



Institut Jean Lamour
PENSER LES MATÉRIAUX DE DEMAIN

Mise au Point de la Carbonitruration Gazeuse des Alliages 16NiCrMo13 et 23MnCrMo5 : Modélisation et Procédés

Walter Dal'Maz Silva
28 avril 2015

Directeur de Thèse
Thierry Belmonte

- 1 Introduction
- 2 Étude Bibliographique
- 3 Résultats Expérimentaux
- 4 Modélisation du Procédé
- 5 Prochaines Démarches
- 6 Publications et Présentations



Institut Jean Lamour

PENSER LES MATÉRIAUX DE DEMAIN

Introduction

Défi

Développement de matériaux d'ingénierie combinant ténacité et résistance à l'usure et à la fatigue mécanique.

Défi

Développement de matériaux d'ingénierie combinant ténacité et résistance à l'usure et à la fatigue mécanique.

But

Contribuer à la compréhension des phénomènes régissant la carbonitruration en phase austénitique à partir d'hydrocarbures et d'ammoniac des aciers faiblement alliés.

Introduction

Défi

Développement de matériaux d'ingénierie combinant ténacité et résistance à l'usure et à la fatigue mécanique.

But

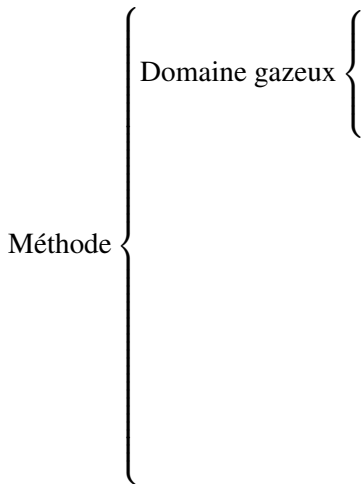
Contribuer à la compréhension des phénomènes régissant la carbonituration en phase austénitique à partir d'hydrocarbures et d'ammoniac des aciers faiblement alliés.

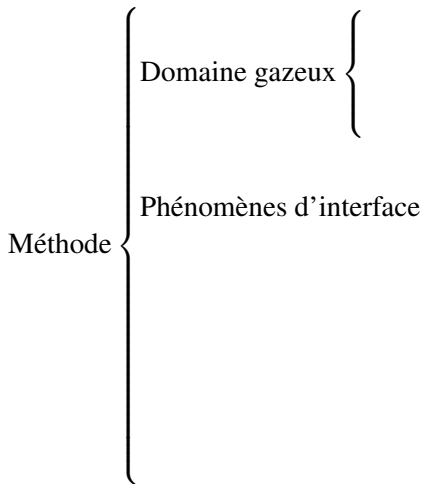
Alliages

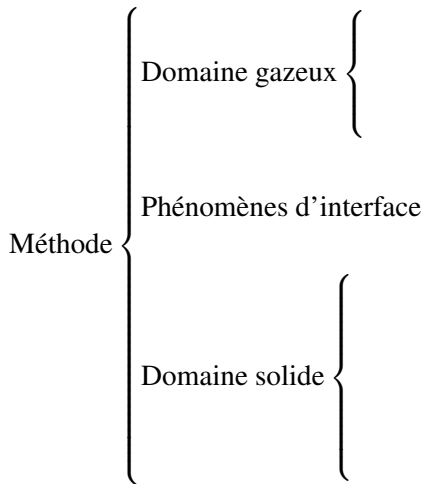
- ▶ 16NiCrMo13 : aéronautique.
- ▶ 23MnCrMo5 : automobile.

