

**Laboratoire de Tribologie
et Dynamique des Systèmes
ENISE Saint-Etienne**

**Institut Jean Le Rond d'Alembert
Sorbonne Université Paris**

**Centre de Recherches
Maizières-les-Metz**

Proposition de sujet de thèse

**MODELISATION ET SIMULATION NUMERIQUE DE TRAITEMENTS PROVOQUANT L'OXYDATION
INTERNE DES ACIERS**

Thèse CIFRE LTDS/ENISE - IJLRDA/Sorbonne Université - ArcelorMittal

Directeurs de thèse

J.B. Leblond, Professeur, Sorbonne Université, Faculté des Sciences (anciennement Université Pierre et Marie Curie)

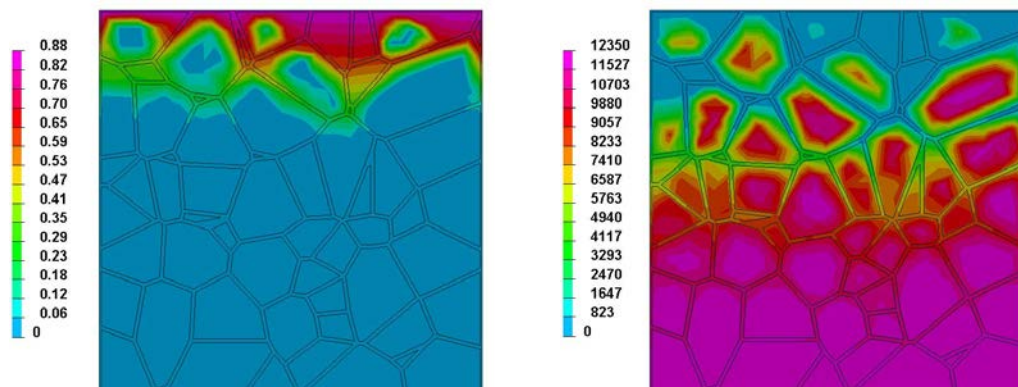
J.M. Bergheau, Professeur, Université de Lyon, Ecole Nationale d'Ingénieurs de Saint-Etienne

Encadrant scientifiques ArcelorMittal

Didier Huin, Florence Bertrand, Ingénieurs

ArcelorMittal a entrepris depuis un certain nombre d'années, en collaboration avec J.B. Leblond et J.M. Bergheau, de simuler numériquement certains traitements métallurgiques des aciers qui en provoquent l'oxydation interne (combinaison, en profondeur, d'atomes d'oxygène en provenance de la surface avec certains atomes d'éléments d'alliage, conduisant à la formation de précipités d'oxydes). Les phénomènes, qui impliquent des effets fortement couplés de diffusion d'éléments chimiques et de réactions entre ces éléments, sont décrits par des équations différentielles aux dérivées partielles très non-linéaires, dont la résolution numérique pose des difficultés spécifiques et considérables.

Les travaux effectués, qui ne semblent pas avoir d'équivalents dans le monde, ont permis de résoudre beaucoup de difficultés et de résoudre des problèmes d'intérêt pratique considérable. La figure ci-dessous illustre par exemple la diffusion de O et Mn, couplée avec la précipitation de MnO, dans une plaque d'acier dont la surface est au contact avec une atmosphère externe source d'oxygène. La simulation tient compte de la diffusion différenciée entre grains et joints de grains, où les effets de court-circuit (dus aux défauts du réseau) engendrent une diffusion très accélérée.



Simulation de la diffusion intra- et inter-granulaire de O et Mn et de la précipitation de MnO dans une plaque – A gauche : concentration d'oxygène – A droite : concentration de manganèse

A gauche, on observe la pénétration progressive de l'oxygène dans la plaque depuis la surface située en haut, due à la diffusion mais ralentie par la précipitation qui consomme certains atomes. A droite, on observe au contraire la migration du manganèse vers la surface, de cinétique gouvernée par la diffusion, mais provoquée par la précipitation près de cette surface.

Le but de la thèse proposée est à la fois d'appliquer les outils mis au point à l'étude de nouveaux problèmes d'intérêt concret, et d'en poursuivre le développement sur les plans physique et numérique.

