- Ludwig, A., Wu, M., & Kharicha, A. (2015). On macrosegregation. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 46, 4854-4867. doi:<https://doi.org/10.1007/s11661-015-2959-4>

- Maduriya, B., & Yadav, N. (2018). Prediction of solidification behaviour of alloy steel ingot casting. *Materials Today: Proceedings*, 5(9), 20380-20390.
- Malinowski, Z., Telejko, M., & Hadała, B. (2012). Influence of heat transfer boundary conditions on the temperature field of the continuous casting ingot. *Archives of Metallurgy and Materials*, 57, 325-331.
- Martorano, M. A., Beckermann, C., & Gandin, C. A. (2003). A solutal interaction mechanism for the columnar-to-equiaxed transition in alloy solidification. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 34(8), 1657-1674. doi:10.1007/s11661-003-0311-x
- Martorano, M. A., & Biscuola, V. B. (2009). Predicting the columnar-to-equiaxed transition for a distribution of nucleation undercoolings. *Acta materialia*, 57, 607-615.
- MATLAB. (2012b). MATLAB and Statistics Toolbox Release 2012b; The MathWorks, Inc.: Natick, MA, USA, 2012.
- McBride, E., Heinrich, J., & Poirier, D. (1999). Numerical simulation of incompressible flow driven by density variations during phase change 1. *International journal for numerical methods in fluids*, 31(5), 787-800.
- Mehrabian, R., & Flemings, M. C. (1970). Macrosegregation in ternary alloys. *Metallurgical Transactions*, 1(2), 455-464. doi:10.1007/BF02811556
- Mehrabian, R., Keane, M., & Flemings, M. C. (1970a). Interdendritic fluid flow and macrosegregation; influence of gravity. *Metallurgical Transactions*, 1(5), 1209-1220. doi:10.1007/BF02900233
- Mehrabian, R., Keane, M. A., & Flemings, M. C. (1970b). Experiments on macrosegregation and freckle formation. *Metallurgical Transactions*, 1(11), 3238-3241. doi:10.1007/BF03038445
- Nandapurkar, P., Poirier, D., & Heinrich, J. (1991). Momentum equation for dendritic solidification. *Numerical Heat Transfer*, 19(3), 297-311.
- Nandapurkar, P., Poirier, D. R., Heinrich, J. C., & Felicelli, S. (1989). Thermosolutal convection during dendritic solidification of alloys: Part i. Linear stability analysis. *Metallurgical Transactions B*, 20(5), 711-721. doi:10.1007/BF02655929
- Naterer, G. F. (1997). Simultaneous pressure - velocity coupling in the two-phase zone for solidification shrinkage in an open cavity. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 5(6), 595. doi:10.1088/0965-0393/5/6/005

- Ni, J., & Beckermann, C. (1991). A volume-averaged two-phase model for transport phenomena during solidification. *Metallurgical Transactions B*, 22(3), 349-361. doi:10.1007/BF02651234
- O'Reilly, K. (2016). *Solidification and Casting: An Oxford–Kobe Materials Text*: Presse CRC.
- Ohnaka, I. (1984). Solute redistribution with back-diffusion in solid during solidification process. *Tetsu-to-Hagané*, 70, S913.
- Oldenburg, C. M., & Spera, F. J. (1992). Hybrid model for solidification and convection. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 21(2), 217-229. doi:10.1080/10407799208944917
- Pardeshi, R., Voller, V. R., Singh, A. K., & Dutta, P. (2008). An explicit–implicit time stepping scheme for solidification models. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 51(13), 3399-3409. doi:<https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2007.11.060>
- Patil, P., Marje, V., Balachandran, G., & Balasubramanian, V. (2015). Theoretical study on influence of steel composition on solidification behaviour in ingot casting of low alloy steels at similar casting conditions. *International Journal of Cast Metals Research*, 28(2), 117-128. doi:10.1179/1743133614y.0000000135
- Patil, P., Nalawade, R., Balachandran, G., & Balasubramanian, V. (2015). Analysis of solidification behaviour of low alloy steel ingot casting—simulation and experimental validation. *Ironmaking & Steelmaking*, 42(7), 512-524. Repéré à <https://doi.org/10.1179/1743281214Y.000000025>.
- Patil, P., Puranik, A., Balachandran, G., & Balasubramanian, V. (2016). FEM simulation of effect of mould wall thickness on low alloy steel ingot solidification. *Ironmaking & Steelmaking*, 43(8), 621-627.
- Patil, P., Puranik, A., Balachandran, G., & Balasubramanian, V. (2017). Improvement in Quality and Yield of the Low Alloy Steel Ingot Casting Through Modified Mould Design. *Transactions of the Indian Institute of Metals*, 70(8), 2001-2015. doi:<https://doi.org/10.1007/s12666-016-1022-5>
- Pickering, E. J. (2013). Macrosegregation in steel ingots: the applicability of modelling and characterisation techniques. *Isij International*, 53(6), 935-949. doi:<https://doi.org/10.2355/isijinternational.53.935>
- Pickering, E. J., Chesman, C., Al-Bermani, S., Holland, M., Davies, P., & Talamantes-Silva, J. (2015). A Comprehensive Case Study of Macrosegregation in a Steel Ingot. *Metallurgical and Materials Transactions B-Process Metallurgy and Materials Processing Science*, 46(4), 1860-1874. doi:10.1007/s11663-015-0386-y.