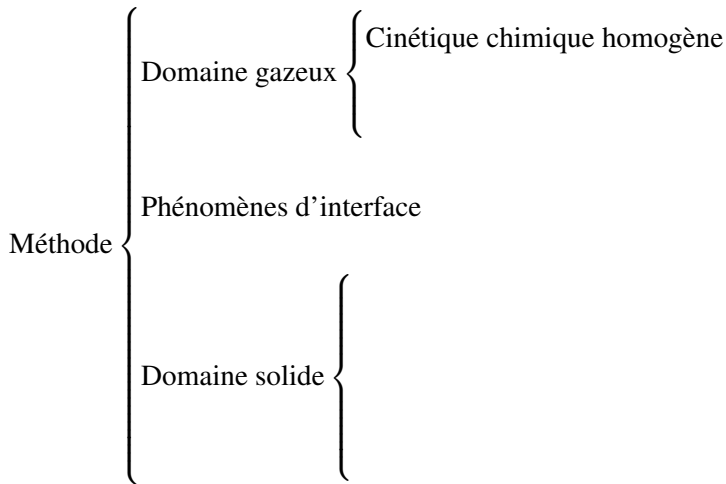
Méthode

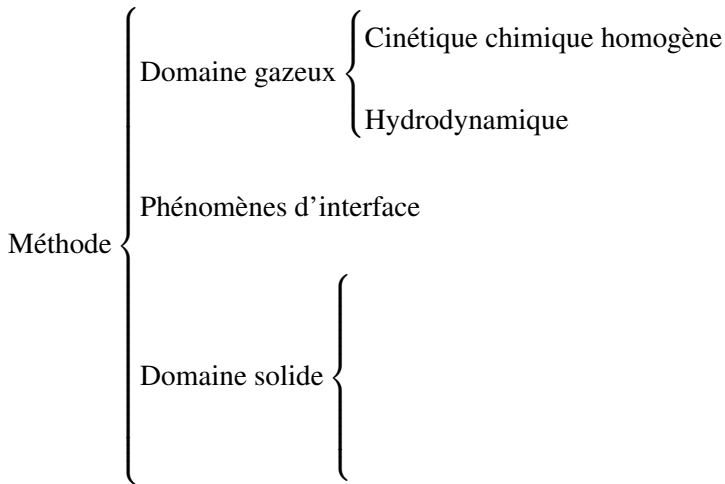


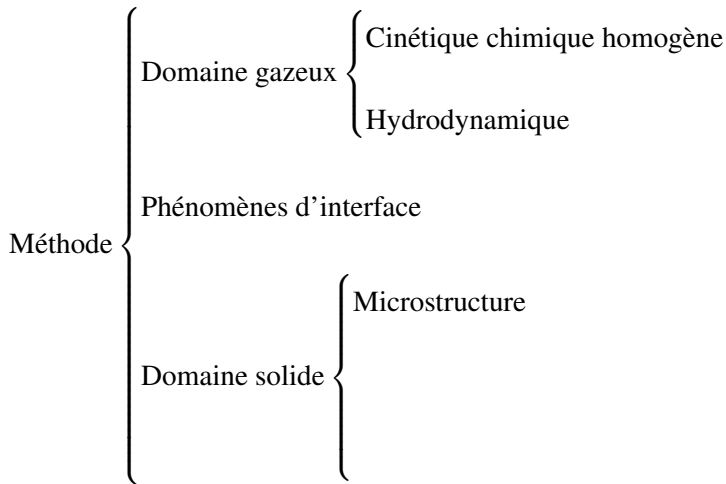


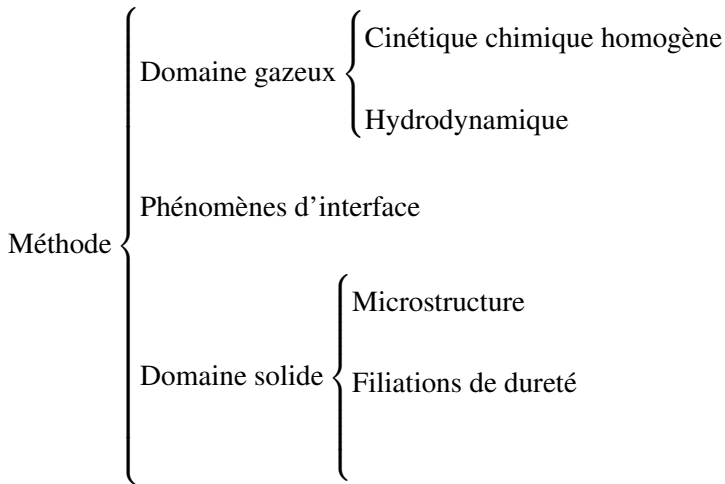


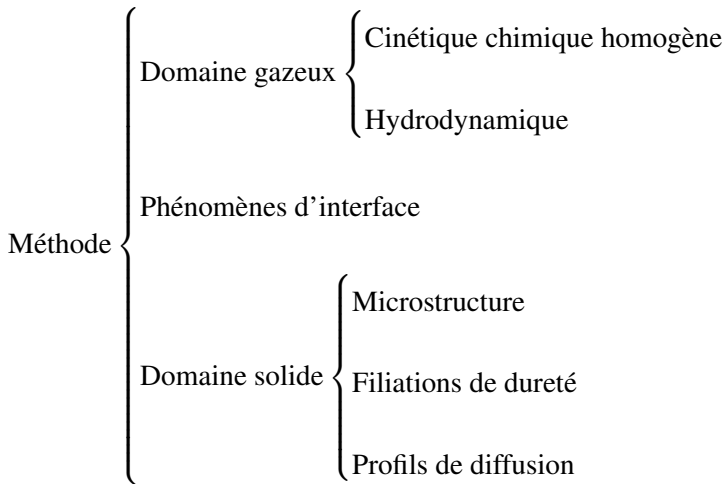












Domaines de Recherche

Métallurgie

Processus Gaz et Surface

Métallurgie

Processus Gaz et Surface

Rôles du C et N dans le matériau.

Domaines de Recherche

Métallurgie

Rôles du C et N dans le matériau.

Processus Gaz et Surface

Comportement cinétique des atmosphères.

Métallurgie

Rôles du C et N dans le matériau.

Cémentation ($\text{CO} + \text{H}_2$) et nitruration
($\text{NH}_3 + \text{N}_2 + \text{H}_2$) – $\approx 1173 \text{ K}$

Processus Gaz et Surface

