

# Formation de macroségrégations pendant la solidification d'un alliage Pb-Sn : Synthèse des résultats d'un benchmark

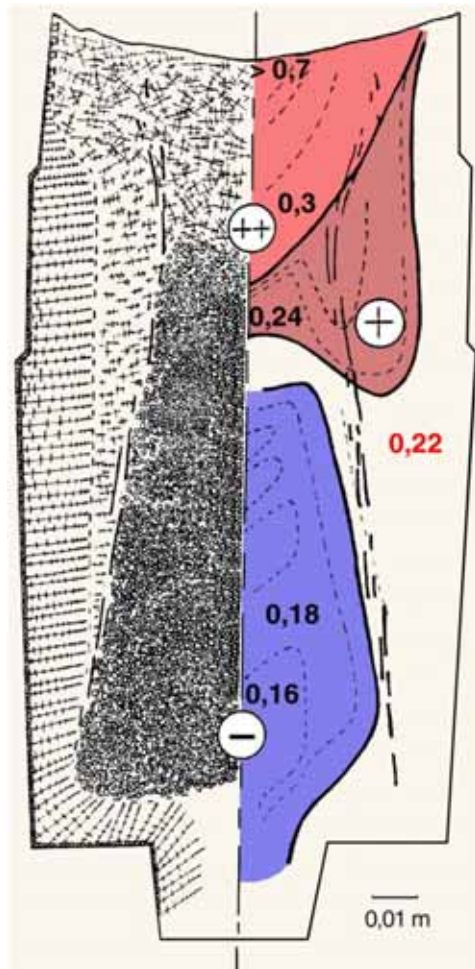
H. Combeau<sup>1</sup> – M. Bellet<sup>2</sup> – Y. Fautrelle<sup>3</sup> – D. Gobin<sup>4</sup> – E. Arquis<sup>5</sup> –  
O. Budenkova<sup>3</sup> – B. Dussoubs<sup>1</sup> – Y. Duterrail<sup>3</sup> – A. Kumar<sup>1</sup> –  
S. Mosbah<sup>1</sup> – M. Rady<sup>5</sup> – C.A. Gandin<sup>2</sup> – B. Goyeau<sup>6</sup> – M. Založnik<sup>1</sup>

- 1 Institut Jean Lamour
- 2 CEMEF
- 3 SIMAP
- 4 FAST
- 5 TREFLE
- 6 EM2C

# Formation de macroségrégations pendant la solidification d'un alliage Pb-Sn : Synthèse des résultats d'un benchmark

- Introduction
- Définition du benchmark
- Analyse des résultats du benchmark
- Conclusions

# Macrostructures et macroségrégations observées sur un lingot d'acier de 65 tonnes

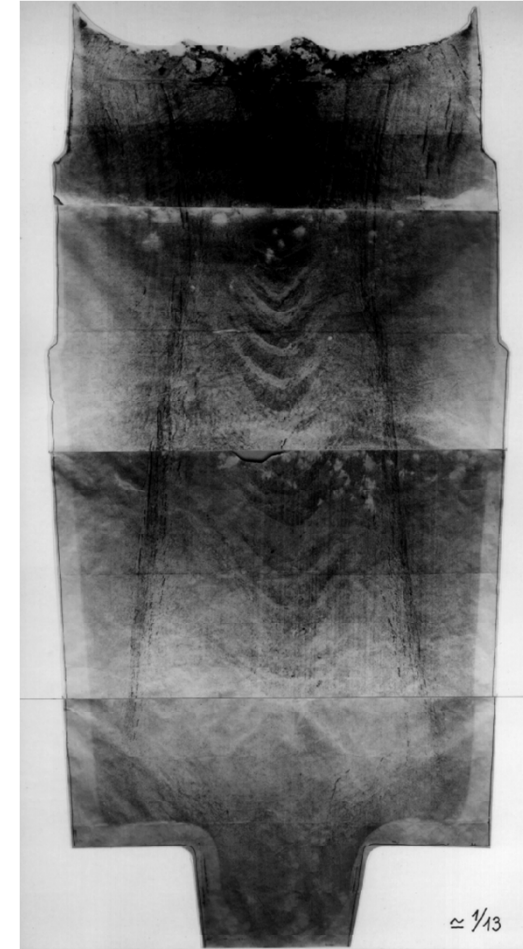


$C_c > C_c^0$

$C_c^0 = 0.22$

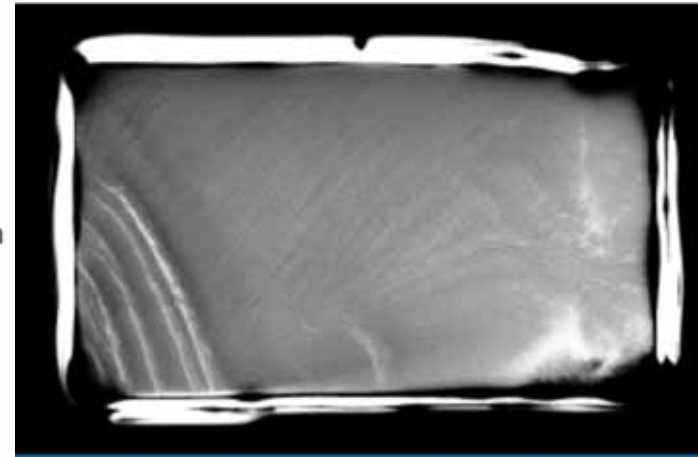
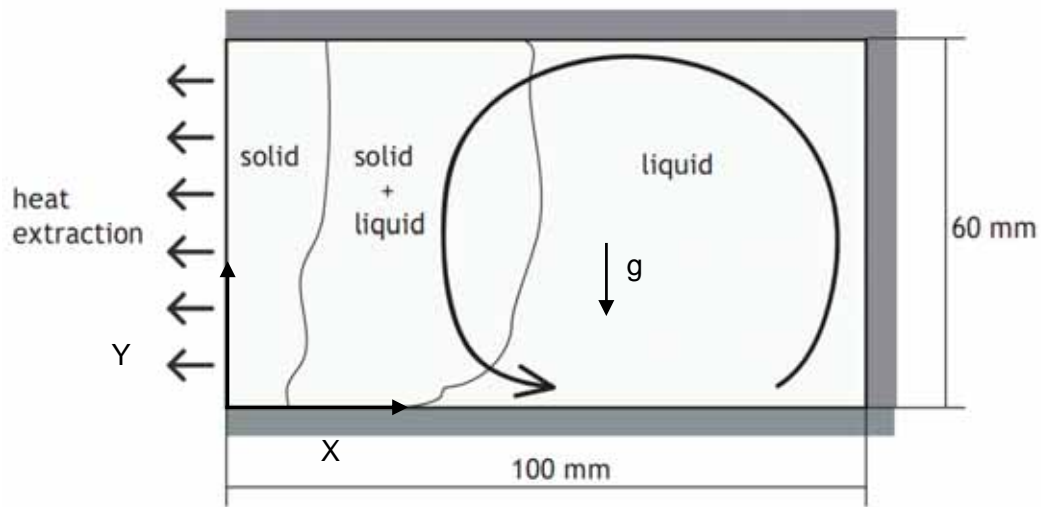
$C_c < C_c^0$

Analyse chimique  
Vol. d'analyse ~ cm<sup>3</sup>



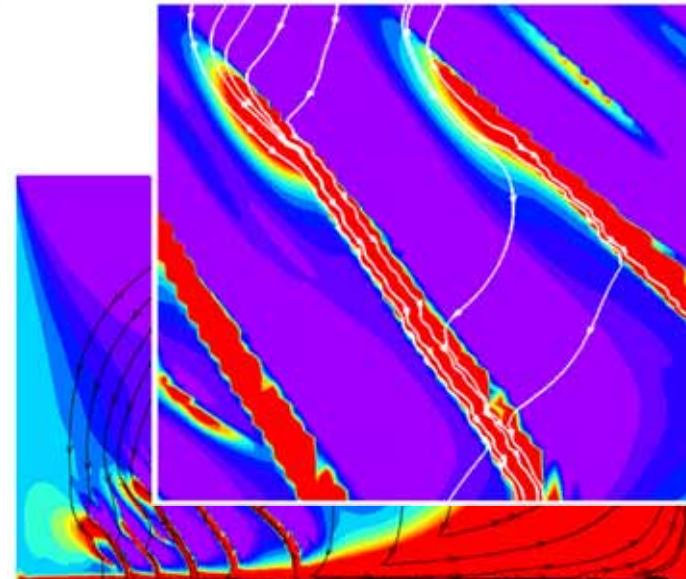
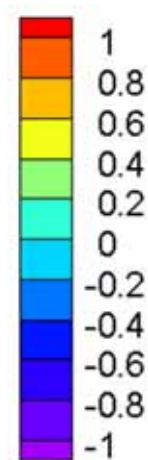
*lingot coulé par Mittal-Industeel (thèse T. Mazet)*

# Formation de canaux ségrégés



Expérience réalisée au SIMAP  
(Y. Fautrelle) C-C<sub>0</sub>

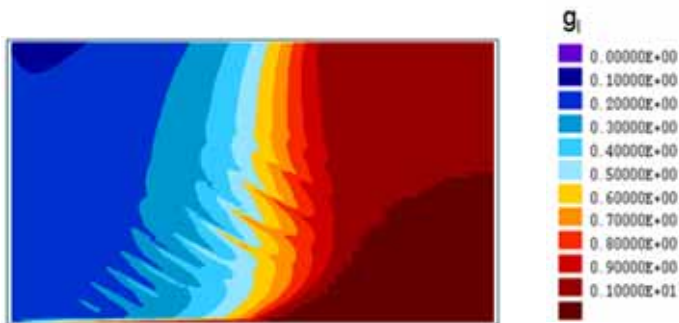
Alliage Sn-5%Pb  
(*post-doc A. Kumar*)



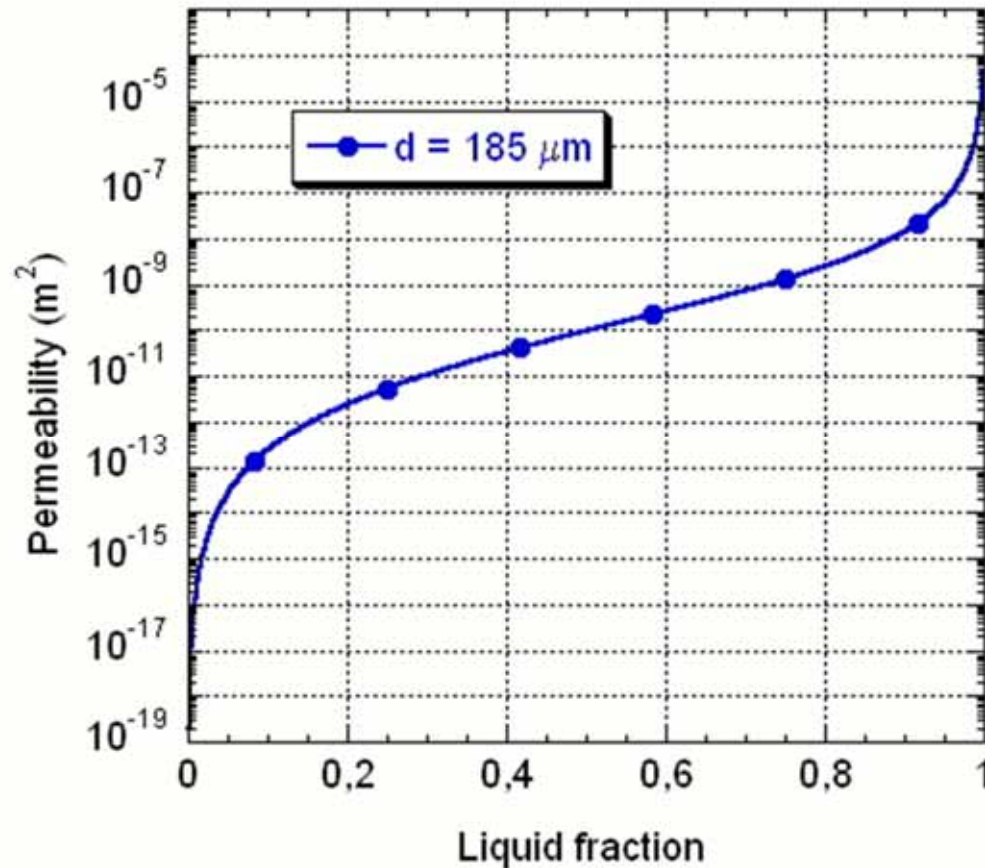
# Les difficultés liées à la modélisation et à la résolution de ce type de problème

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho^l \vec{V}) + \frac{1}{g^l} \vec{\nabla} (\rho^l \vec{V} \cdot \vec{V}) = \vec{\nabla} (\mu^l \vec{\nabla} (\vec{V})) - \frac{g^l \mu^l}{K} \vec{V} - g^l \vec{\nabla} p + \rho^l g^l \vec{g}$$

$$K = \frac{d^2 (g^l)^3}{180 (1 - g^l)^2}$$



La largeur des canaux est du même ordre de grandeur que la taille du V.E.R.