- Pineda, D., & Martorano, M. d. A. (2013). Columnar to equiaxed transition in directional solidification of inoculated melts. *Acta materialia*, 61(5), 1785-1797. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2012.1712.1002>
- Poirier, D. R., & Heinrich, J. C. (1994). Continuum model for predicting macrosegregation in dendritic alloys. *Materials Characterization*, 32(4), 287-298. doi:[https://doi.org/10.1016/1044-5803\(94\)90104-X](https://doi.org/10.1016/1044-5803(94)90104-X)
- Poirier, D. R., & Nandapurkar, P. (1988). Enthalpies of a binary alloy during solidification. *Metallurgical Transactions A*, 19(12), 3057-3061. doi:10.1007/BF02647732
- Pola, A., Gelfi, M., & La Vecchia, G. M. (2016). Comprehensive Numerical Simulation of Filling and Solidification of Steel Ingots. *Materials (Basel)*, 9(9), 769. doi:10.3390/ma9090769
- Porter, D., Easterling, K., & Sherif, M. (2008). Phase Transformations in Metals and Alloys, pp. 344 Taylor & Francis. Dans: CRC.
- Qian, S., Hu, X., Cao, Y., Kang, X., & Li, D. (2015). Hot top design and its influence on feeder channel segregates in 100-ton steel ingots. *Materials & Design*, 87, 205-214. Repéré à <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2015.1007.1150>
- Rappaz, M., & Thévoz, P. H. (1987). Solute diffusion model for equiaxed dendritic growth. *Acta Metallurgica*, 35(7), 1487-1497. doi:[https://doi.org/10.1016/0001-6160\(87\)90094-0](https://doi.org/10.1016/0001-6160(87)90094-0)
- Rappaz, M., & Voller, V. (1990). Modeling of micro-macrosegregation in solidification processes. *Metallurgical Transactions A*, 21(2), 749-753.
- Reikher, A., Gerber, H., Pillai, K., & Jen, T.-C. (2010). Natural convection-an overlooked phenomenon of the solidification process.
- Ridder, S. D., Kou, S., & Mehrabian, R. (1981). Effect of fluid flow on macrosegregation in axi-symmetric ingots. *Metallurgical Transactions B*, 12(3), 435-447. doi:10.1007/BF02654312
- Ridolfi, M. R. (2017). *The formation of the solidification microstructure from liquid metal in industrial processes*. Article présentée à the Materials Science Forum.
- Rogotovsky, A. N., Shipelnikov, A. A., & Bobyleva, N. A. (2018). Modeling and development of a forging ingot of rational design and mass. *Journal of Chemical Technology and Metallurgy*, 53(5), 936-942.

