## Résumé

La macroségrégation est un défaut connu dans les procédés de coulées industrielles. La genèse de ce défaut est la conséquence de l'interaction complexe entre la microségrégation ou la distribution des espèces chimiques à l'échelle de la microstructure et les mouvements des phases liquide et solides. Les hétérogéneités de concentration en solutés à l'échelle de la pièce peuvent être rédhibitoires vis-à-vis de la qualité du produit. Dans ce travail, on propose un modèle numérique pour simuler et prédire la formation des macroségrégations en cœur des pièces d'alliages multi-constitués, induites par des variations thermiques et solutales dans la phase liquide. Dans un premier temps, on considère que le métal solidifie à volume constant. Dans ce contexte, la convection thermosolutale est étudiée ainsi que son influence sur la formation des canaux ségrégés à différentes échelles de modélisation. Dans un deuxième temps, le modèle vise à prédire les macroségrégations en présence de changement de volume du métal, dont la cause principale est le retrait à la solidification, pouvant être à l'origine du phénomène de ségrégation inverse. La surface entre le métal et le gaz environnant au cours du retrait évolue pendant le retrait en fonction du chemin de solidification qui varie avec la macroségrégation. Cette évolution d'interface est suivie par la méthode Level set. Des prédictions de concentration moyenne, couplées aux bases de données thermodynamiques pour mieux prédire les chemins de solidification des alliages multi-constitués, sont analysées et comparées avec des résultats expérimentaux. Finalement, des calculs de solidification en microgravité sont présentés, simulant un essai expérimental dans le contexte du projet CCEMLCC lancé par l'Agence Spatiale Européenne. Les résultats en fin de solidification montrent un accord acceptable quant à la forme et l'élongation des échantillons solidifiées. Ces calculs sont faits avec des approximations binaire, ternaire et quaternaire d'une même nuance d'acier utilisée dans les essais en microgravité.

## Mots Clés

modélisation, solidification, ségrégation, Level Set, éléments finis, métallurgie

## **Abstract**

Macrosegregation is key defect in industrial casting processes. During solidification, redistribution at the scale of microstructure, also known as microsegregation, take place with complex interactions, in order to form one or more solid phases. These interactions between microsegregation and movements of liquid and solid phases may lead to macrosegregations. These solute heterogeneities spanning on a larger scale, may result in a bad casting quality. In this thesis, we propose a numerical model to simulate and predict macrosegregations occurring in the centre of multicomponent alloys, caused by thermal and solutal variations in the liquid phase. First, we assume that the metallic alloy solidifies with a constant volume. In this context, we study the influence of thermosolutal convection on the formation of channel segregations, at different modelling scales. The second part of this modelling work consider solidification while the metallic alloy's volume is decreasing, mainly due to overall density variation, also known as solidification shrinkage, possibly leading to the so-called inverse segregation phenomenon, appearing on the alloy's skin. In the context of solidification shrinkage, the shape of the metal's boundary with surrounding gases varies according to a constantly changing solidification path due to macrosegregation. The Level Set method is therefore used to track its evolution with time. Composition predictions, coupled with thermodynamic database mappings for more accurate multicomponent solidification paths, are analysed and compared to existing experimental setups. Finally, simulations of a reduced-gravity solidification cases are performed, mocking an experimental benchmark from the CCEMLCC project launched by the European Space Agency. The results show acceptable agreement for the final shape, compared to experimental results. These computations were performed with binary, ternary and quaternary approximations of the same steel grade which was used in reduced-gravity experiments.

## Keywords

modelling, solidification, segregation, Level Set, finite elements, metallurgy