# Les difficultés liées à la modélisation et à la résolution de ce type de problème

Les métaux liquides ont un faible nombre de Prandtl

	Tm (°C)	Pr	Sc	Le
Al-Cu	600	$6 \cdot 10^{-3}$	130.	$2.1 \cdot 10^4$
Fe-C	1500	0.1	30.	300.
Sn-Pb	232	$4.7 \cdot 10^{-3}$	~100	~ $2.1 \cdot 10^3$



Favorable au développement d'instabilités hydrodynamiques

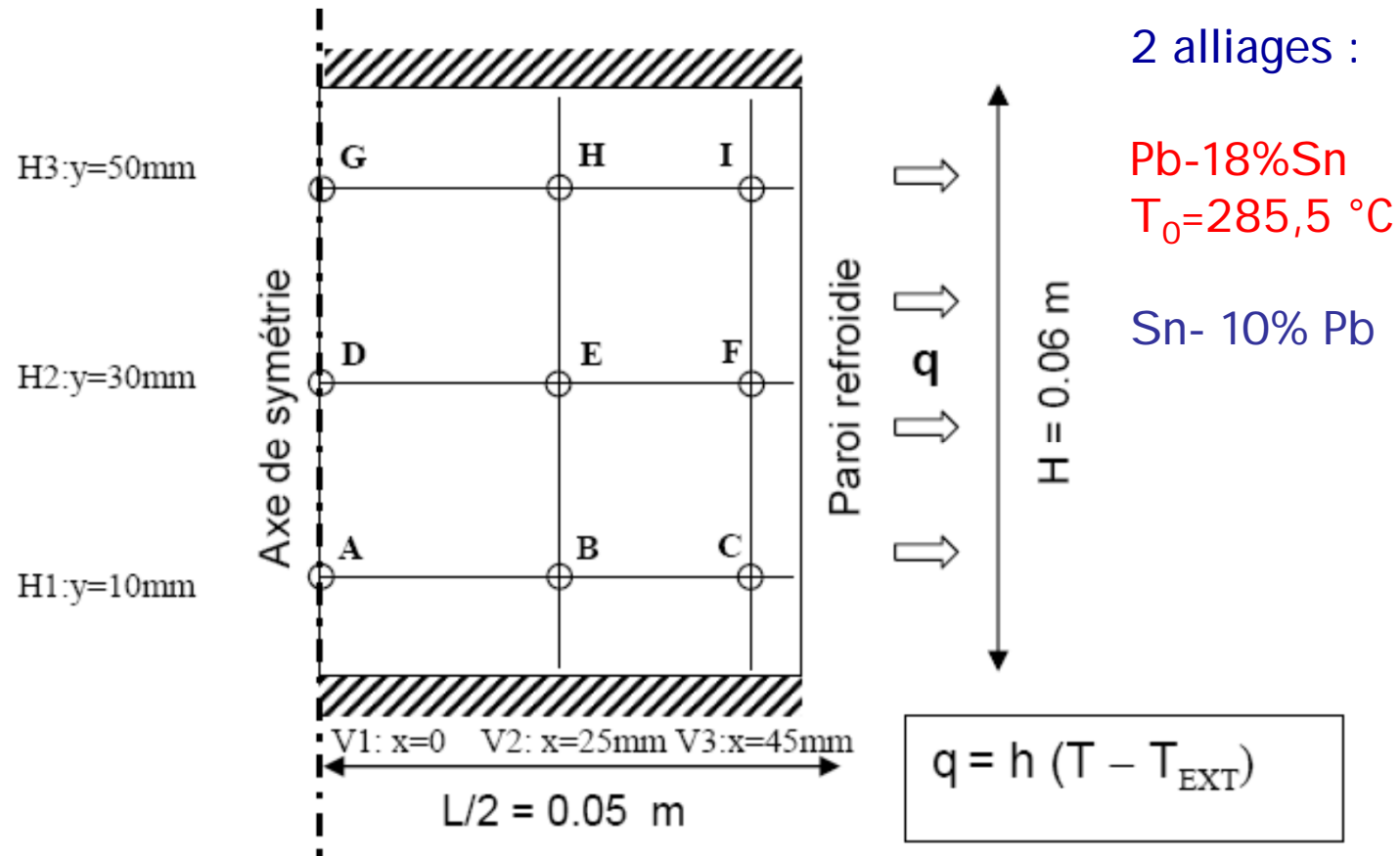
L'équation de conservation de la masse de soluté est hyperbolique (problème de fausse diffusion numérique) :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{C}) + \nabla (\vec{V} C_i) = 0$$

## Objectifs du projet ANR blanc SMACS :

- Faire un benchmark numérique en solidification
- Réalisation d'expériences avec une métrologie fine et une caractérisation des structures de solidification, des macro et des mésoségrégations
- Confrontation modèle expérience

# Benchmark numérique mené dans le cadre du projet SMACS



Site Web : [www.ijl.nancy-universite.fr/benchmark-solidification/](http://www.ijl.nancy-universite.fr/benchmark-solidification/)



## Modèle imposé

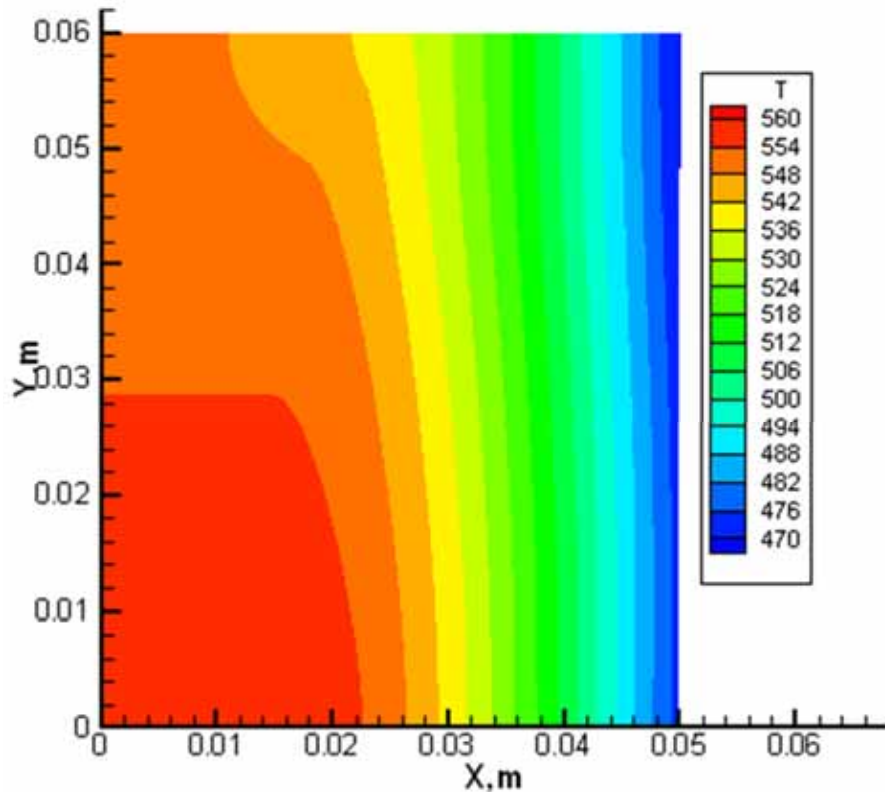
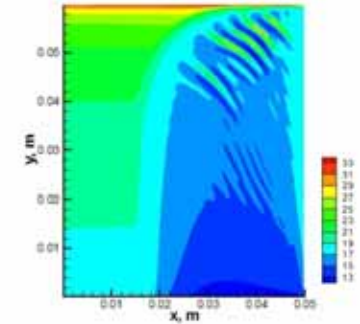
Masse	$\nabla \cdot \mathbf{V} = 0$
Quantité de mouvement	$\nabla \cdot (\mu_1 \nabla \mathbf{V}) - g_1 \nabla p - \frac{\mu_1 g_1}{K} \mathbf{V} + g_1 \tilde{\rho} \mathbf{g} = \rho_0 \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + \frac{\rho_0}{g_1} (\nabla \mathbf{V}) \mathbf{V}$
Energie	$\rho_0 \frac{\partial \langle h \rangle}{\partial t} + \rho_0 c_p \nabla T \cdot \mathbf{V} - \nabla \cdot (k \nabla T) = 0$
Soluté	$\frac{\partial \langle C \rangle}{\partial t} + \nabla C_1 \cdot \mathbf{V} = 0$
Microségrégation	$\langle C \rangle = g_l C_l + g_s C_s = (g_l + k_p (1 - g_l)) C_l$ $T = T_m + m C_l$

## Caractéristiques des codes de calcul utilisés dans ce benchmark

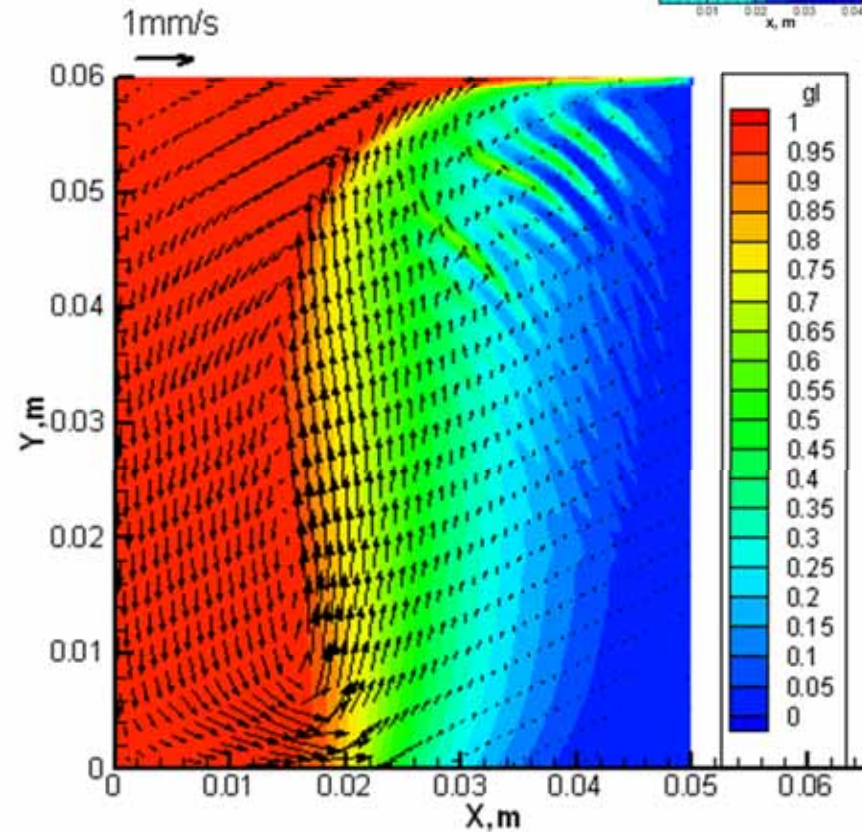
	Code de calcul	Maillage (taille moy. de maille (m))	Pas de temps (s)
CEMEF	R2SOL E.F. (SUPG)	46502 nœuds (2,5 x 10 <sup>-4</sup> )	5 x 10 <sup>-3</sup>
SIMAP EPM	FLUENT V.F. (2 <sup>nd</sup> order upwind)	200x240 (2,5 x 10 <sup>-4</sup> )	5 x 10 <sup>-3</sup>
IJL	SOLID V.F. (Upwind)	275x328 (1,8 x 10 <sup>-4</sup> )	5 x 10 <sup>-3</sup>
TREFLE	THETIS V.F. (TVD)	268x324 (1,9 x 10 <sup>-4</sup> )	1 x 10 <sup>-3</sup>
IJL	OpenFOAM (upwind et QUICK)	200x240 (2,5 x 10 <sup>-4</sup> )	5 x 10 <sup>-3</sup>

# Déroulement de la solidification

$$\frac{\partial \langle C \rangle}{\partial t} = \frac{-\mathbf{V} \cdot \nabla T}{m} \quad \text{Carte de composition moyenne en Sn}$$

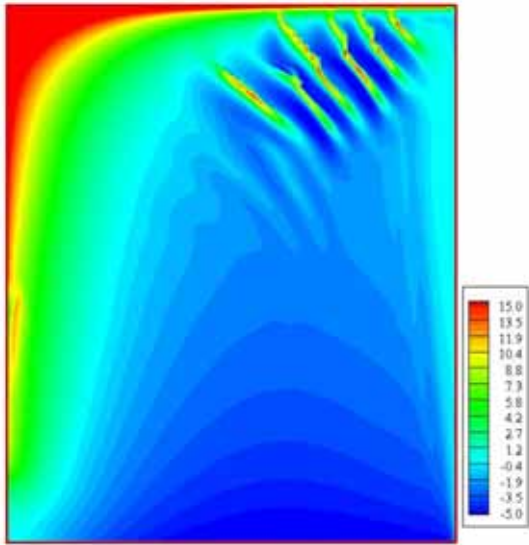


Champ de température

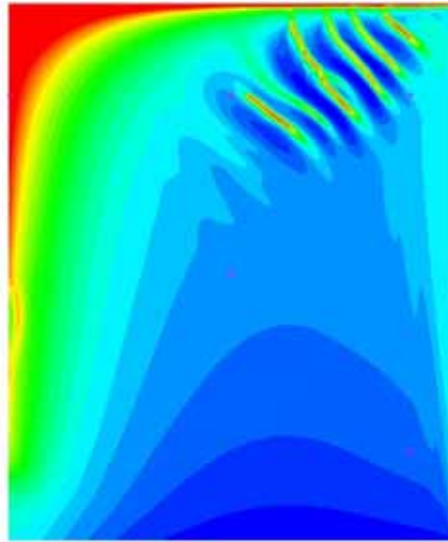


Champs de vitesse et iso-fractions liquide

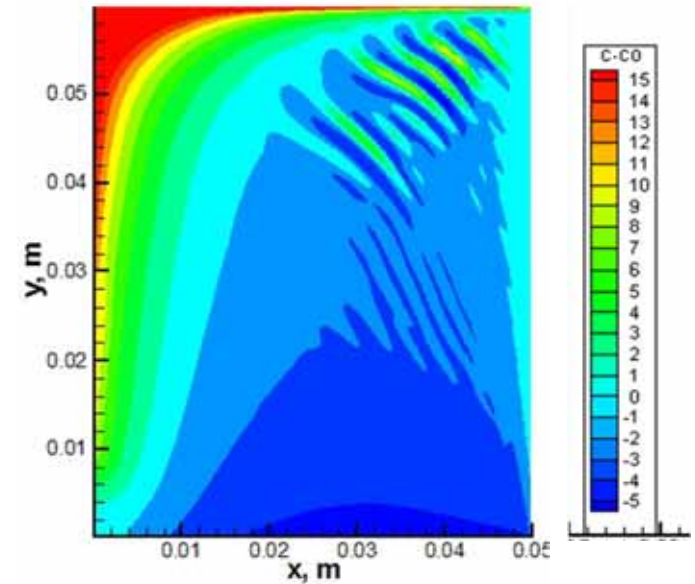
t = 120 s



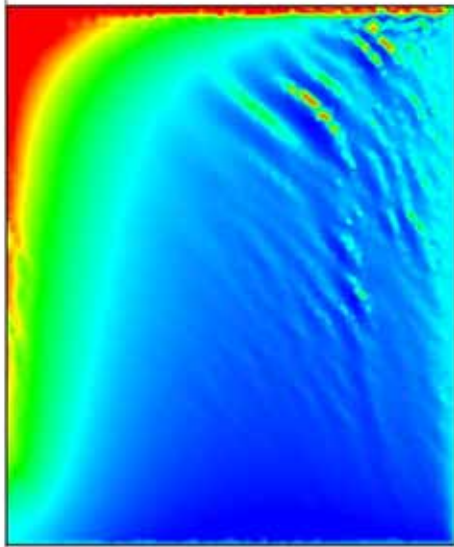
TREFLE (268x324)



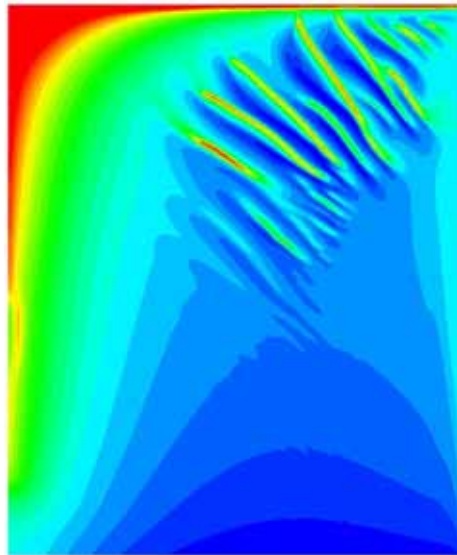
IJL OpenFOAM QUICK (200x240)



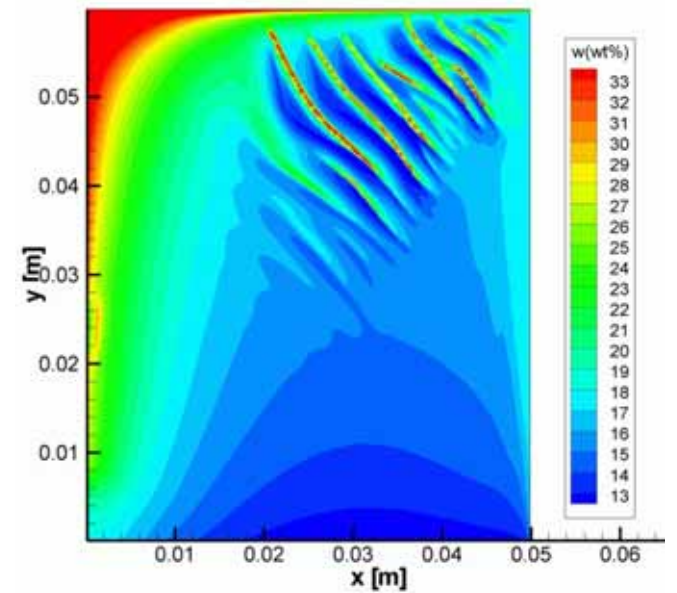
SIMAP (200x240)