- Samanta, D., & Zabaras, N. (2006). Control of macrosegregation during the solidification of alloys using magnetic fields. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 49(25-26), 4850-4866. doi:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2006.05.045
- Scepi, M., Andreoli, B., Basevi, S., & Giorgetti, A. (1981). Thermal and metallurgical control of the efficiency of ingot moulds for forging ingots. *Boll. Tec. Finsider*(391), 77-82.
- Schaffnit, P., Stallybrass, C., Konrad, J., Stein, F., & Weinberg, M. (2015). A Scheil–Gulliver model dedicated to the solidification of steel. *Calphad*, 48, 184-188. doi:<https://doi.org/10.1016/j.calphad.2015.01.002>
- Schneider, M. C., & Beckermann, C. (1991). Effects of simplified enthalpy relations on the prediction of heat transfer during solidification of a lead-tin alloy. *Applied mathematical modelling*, 15(11), 596-605. doi:[https://doi.org/10.1016/S0307-904X\(09\)81005-6](https://doi.org/10.1016/S0307-904X(09)81005-6)
- Schneider, M. C., & Beckermann, C. (1995a). Formation of macrosegregation by multicomponent thermosolutal convection during the solidification of steel. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 26(9), 2373-2388. doi:10.1007/BF02671251
- Schneider, M. C., & Beckermann, C. (1995b). 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. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 38(18), 3455-3473. doi:[https://doi.org/10.1016/0017-9310\(95\)00054-D](https://doi.org/10.1016/0017-9310(95)00054-D)
- Schneider, M. C., Gu, J. P., Beckermann, C., Boettinger, W. J., & Kattner, U. R. (1997). Modeling of micro- and macrosegregation and freckle formation in single-crystal nickel-base superalloy directional solidification. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 28(7), 1517-1531. doi:10.1007/s11661-997-0214-3
- Sente.Software.Ltd. (2005). JMatPro User's Guide.
- Singh, A. K., Basu, B., & Ghosh, A. (2006). Role of appropriate permeability model on numerical prediction of macrosegregation. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 37(5), 799-809. doi:10.1007/s11663-006-0062-3
- Singh, A. K., Pardeshi, R., & Basu, B. (2001). Modelling of convection during solidification of metal and alloys. *Sadhana*, 26(1), 139-162. doi:10.1007/BF02728483
- Straffelini, G., Lutterotti, L., Tonolli, M., & Lestani, M. (2011). Modeling solidification microstructures of steel round billets obtained by continuous casting. *Isij International*, 51(9), 1448-1453. <https://doi.org/10.2355/isijinternational.1451.1448>.

- Sung, P., Poirier, D., & Felicelli, S. (2001). Sensitivity of mesh spacing on simulating macrosegregation during directional solidification of a superalloy. *International journal for numerical methods in fluids*, 35(3), 357-370.
- Sung, P. K., Poirier, D. R., & Felicelli, S. D. (2002). Continuum model for predicting microporosity in steel castings. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 10(5), 551. doi:10.1088/0965-0393/10/5/306
- SUZUKI, K., & TANIGUCHI, K. (1981). The mechanism of reducing “a” segregates in steel ingots. *Transactions of the Iron and Steel Institute of Japan*, 21(4), 235-242.
- Szekely, J., & Jassal, A. S. (1978). An experimental and analytical study of the solidification of a binary dendritic system. *Metallurgical Transactions B*, 9(3), 389-398. doi:10.1007/BF02654412
- Tanzer, R., Schützenhöfer, W., Reiter, G., Fauland, H. P., Könözsy, L., Ishmurzin, A., . . . Ludwig, A. (2009). Validation of a Multiphase Model for the Macrosegregation and Primary Structure of High-Grade Steel Ingots. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 40(3), 305-311. doi:10.1007/s11663-008-9207-x
- Tashiro, K., Watanabe, S., Kitagawa, I., & Tamura, I. (1983). Influence of mould design on the solidification and soundness of heavy forging ingots. *Transactions of the Iron and Steel Institute of Japan*, 23(4), 312-321. Repéré à <https://doi.org/10.2355/isijinternational1966.2323.2312>
- TherCast2.1®. (2021). TherCast 2.1®, Transvalor, S.A., Cedex, France.
- Transvalor, S. A., Cedex, France. (2017). THERCAST® NxT 2.1, USER MANUAL, Ingot Casting. Dans Transvalor (Ed.).
- Tu, W. T., Shen, H. F., & Liu, B. C. (2015). Modelling of macrosegregation in a 231-ton steel ingot with multi-pouring process. *Materials Research Innovations*, 19(sup4), S59-S63. doi:10.1179/1432891715Z.0000000001517
- Tveito, K. O., Pakanati, A., M’hamdi, M., Combeau, H., & Založník, M. (2018). A simplified three-phase model of equiaxed solidification for the prediction of microstructure and macrosegregation in castings. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 49, 2778-2794.
- V Suri, K. Y. (2002). Modeling for casting and solidification processing. book, 95-122. doi://doi.org/10.1201/9781482277333
- Vannier, I., Combeau, H., & Lesoult, G. (1993). Numerical model for prediction of the final segregation pattern of bearing steel ingots. *Materials Science and Engineering: A*, 173(1), 317-321. doi:[https://doi.org/10.1016/0921-5093\(93\)90236-8](https://doi.org/10.1016/0921-5093(93)90236-8)

Vesuvius. <https://www.vesuvius.com/>.