Dans un premier temps, on s'intéressera au problème de la transition de *l'oxydation interne* vers *l'oxydation externe*, dite ici *transition interne-externe* pour abrégé. On parle d'oxydation externe lorsque la précipitation d'oxydes en surface est suffisamment importante pour bloquer complètement l'entrée par diffusion des atomes d'oxygène dans la plaque. Dans les années récentes, une étude entièrement analytique dans le cas particulier du recuit isotherme d'un alliage binaire (rapport constant entre coefficients de diffusion de l'oxygène et de l'élément d'alliage, formation d'un seul type d'oxyde présentant un produit de solubilité extrêmement faible), a permis de prédire la teneur « critique » en élément d'alliage, au-dessus de laquelle les équations régissant l'oxydation interne n'ont plus de solution, et l'oxydation ne peut par conséquent être qu'externe. Elle a été complétée par une approche semi-analytique, seulement applicable à des conditions isothermes et avec un seul élément d'alliage oxydable, pour décrire des situations correspondant à des produits de solubilité d'oxyde arbitraires. Cette prédiction des conditions régissant la transition interne/externe, d'un intérêt industriel considérable, reste cependant limitée à ces cas très particuliers. On envisage donc de l'étendre, par voie numérique, à des cas plus complexes, comme celui par exemple d'un produit de solubilité de l'oxyde arbitraire, lors de cycles de recuit réels incluant une étape de chauffe. Cette étude préliminaire permettra au (à la) thésard(e) de se familiariser avec les aspects physiques et chimiques du problème, d'en étudier la modélisation, de comprendre les algorithmes de résolution numériques associés et d'en saisir les difficultés.

L'essentiel du travail de thèse sera ensuite effectué dans les second et troisième volets. Dans le second, on complètera le modèle, actuellement fondé sur l'hypothèse simplificatrice d'un équilibre thermodynamique local instantané entre les différentes phases en présence, en introduisant la possibilité d'une *cinétique de précipitation*, décrivant une marche différée vers l'équilibre thermodynamique. On s'inspirera à cet effet de modèles proposés dans la littérature sur des bases physiques :

- on reprendra tout d'abord une approche initiée il y a quelques années, consistant à décrire la croissance de germes d'oxyde préexistants à la surface du métal, en prenant en compte l'effet de l'énergie d'interface entre germes et matrice métallique,
- on envisagera ensuite des approches plus complètes incluant des étapes de germination, croissance, voire coalescence des germes précipités, qui semblent plus à même d'expliquer la morphologie des oxydes observés après des cycles de recuit.

En parallèle, le (la) thésard(e) aura à mener des approches expérimentales, dans des conditions dédiées, pour étayer ses hypothèses et valider ses résultats de modélisation. Le but ultime des améliorations apportées sera de permettre la prédiction de la formation en surface de précipités « couvrants » (bloquant la diffusion de l'oxygène vers l'intérieur) ou non, suivant la valeur de leur énergie de surface. L'abandon de l'hypothèse de l'équilibre thermodynamique local instantané au profit d'hypothèses plus réalistes permettra peut-être également de résoudre certains paradoxes précédemment rencontrés dans l'étude de la transition interne/externe.

Le troisième volet consistera à modéliser de manière plus réaliste les limitations cinétiques liées aux transferts dans l'atmosphère de recuit, voire aux réactions chimiques à la surface du métal. Elles sont actuellement négligées puisque la concentration en oxygène en surface est imposée rigidement en équilibre avec la composition de l'atmosphère loin de la surface. Très récemment, un effet cinétique dans l'atmosphère a été testé par l'introduction d'un « coefficient d'échange » heuristique reliant le flux d'entrée de cet élément à la différence de ses activités dans l'atmosphère et à la surface du métal. En particulier, la modélisation de l'oxydation sélective de l'élément « carbone », en compétition avec les autres éléments d'alliage pour la consommation de l'oxygène provenant de l'atmosphère de recuit, et dont le produit de réaction – gazeux - est fatalement localisé à la surface du métal, nécessite une prise en compte des cinétiques de transfert dans l'atmosphère de recuit, voire des cinétiques des diverses réactions chimiques qui ont lieu sur la surface. Une approche expérimentale sera mise en œuvre dans le travail de thèse de façon à évaluer l'effet, sur les phénomènes d'oxydation sélective, des conditions de renouvellement de l'atmosphère au contact de la surface du métal, en jouant sur les vitesses d'injection de gaz. De même, la réalisation de recuits sur des nuances d'acier de même composition, sauf en carbone, permettra d'évaluer l'effet de la production de gaz réducteur CO, consécutive à la décarburation (oxydation sélective du carbone), sur le pouvoir oxydant de l'atmosphère de recuit. Des applications à la simulation de processus industriels réels seront finalement envisagées.

Contacts :

J.M. Bergheau	jean-michel.bergheau@enise.fr
F. Bertrand	florence.bertrand@arcelormittal.com
D. Huin	didier.huin@arcelormittal.com
J.B. Leblond	jbl@lmm.jussieu.fr