CEMEF  $7.14 \cdot 10^{-4}$  [m]

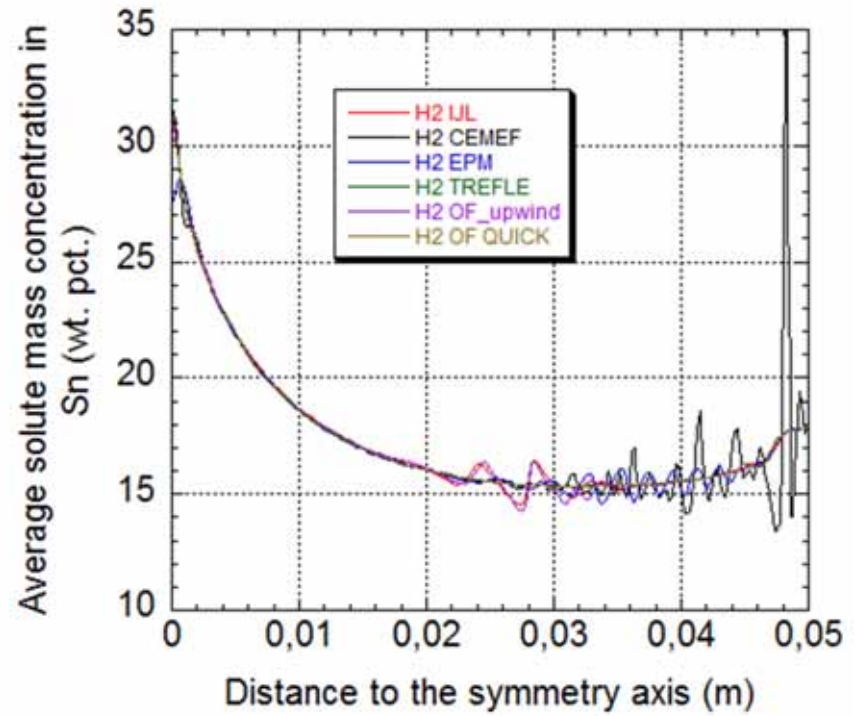
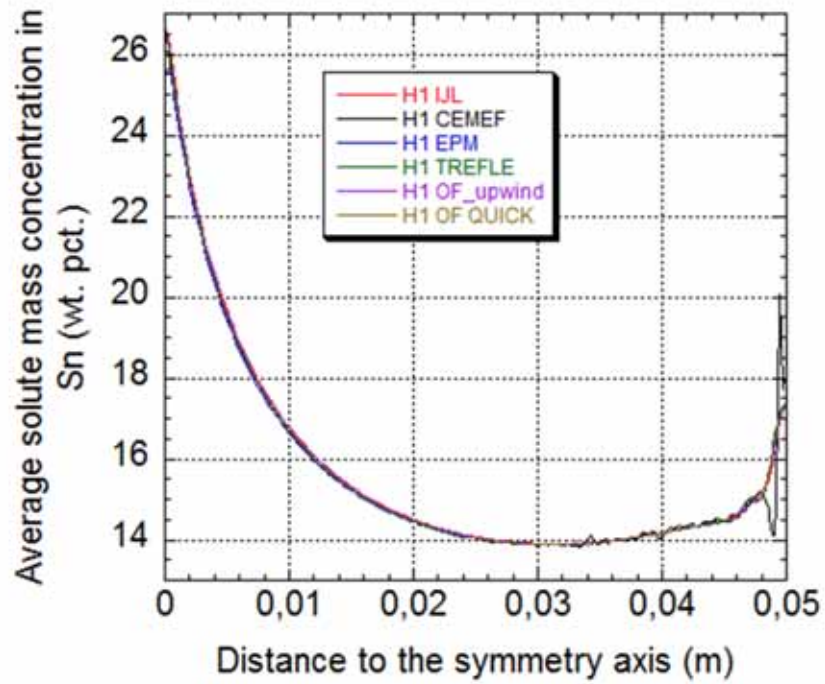
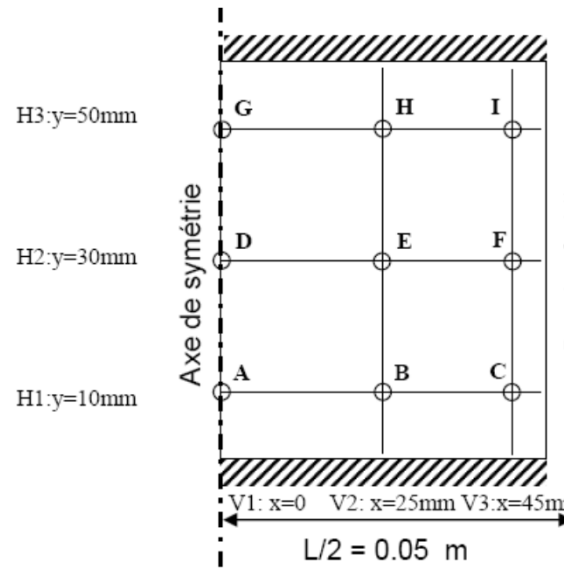


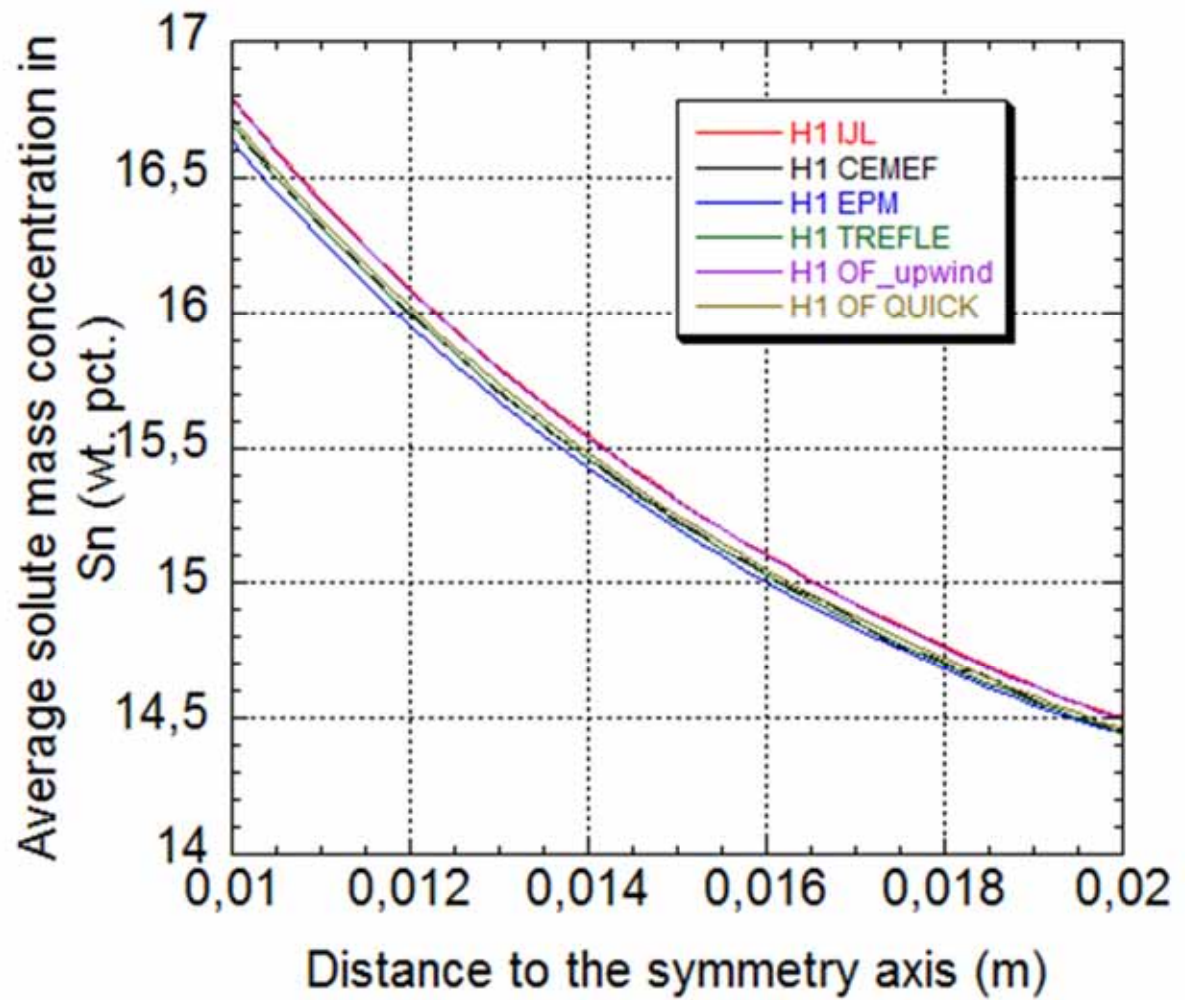
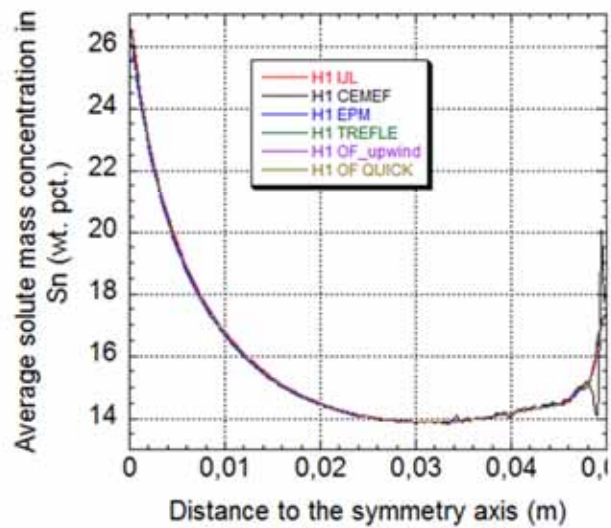
IJL OpenFOAM Upwind (200x240)

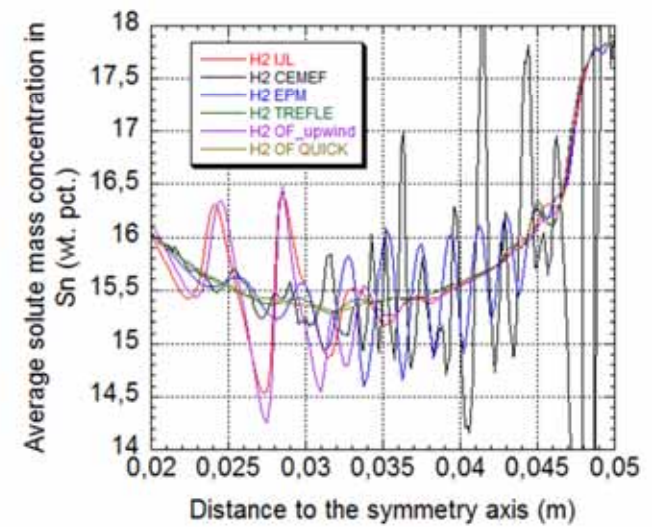
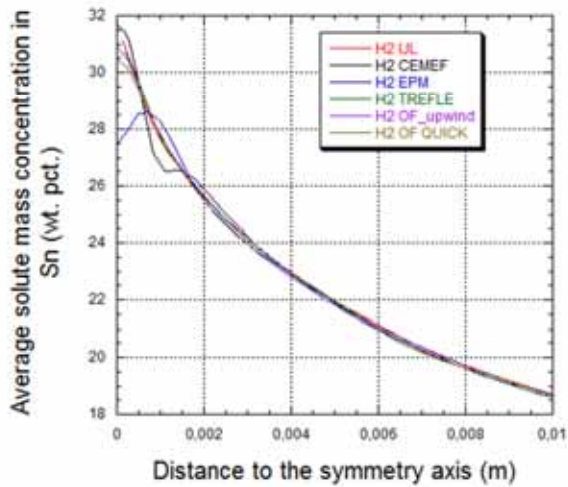
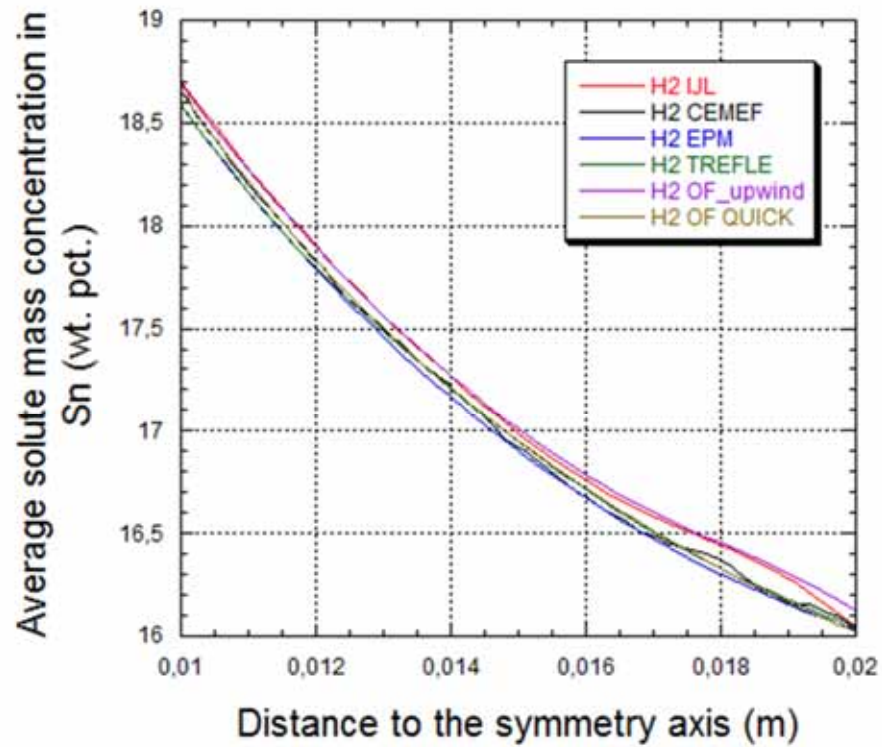
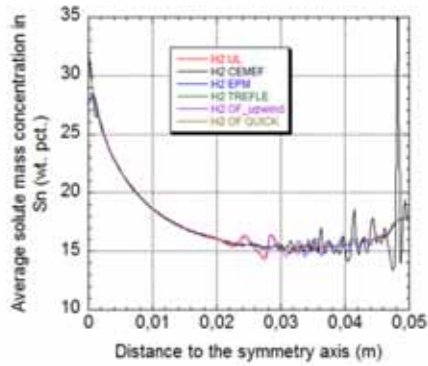


IJL (192x232)  $2.6 \cdot 10^{-4}$  [m]