- Voller, V. R., & Beckermann, C. (1999). A unified model of microsegregation and coarsening. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 30(8), 2183-2189. doi:10.1007/s11661-999-0030-z
- Voller, V. R., Brent, A. D., & Prakash, C. (1989). The modelling of heat, mass and solute transport in solidification systems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 32(9), 1719-1731. doi:[https://doi.org/10.1016/0017-9310\(89\)90054-9](https://doi.org/10.1016/0017-9310(89)90054-9)
- Voller, V. R., Mouchmov, A., & Cross, M. (2004). An explicit scheme for coupling temperature and concentration fields in solidification models. *Applied mathematical modelling*, 28(1), 79-94. doi:[https://doi.org/10.1016/S0307-904X\(03\)00115-X](https://doi.org/10.1016/S0307-904X(03)00115-X)
- Von Schweinichen, P., Chen, Z., Senk, D., & Lob, A. (2013). Effect of different casting parameters on the cleanliness of high manganese steel ingots compared to high carbon steel. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 44, 5416-5423. Repéré à <https://doi.org/10.1007/s11661-11013-11949-11667>
- Wang, C. Y., & Beckermann, C. (1993). A unified solute diffusion model for columnar and equiaxed dendritic alloy solidification. *Materials Science and Engineering: A*, 171(1), 199-211. doi:[https://doi.org/10.1016/0921-5093\(93\)90407-6](https://doi.org/10.1016/0921-5093(93)90407-6)
- Wang, C. Y., & Beckermann, C. (1996a). Equiaxed dendritic solidification with convection: Part I. Multiscale/multiphase modeling. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 27(9), 2754-2764. doi:10.1007/BF02652369
- Wang, C. Y., & Beckermann, C. (1996b). Equiaxed dendritic solidification with convection: Part II. Numerical simulations for an Al-4 Wt pct Cu alloy. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 27(9), 2765-2783. doi:10.1007/BF02652370
- Wang, J., Fu, P., Liu, H., Li, D., & Li, Y. (2012). Shrinkage porosity criteria and optimized design of a 100-ton 30Cr2Ni4MoV forging ingot. *Materials & Design*, 35, 446-456. Repéré à <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2011.1009.1056>
- Willers, B., Eckert, S., Michel, U., Haase, I., & Zouhar, G. (2005). The columnar-to-equiaxed transition in Pb–Sn alloys affected by electromagnetically driven convection. *Materials Science and Engineering: A*, 402(1), 55-65. doi:<https://doi.org/10.1016/j.msea.2005.03.108>
- Wu, M., Fjeld, A., & Ludwig, A. (2010). Modelling mixed columnar-equiaxed solidification with melt convection and grain sedimentation – Part I: Model description. *Computational Materials Science*, 50(1), 32-42. doi:<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2010.07.005>

- Wu, M., & Ludwig, A. (2006). A three-phase model for mixed columnar-equiaxed solidification. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 37(5), 1613-1631. doi:10.1007/s11661-006-0104-0
- Wu, M., Ludwig, A., Bührig-Polaczek, A., Fehlbier, M., & Sahm, P. R. (2003). Influence of convection and grain movement on globular equiaxed solidification. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 46(15), 2819-2832. doi:[https://doi.org/10.1016/S0017-9310\(03\)00054-1](https://doi.org/10.1016/S0017-9310(03)00054-1)
- Wu, M., Ludwig, A., & Fjeld, A. (2010). Modelling mixed columnar-equiaxed solidification with melt convection and grain sedimentation – Part II: Illustrative modelling results and parameter studies. *Computational Materials Science*, 50(1), 43-58. doi:<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2010.07.006>
- Wu, M., Ludwig, A., & Kharicha, A. (2018). Simulation of As-Cast Steel Ingots. *Steel Research International*, 89(1), 1700037. doi:<https://doi.org/10.1002/srin.201700037>
- Wu, M., Ludwig, A., & Kharicha, A. (2019). Volume-Averaged Modeling of Multiphase Flow Phenomena during Alloy Solidification. *Metals*, 9(2), 229.
- Xu, D., & Li, Q. (1991a). Gravity- and Solidification-Shrinkage-Induced Liquid Flow in a Horizontally Solidified Alloy Ingot. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 20(2), 203-221. doi:10.1080/10407789108944817
- Xu, D., & Li, Q. (1991b). Numerical Method for Solution of Strongly Coupled Binary Alloy Solidification Problems. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 20(2), 181-201. doi:10.1080/10407789108944816
- Yadong, X., Yanan, W., Wen, Z., Ting, F., Yong, Z., & Guangbing, Z. (2019). *Simulation Analysis of Exothermic Powder in Riser Area on Inner Quality of Steel Ingot*. Paper presented at the IOP Conference Series: Materials Science and Engineering.
- Yoo, H., & Viskanta, R. (1992). Effect of anisotropic permeability on the transport process during solidification of a binary mixture. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 35(10), 2335-2346. doi:[https://doi.org/10.1016/0017-9310\(92\)90076-5](https://doi.org/10.1016/0017-9310(92)90076-5)
- Yu, S., Zhu, L.-q., Lai, J.-h., Pan, M.-x., Liu, Y.-y., Xuan, W.-d., . . . Ren, Z.-m. (2022). Application of heat absorption method to reduce macrosegregation during solidification of bearing steel ingot. *Journal of Iron and Steel Research International*, 1-12.
- Zhang, C. (2020). *Influence of casting process parameters on macrosegregation in large size steel ingots using experimentation and simulation*. (Thèse de doctorat, École de technologie supérieure, University of Québec, Québec, QC, Canada).