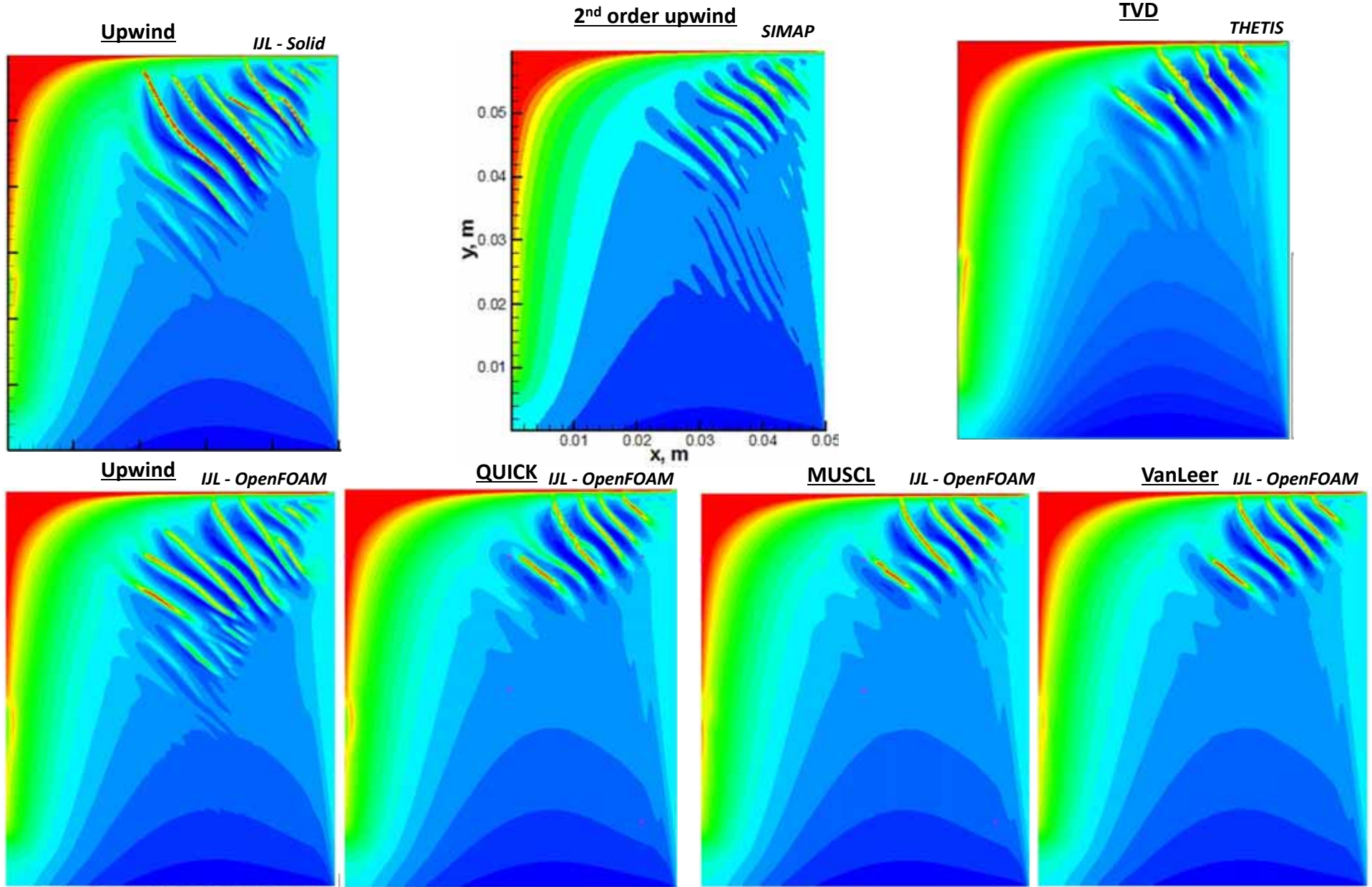
# Pb-18%Sn



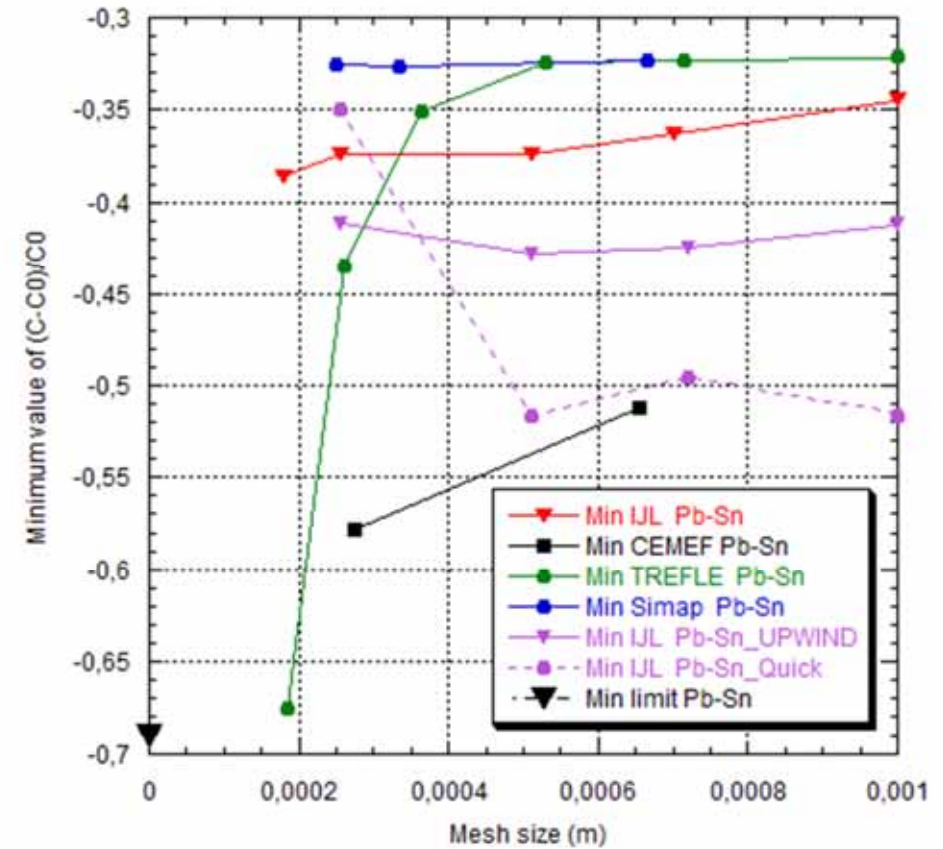
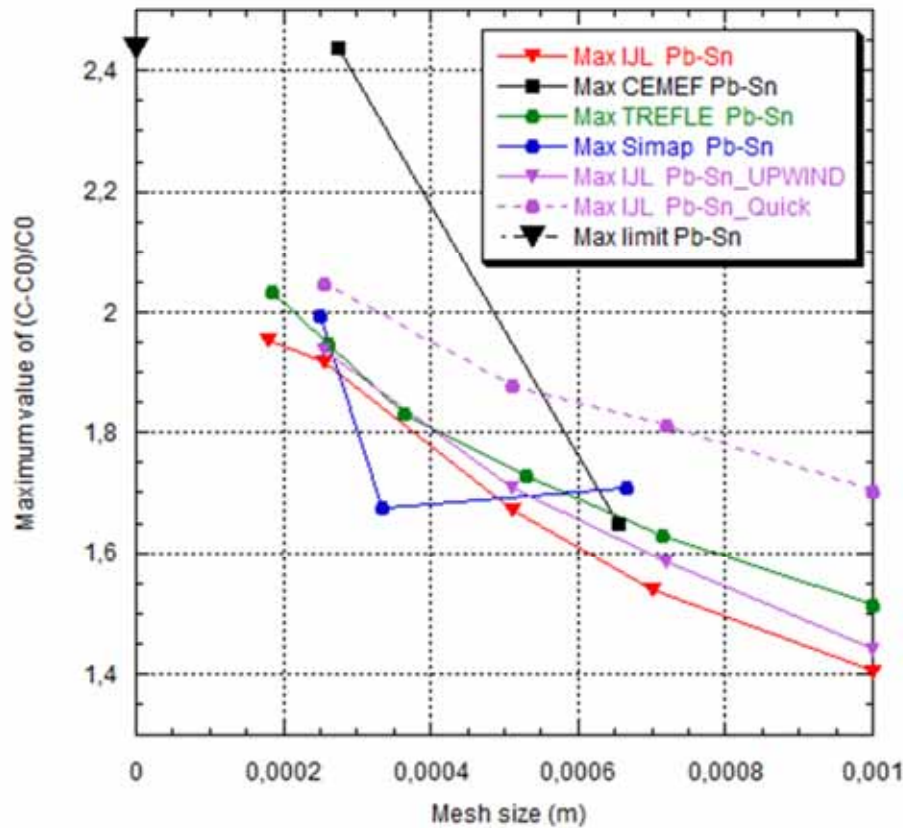




# Comparaison des canaux de ségrégation en fonction des schémas (maillage 240x200)



# Evolution des valeurs Min et Max du champ de composition moyenne en Sn En fonction de la taille de maille pour les sept contributions





## Position des min et max sur les cartes de composition finale

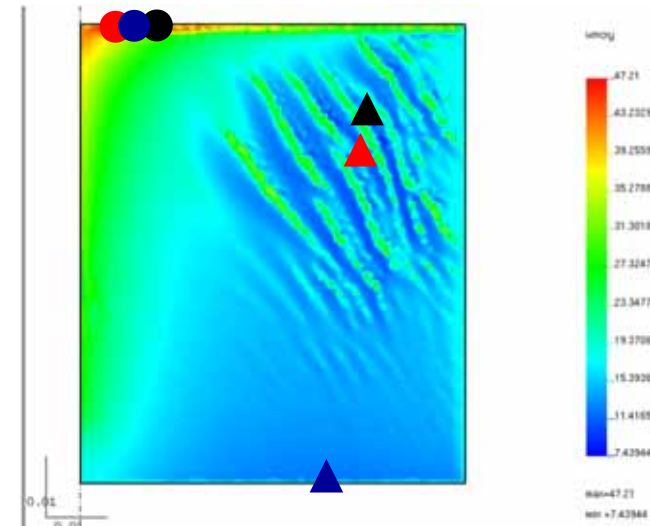
- ▲ Min : CEMEF
- Max
- ▲ Min : SIMAP
- Max
- ▲ Min : IJL
- Max

IJL :

- min =  $x=36.2$  mm  $y=44.74$  mm  
(tout en bas, différent de IJL et CEMEF)
- max =  $x=4.95$  mm  $y=59.74$  mm  
(en haut, coin gauche, proche IJL)

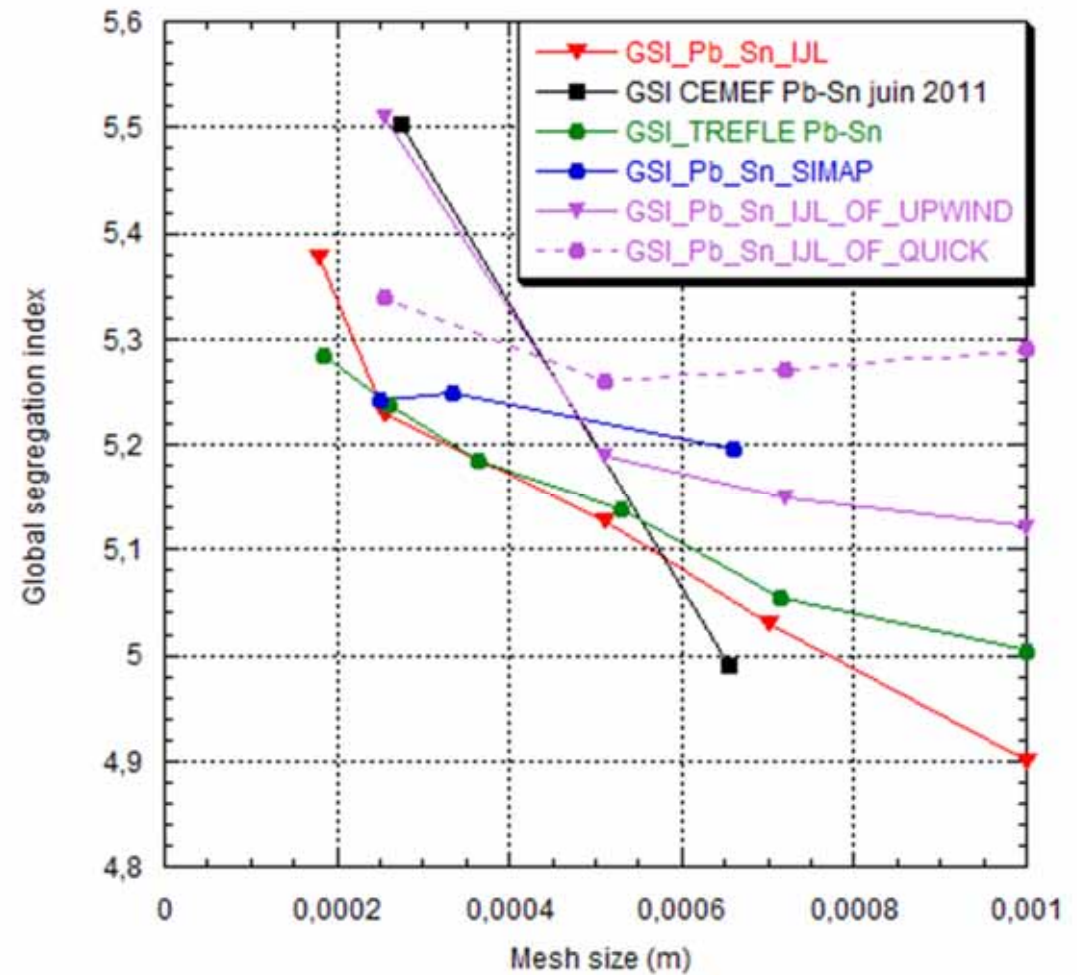
Simap :

- min =  $-5.86$   $x=32.875$  mm  $y=0.125$  mm  
(tout en bas, différent de IJL et CEMEF)
- max =  $36.331$   $x=6.62$  mm  $y=59.875$  mm  
(en haut, coin gauche, proche IJL)

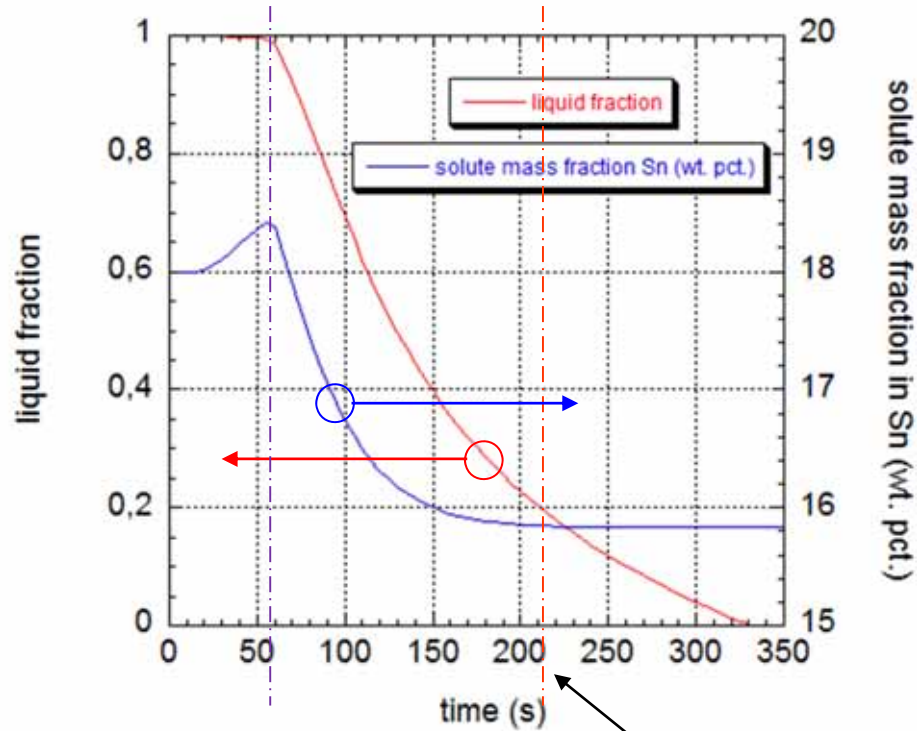


Evolution de l'indice de ségrégation en Sn en fonction de la taille de maille pour les sept contributions

$$GSI = \sqrt{\frac{1}{V_{tot}} \int_{V_{tot}} \left( \frac{\bar{C} - C^0}{C^0} \right)^2 dV}$$

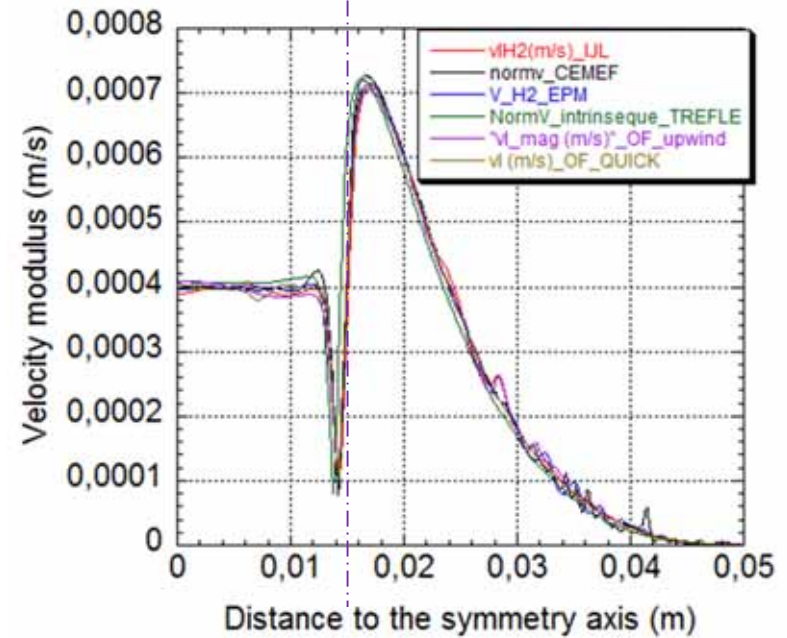
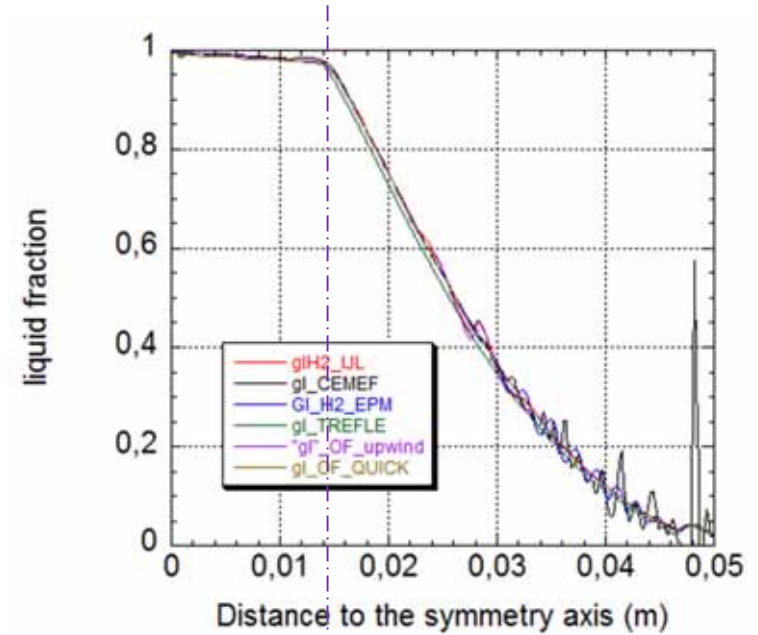


# Profils horizontaux suivant H2 de fraction liquide et de vitesse au temps 120 s

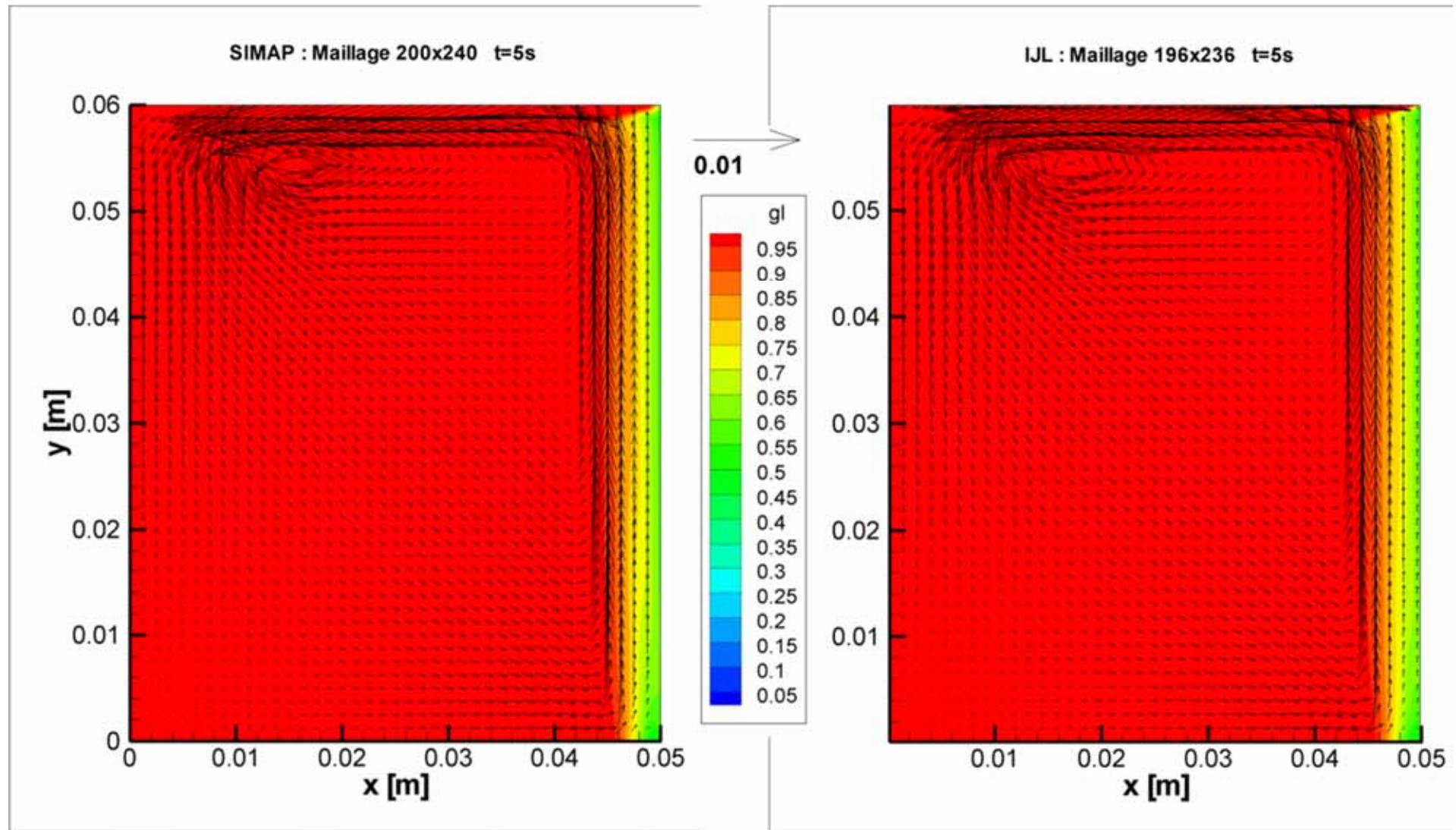


Evolution de  $g_l$  et  $C$  au point E

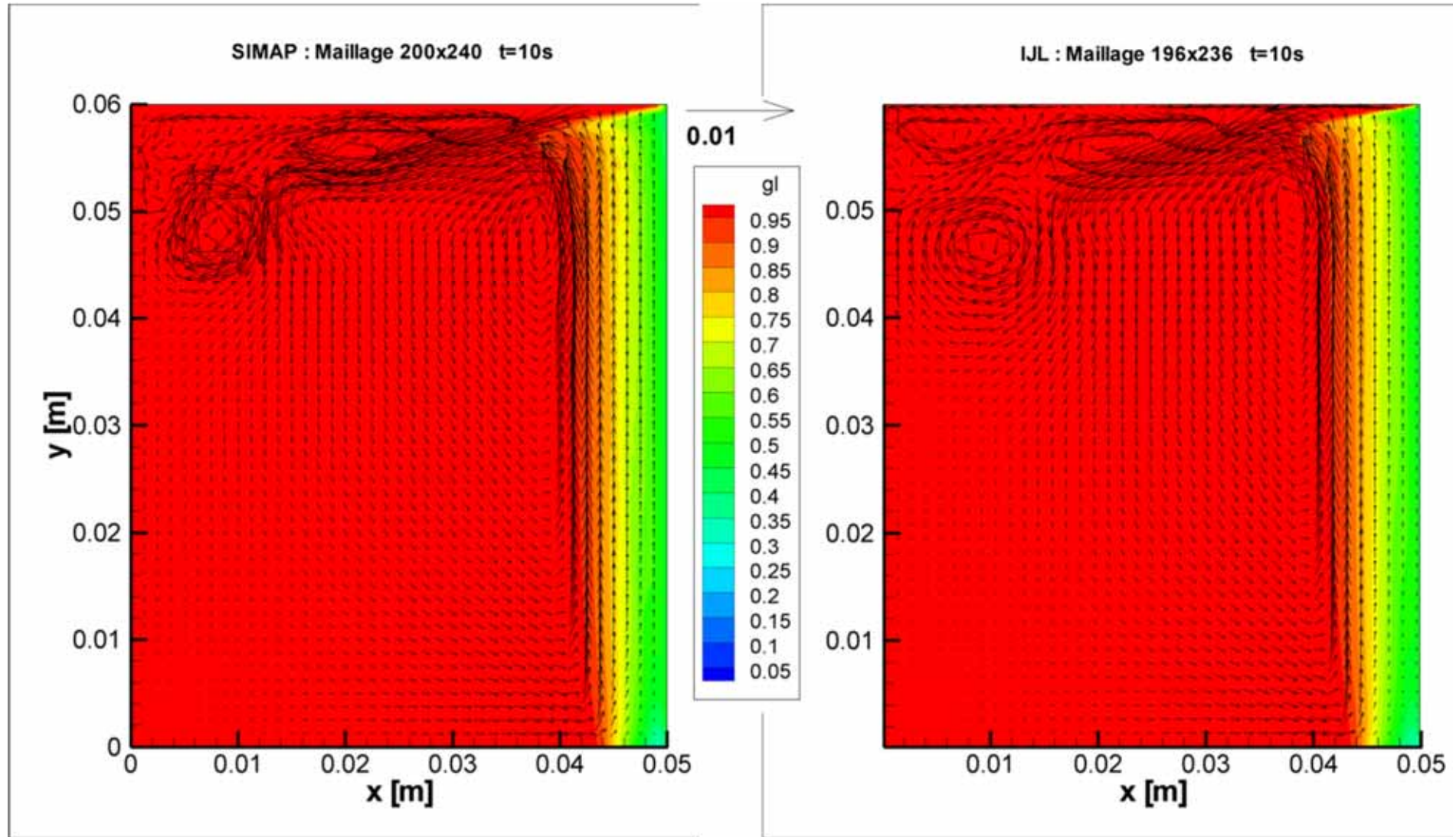
Arrêt de l'évolution de la composition moyenne