- Zhang, C., Jahazi, M., & Tremblay, R. (2020). Simulation and experimental validation of the effect of superheat on macrosegregation in large-size steel ingots. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 107(1), 167-175. doi:10.1007/s00170-020-05044-z
- Zhang, C., Loucif, A., Jahazi, M., & Morin, J.-B. (2022). FE Modelling and Prediction of Macrosegregation Patterns in Large Size Steel Ingots: Influence of Filling Rate. *Metals*, 12(1), 29. doi:10.3390/met12010029
- Zhang, C., Loucif, A., Jahazi, M., & Morin, J. B. (2022). FEM Simulation of the Effect of Mold Initial Temperature on Carbon Macrosegregation in Large-Size Steel Ingots. *Materials Science Forum*, 1053, 258-263. doi:10.4028/p-o2nv3x
- Zhang, C., Loucif, A., Jahazi, M., Tremblay, R., & Lapierre, L.-P. (2018). On the effect of filling rate on positive macrosegregation patterns in large size cast steel ingots. *Applied Sciences*, 8(10), 1878.
- Zhang, C., Shahriari, D., Loucif, A., Jahazi, M., Lapierre-Boire, L.-P., & Tremblay, R. (2017). *Effect of segregated alloying elements on the high strength steel properties: Application to the large size ingot casting simulation*. Article présentée à Tms 2017 146th Annual Meeting & Exhibition Supplemental Proceedings.
- Zhang, C., Shahriari, D., Loucif, A., Melkonyan, H., & Jahazi, M. (2018). Influence of thermomechanical shrinkage on macrosegregation during solidification of a large-sized high-strength steel ingot. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 99, 3035-3048. doi:<https://doi.org/10.1007/s00170-018-2695-1>
- Zhang, Y., Xu, C., Liu, N., Zhang, Y., & Xue, Z. (2021). Effects of weight-compatible design on ingot solidification. *Steel Research International*, 92(3), 2000560. doi:<https://doi.org/10.1002/srin.202000560>
- Zhao, X., Zhang, J., Lei, S., & Wang, Y. (2014). The Position Study of Heavy Reduction Process for Improving Centerline Segregation or Porosity With Extra-Thickness Slabs. *Steel Research International*, 85(4), 645-658.
- Zhao, Y. N. (2021). Influence of Mould Slenderness Ratio on the Solidification of Heavy Ingots by Numerical Simulation. *Key Engineering Materials*, 871, 27-31.
- Zhao, Z., Cui, J., Dong, J., & Zhang, B. (2007). Effect of low-frequency magnetic field on microstructures and macrosegregation of horizontal direct chill casting 7075 aluminum alloy. *Journal of Materials Processing Technology*, 182(1), 185-190. doi:<https://doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2006.07.029>

Zhao, Z., Cui, J., & Nagaumi, H. (2005). Effect of low-frequency magnetic fields on microstructures of horizontal direct chill cast 2024 aluminum alloys. *Materials transactions*, 46(8), 1903-1907.

Zimmermann, G., Sturz, L., Billia, B., Mangelinck-Noel, N., Thi, H. N., Gandin, C.-A., . . . Mirihanage, W. U. (2011). *Investigation of columnar-to-equiaxed transition in solidification processing of AlSi alloys in microgravity—The CETSOL project*. Article présentée à Journal of Physics: Conference Series.