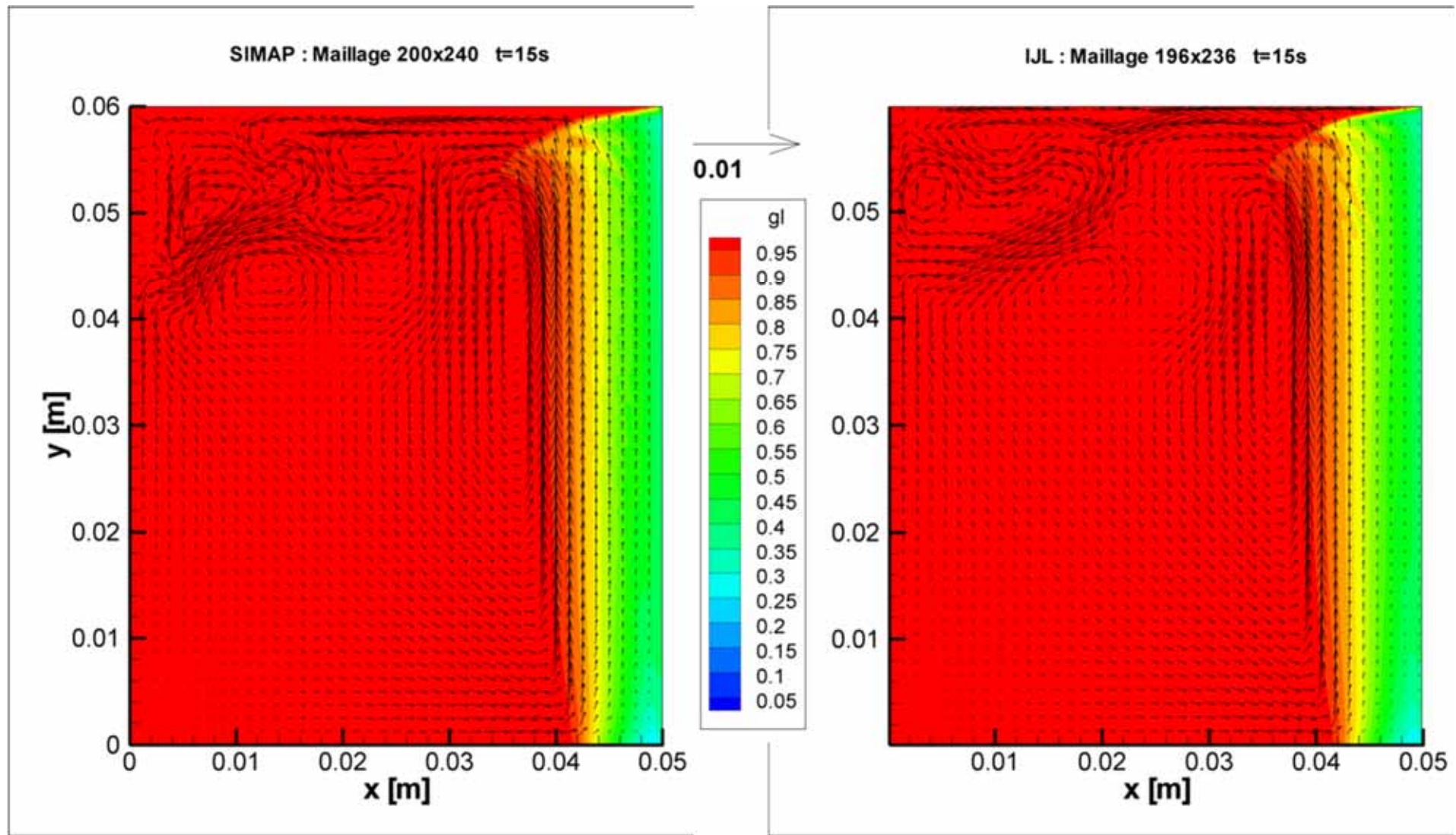
# Comparaisons SIMAP t=5s



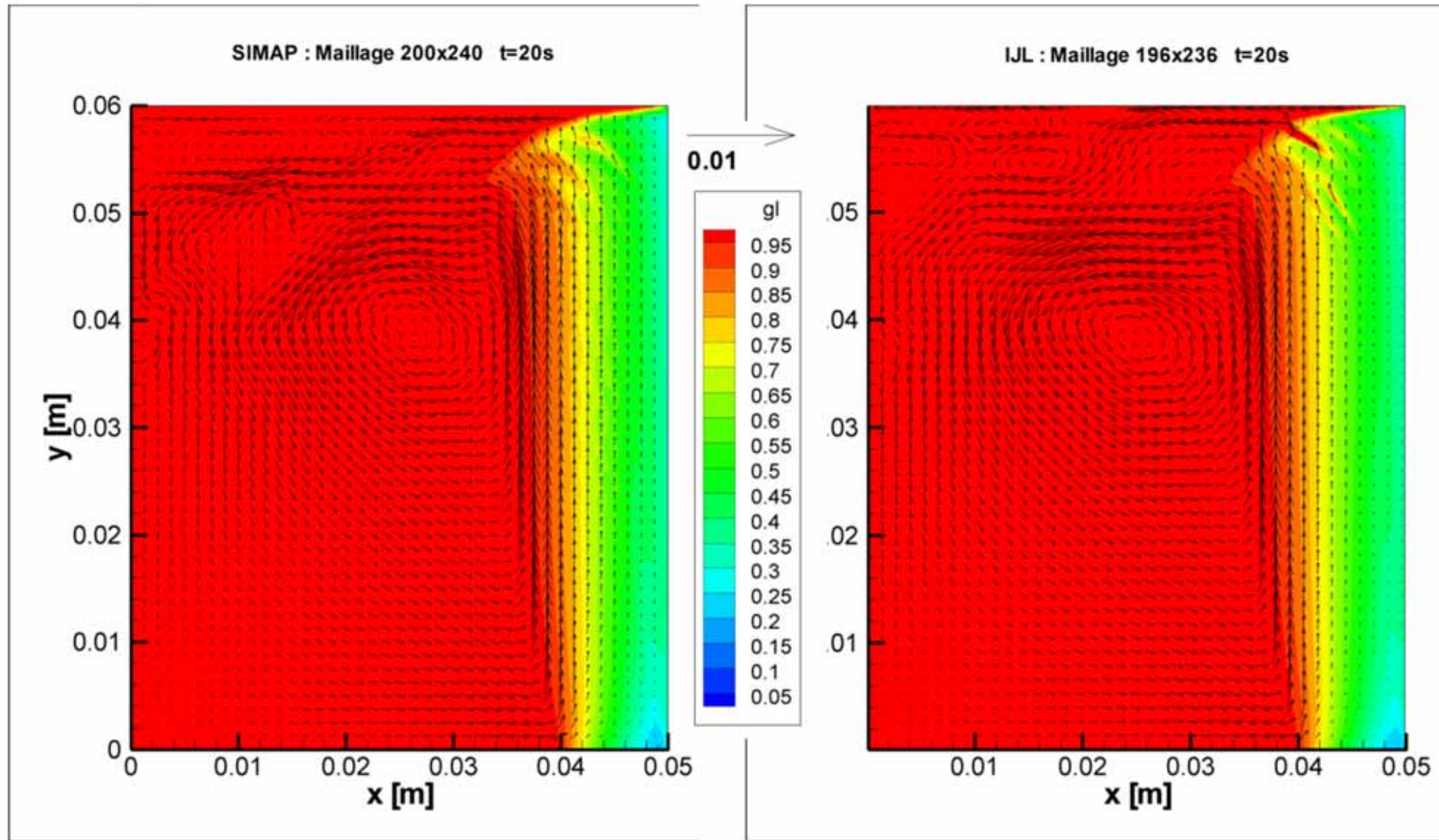
# Comparaisons SIMAP t=10s



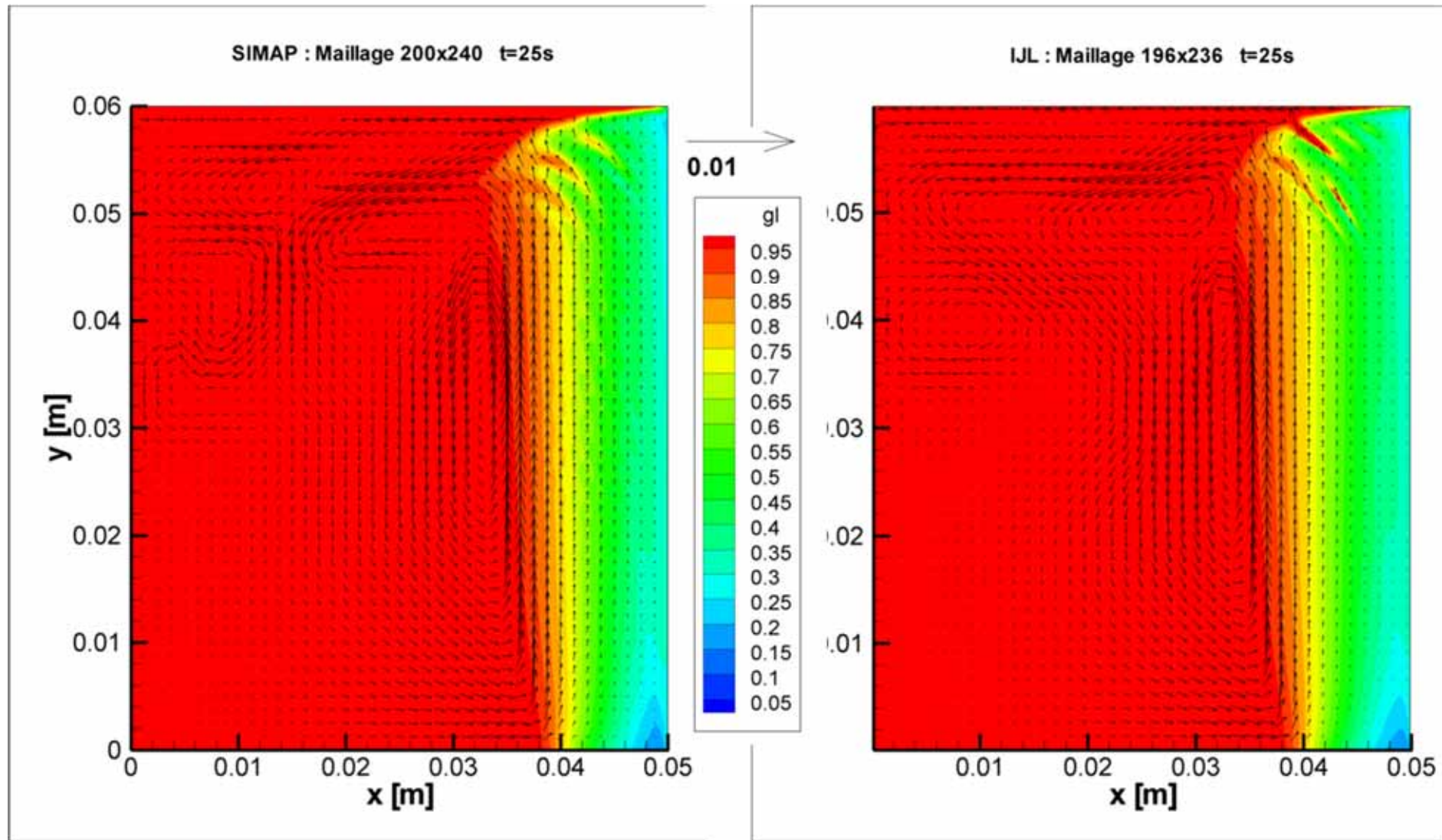
# Comparaisons SIMAP t=15s



# Comparaisons SIMAP t=20s

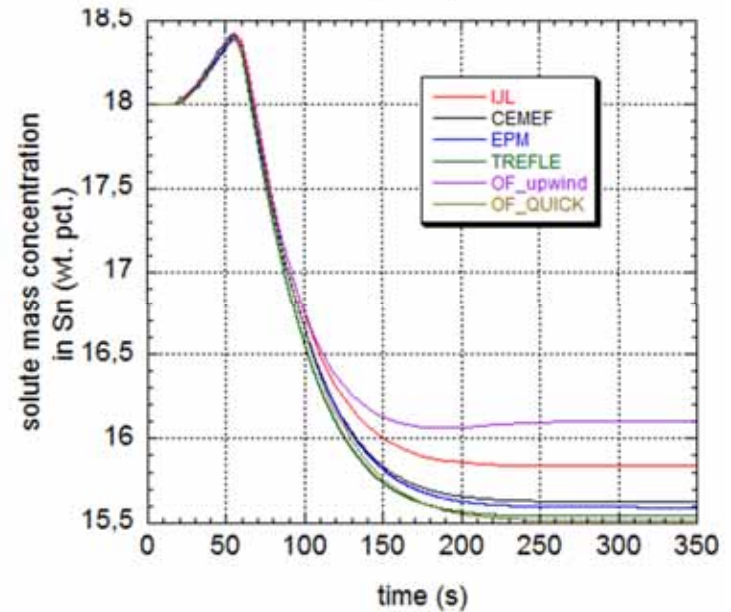
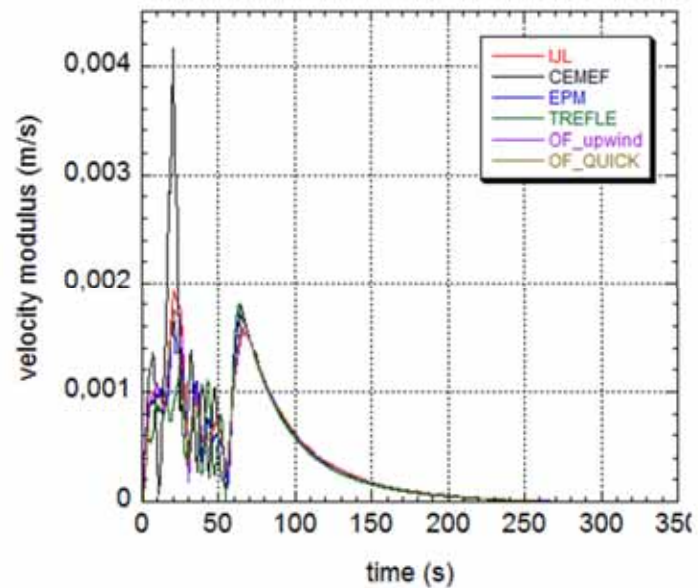
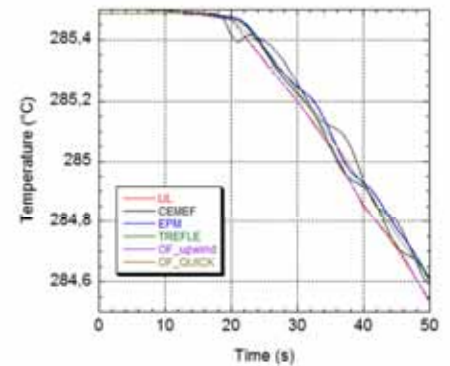
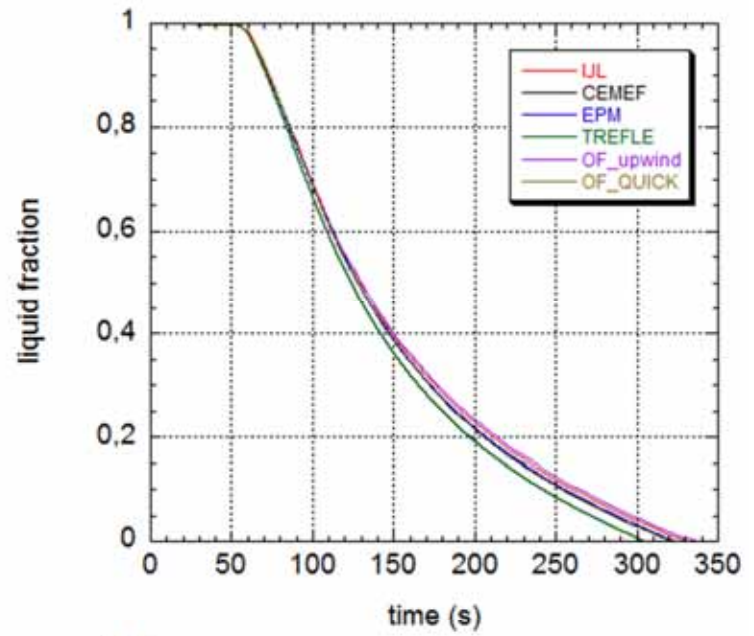
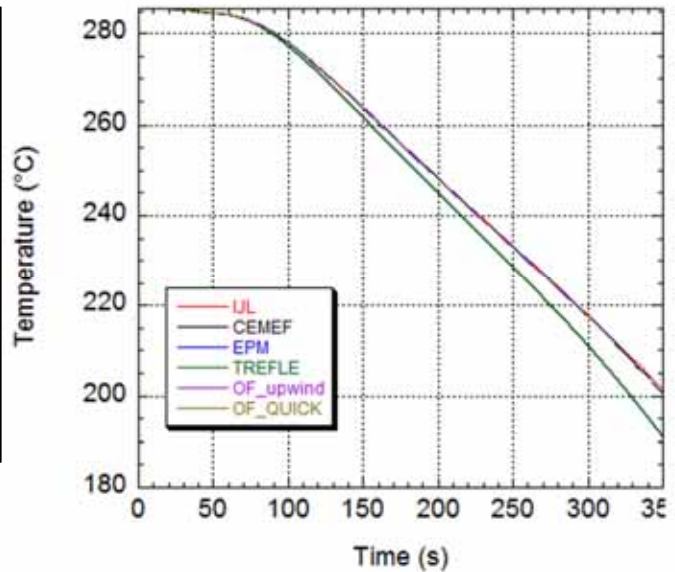
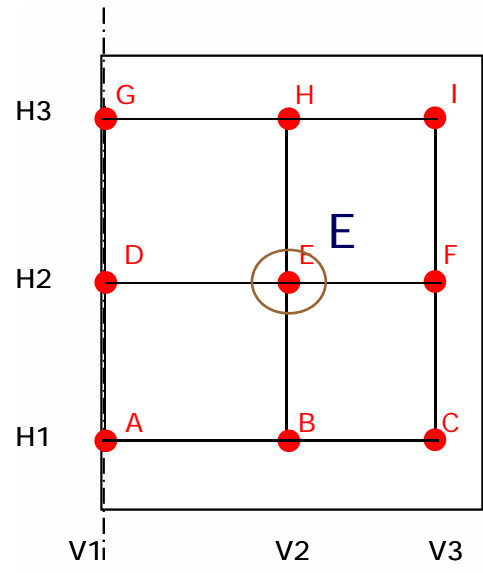


# Comparaisons SIMAP t=25s





# Evolutions temporelles T, gl, C, mod(V) au point E



# An alternative test case of numerical prediction of macrosegregation

Miha Založnik<sup>1</sup>, Gregor Kosec<sup>2</sup>

Institut Jean Lamour, Dép. SI2M - Ecole des Mines de Nancy  
Laboratory for Multiphase Processes, University of Nova Gorica, Slovenia

Journée Benchmark SFT, Paris, 15/11/2011

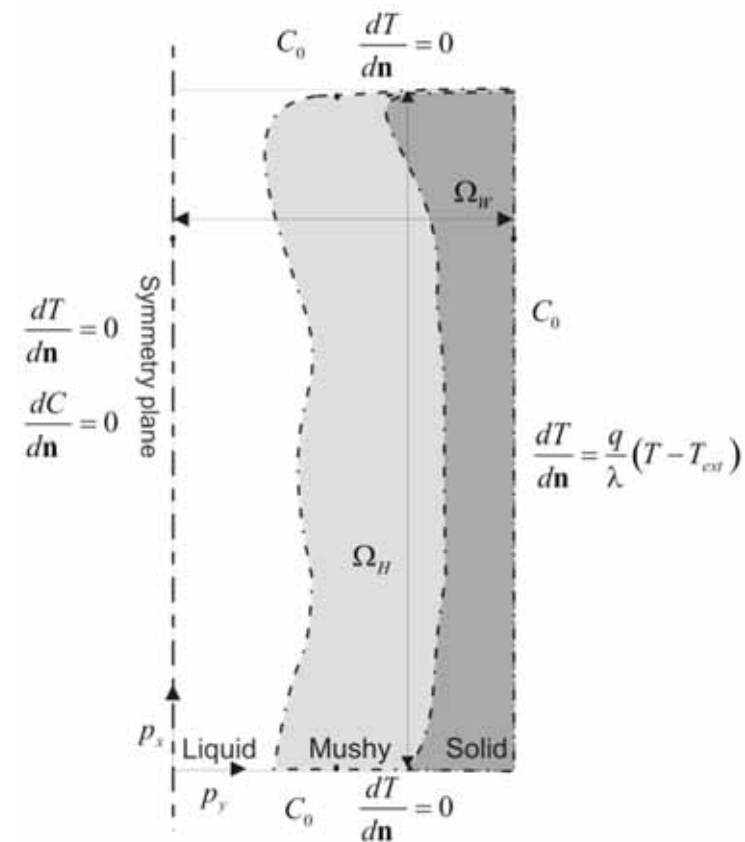


## The configuration

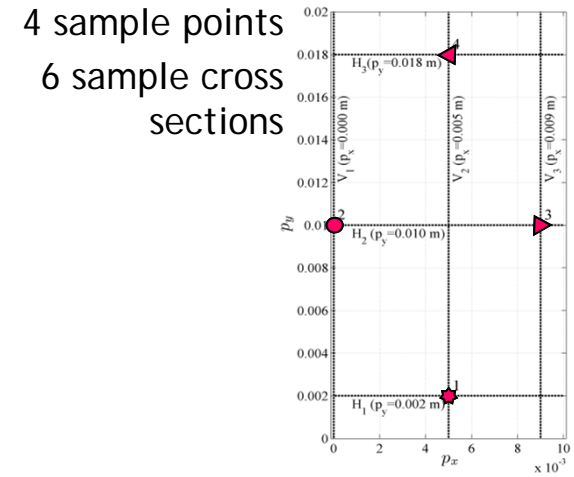
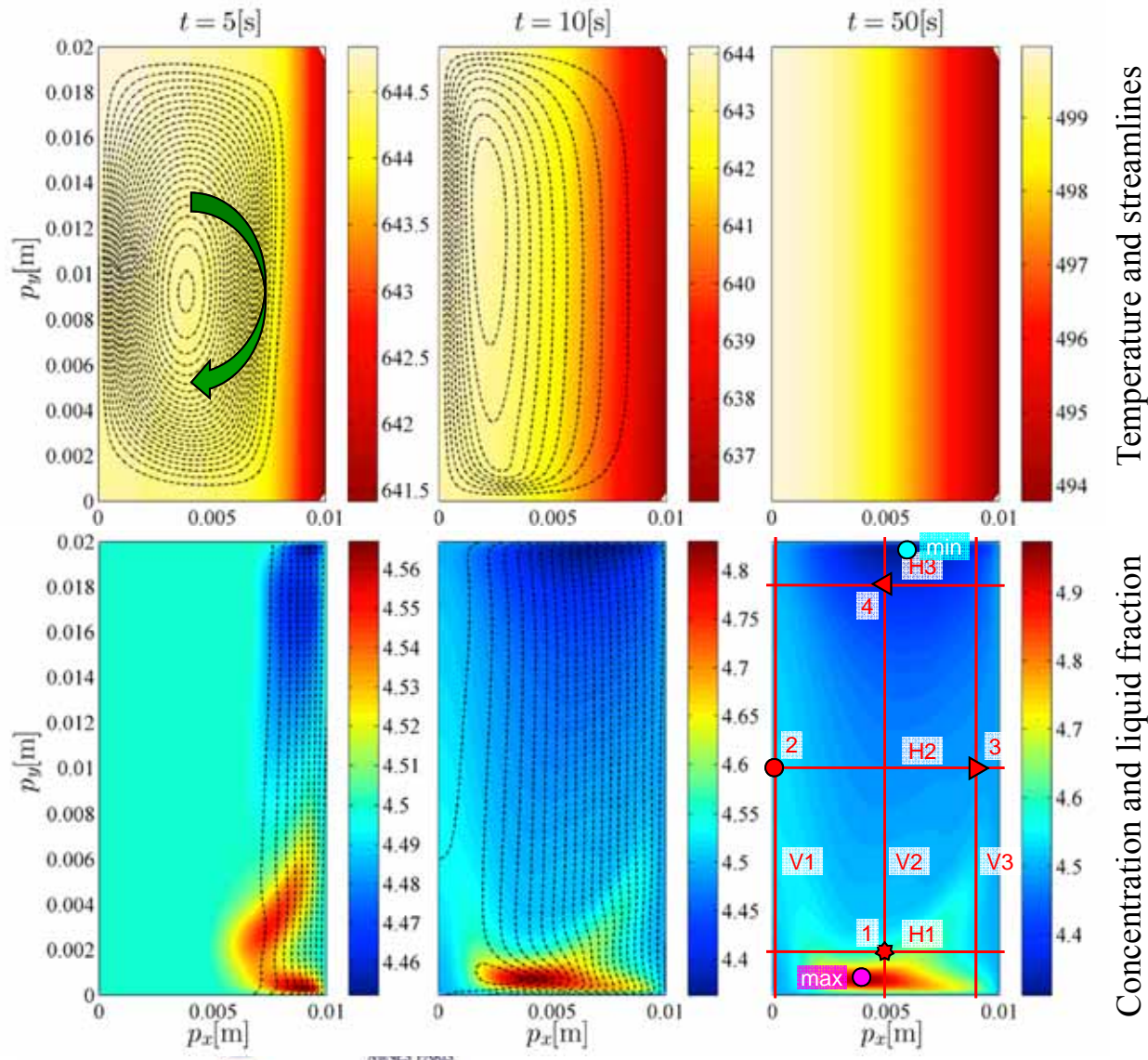
Al-4.5wt% Cu, 2x2 cm mold  
Computational domain: 1x2 cm  
Solidification time: ~50 s  
Initial temperature: 700 °C  
Liquidus temp. ( $C_0$ ): 644.565 °C  
Chill h.t.c.: 500 W/m<sup>2</sup>K  
Chill temp.: 20°C

Simpler macrosegregation map,  
mesosegregations do not develop.

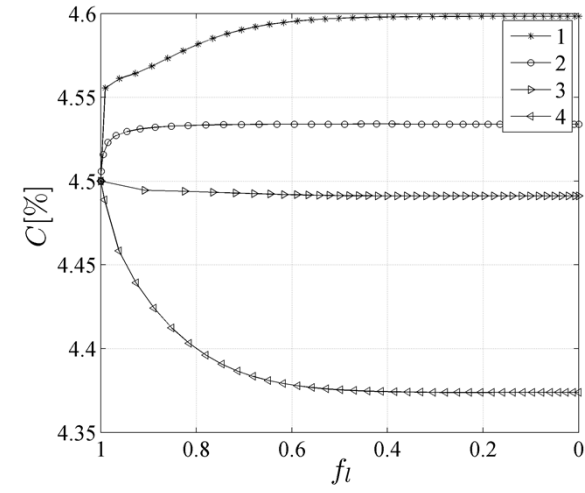
Natural convection during the initial  
transient - Ra ~ 2500.



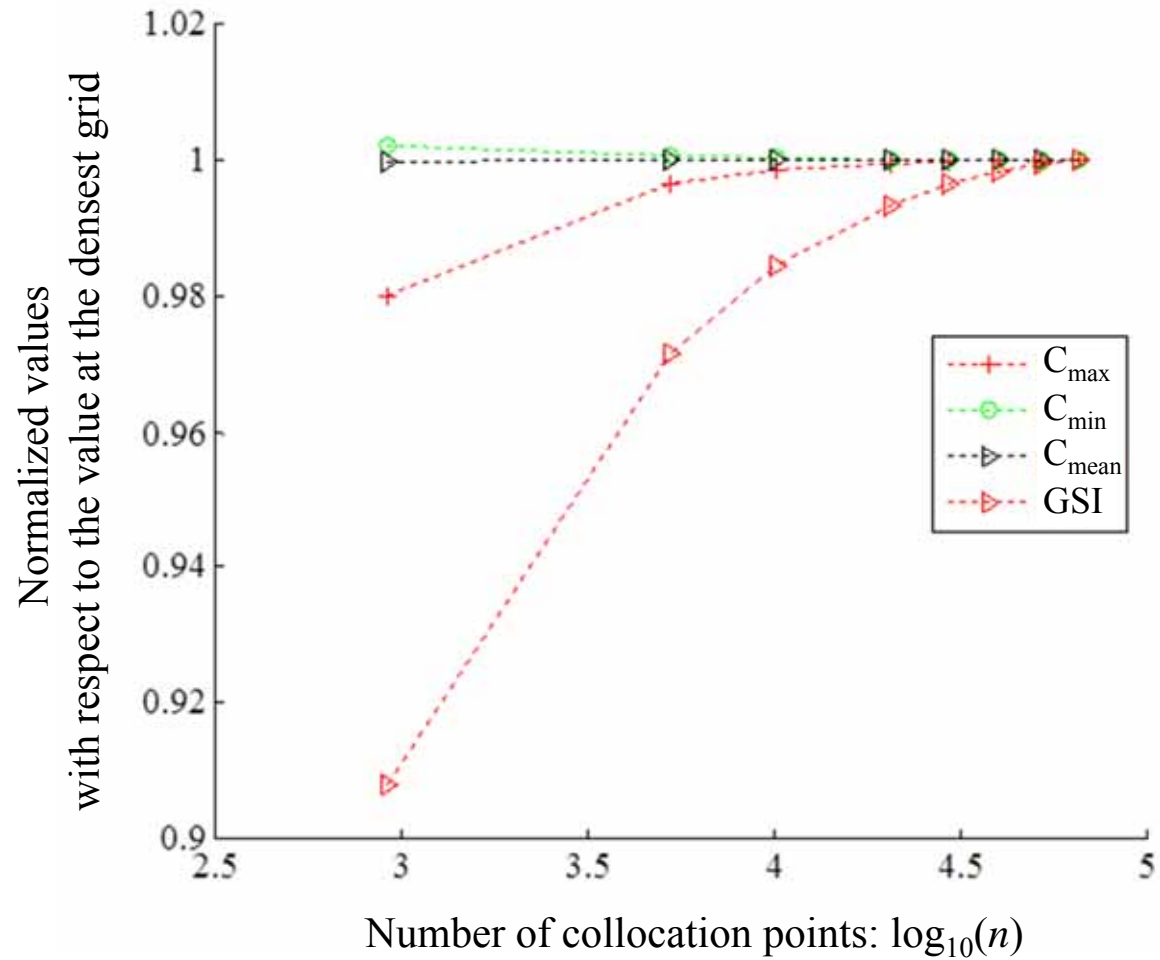
# Evolution of the solidification



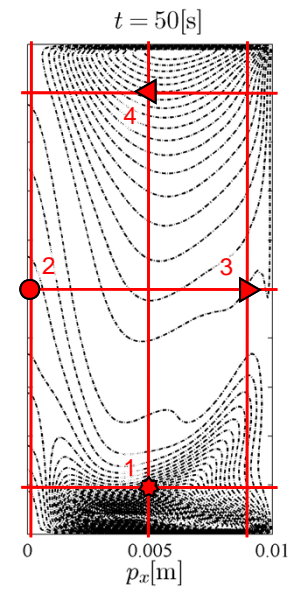
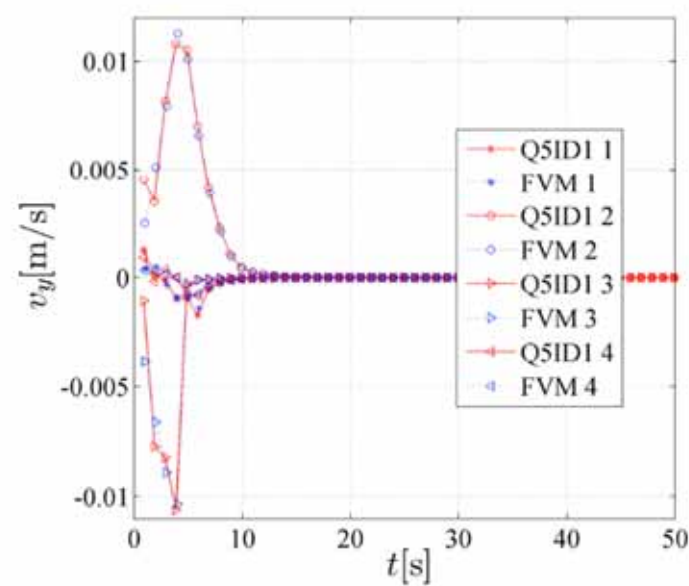
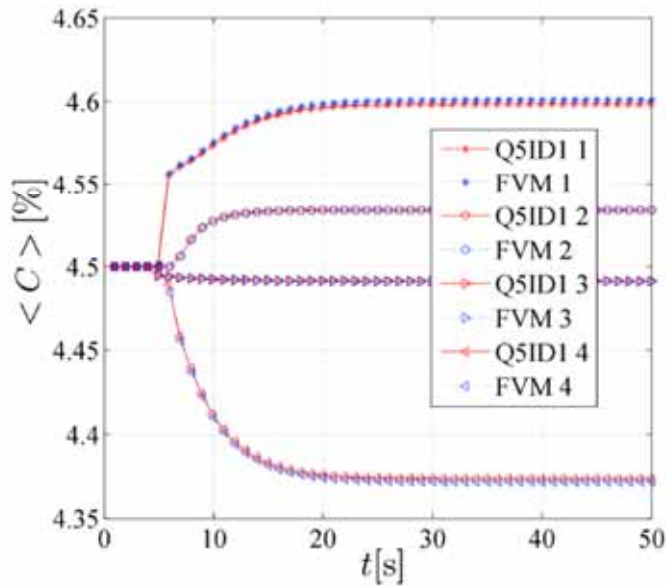
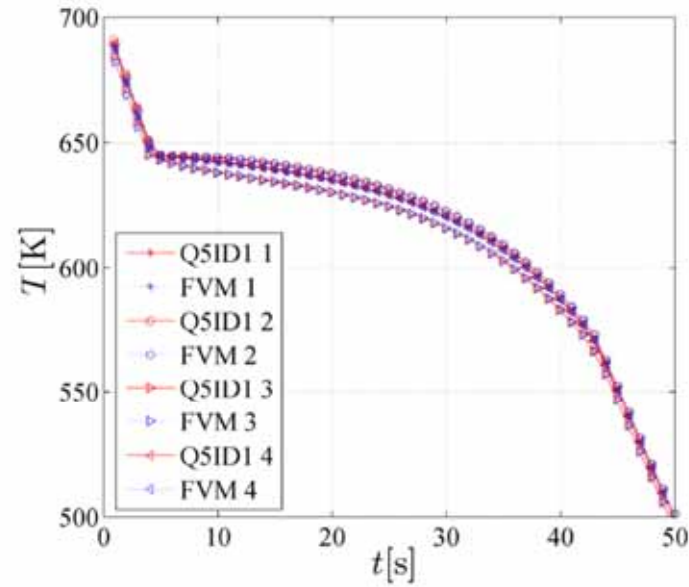
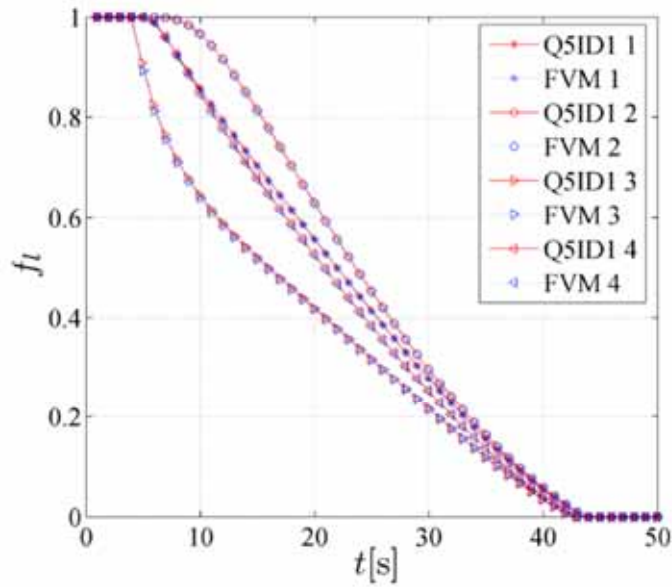
Evolution of the segregation and liquid fraction in the sample points



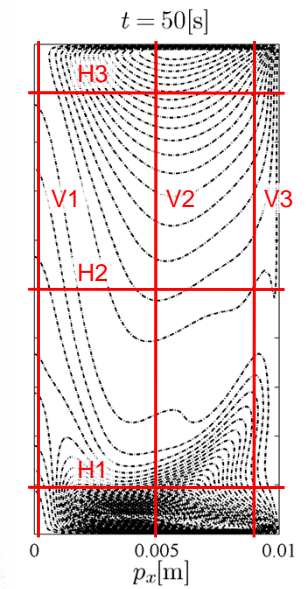
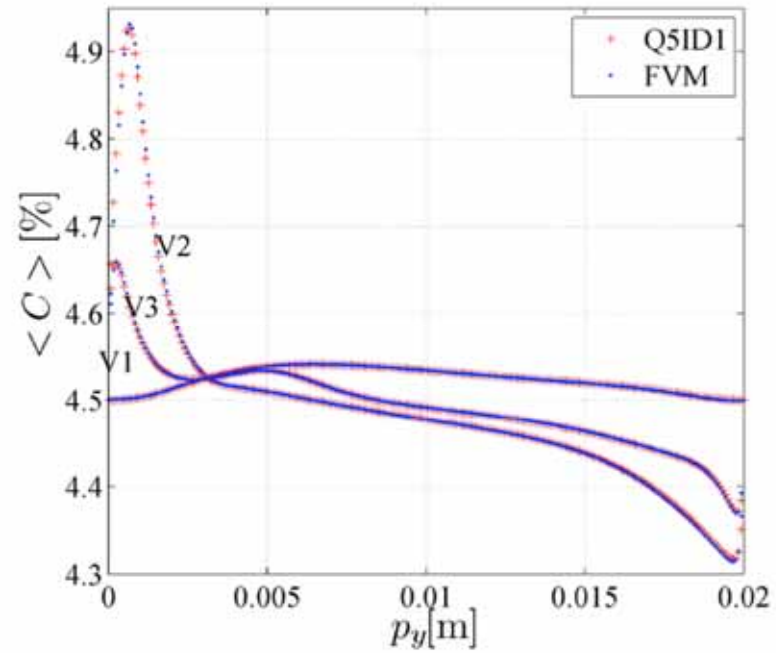
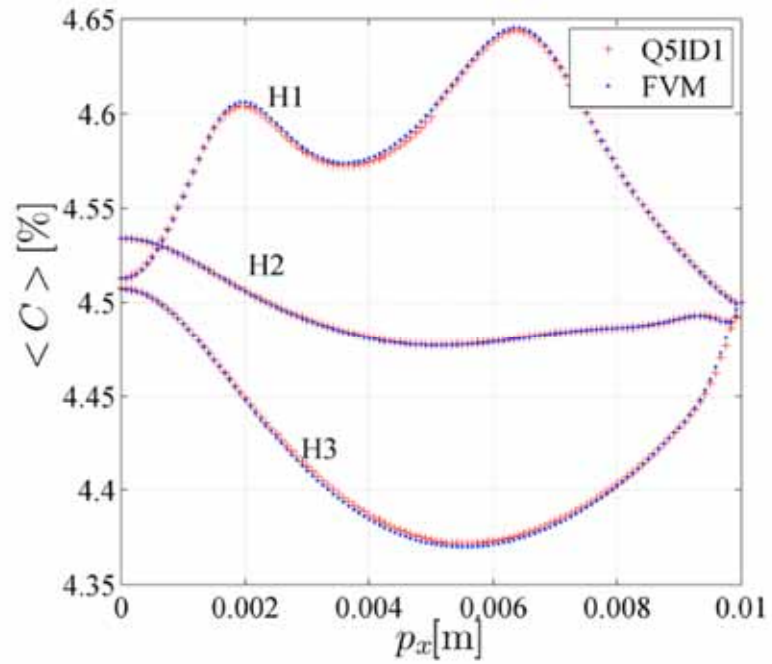
## Characterizations of grid convergence



## Comparison of the time evolutions



## Comparison of the final segregation in six cross sections



# Benchmarks sur la convection naturelle : point et poursuite

Miha Založnik

Institut Jean Lamour, Dép. SI2M

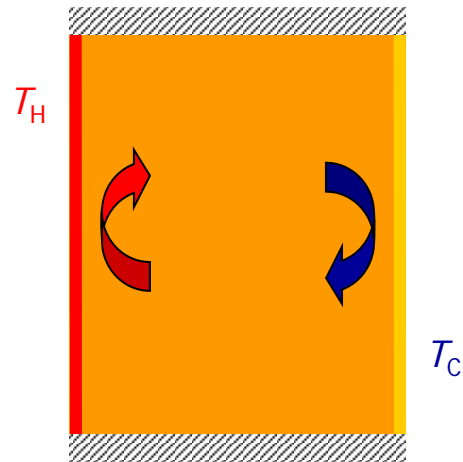
Réunion SMACS, Paris, 21 juin 2011





# Rappel

A revised case definition after exploratory test computations



Transient thermal natural convection

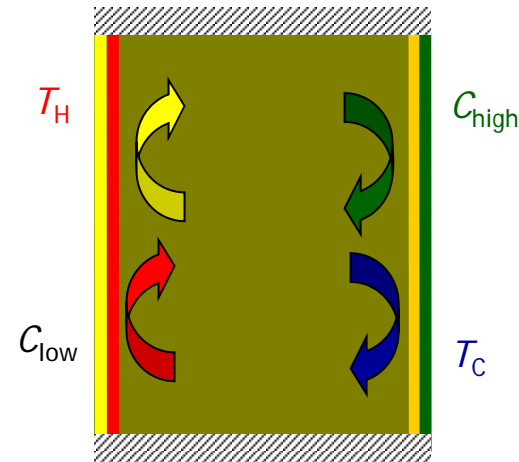
$$A = 1$$

$$Pr = 10^{-2}$$

old:  $Ra = 5 \cdot 10^5$  (chaotic)

A1:  $Ra = 10^4$   
(final steady state)

A2:  $Ra = 5 \cdot 10^4$   
(oscillatory periodic)



Transient cooperating thermosolutal natural convection

$$Pr = 10^{-2} \quad A = 1$$

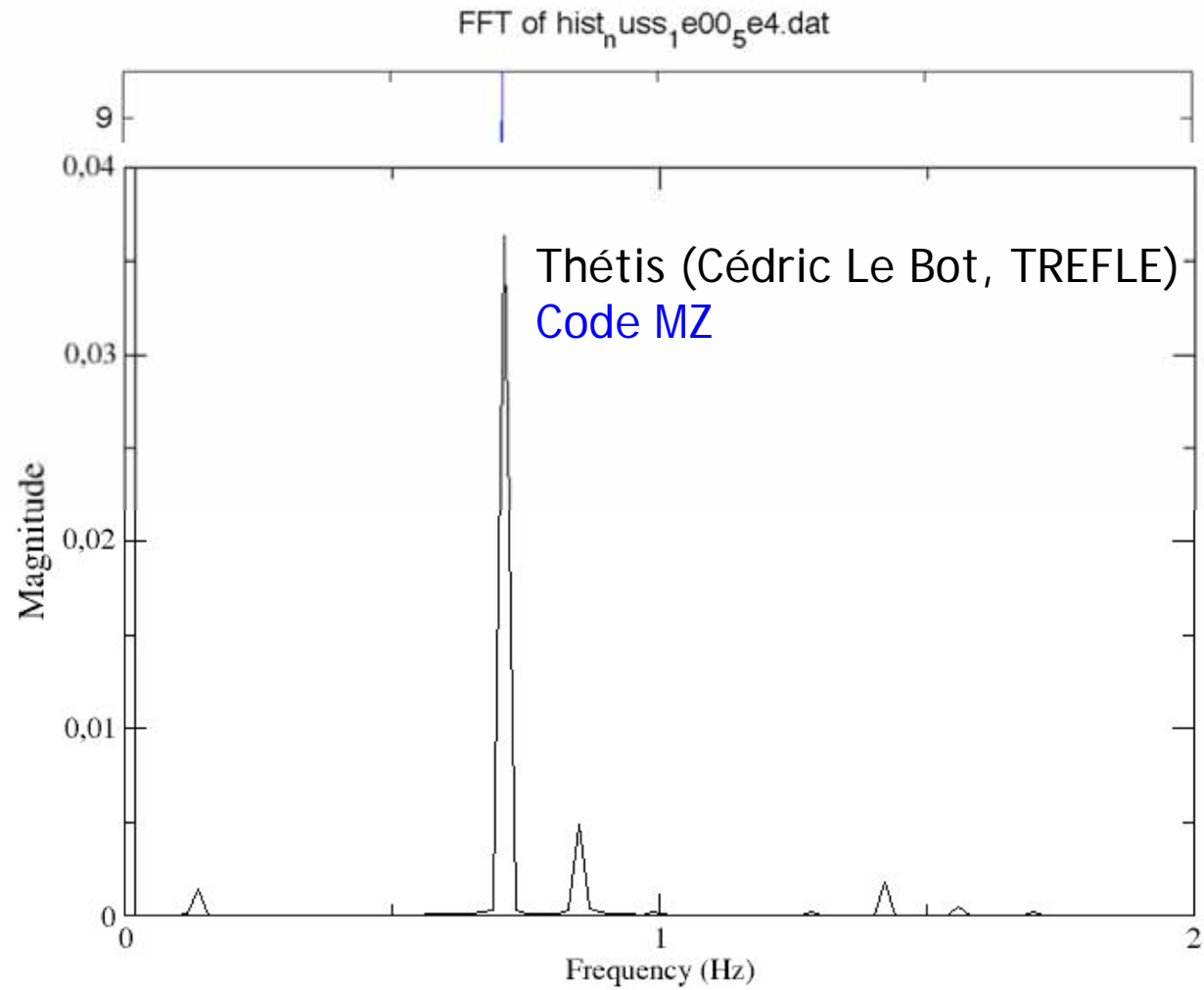
$$Le = 10^4 \quad (Sc = 10^2)$$

old:  $Ra_T = 5 \cdot 10^4 \quad N = 5 \quad (Ra_C = 2.5 \cdot 10^9)$

B1:  $Ra_T = 5 \cdot 10^3 \quad N = 5$   
(final steady state, predominantly thermal)

B2:  $Ra_T = 5 \cdot 10^3 \quad N = 30$   
(final steady state, thermosolutal structure)

## Première comparaison - cas A2



## Contributions prevues

### Contributions de l'équipe SMACS

- IJL - 2 ou 3 codes: code maison M. Založnik, Solid, OpenFoam (?)
- TREFLE - Thétis
- SIMAP - Fluent -> **partie thermique, puis thermosoluble plus tard**
- Autres ? -> **Non.**

### Contributions externes ?

- (Ben Hadid), U. Nova Gorica/IJS (G. Kosec), Freiberg (P. Nikrityuk), Access (J. Jakumeit), SMMP Leoben (Wu), CETHIL (S. Xin), IUSTI, Sintef (K. Tveito, M. M'Hamdi), Purdue (M. Krane)...

## Conclusions :

- Les résultats obtenus à partir des différents codes conduisent à des valeurs très proches en terme de macroségrégations, mais des écarts sont observés au niveau de la prédiction des canaux ségrévés ;
- Les canaux ségrévés sont beaucoup plus sensibles au maillage que la macroségrégation, la vitesse de convergence est d'un ordre plus petit que 1 en espace ;
- Les macroségrégations se développent sur un intervalle large de fraction liquide  $[0,3;1]$ , tandis que les canaux se forment aux fortes fractions liquides où des différences entre les champs de vitesse sont observées. Un benchmark convection naturelle à faible  $Pr$  et grand  $Le$  est en cours ;
- Les écarts sur la composition se forment encore à des fractions liquides inférieures à 0,8 : très forte sensibilité du Gradient(T), différences induites par l'histoire ;
- Sensibilité à l'ordre des schémas d'intégration en espace ;
- Difficulté d'arriver à une solution de référence du fait de la présence des canaux ségrévés;
- Les premières confrontations modèle/expérience sont très encourageantes, mais d'autres difficultés apparaissent (conditions aux limites).

Merci pour votre attention



LABORATOIRE INTERMETAL-CERAMIQUE  
TREFLE  
1000 0000 00 00



EPM