Comportement cinétique des
atmosphères.

Domaines de Recherche

Métallurgie

Rôles du C et N dans le matériau.

Cémentation ($\text{CO} + \text{H}_2$) et nitruration
($\text{NH}_3 + \text{N}_2 + \text{H}_2$) – $\approx 1173 \text{ K}$

Processus Gaz et Surface

Comportement cinétique des
atmosphères.

C_2H_2 et NH_3 – $T=800\text{-}1200 \text{ K}$ et $P \approx 2026 \text{ Pa}$.

Métallurgie

Rôles du C et N dans le matériau.

Cémentation ($\text{CO} + \text{H}_2$) et nitruration
($\text{NH}_3 + \text{N}_2 + \text{H}_2$) – $\approx 1173 \text{ K}$

Microstructure, dureté, profils de
diffusion, analyse des précipités

Processus Gaz et Surface

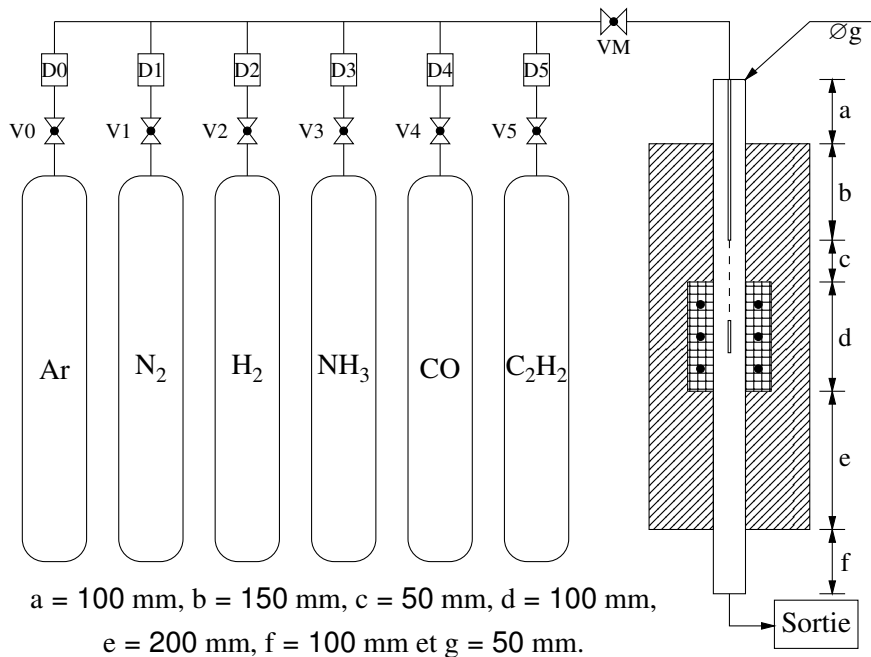
Comportement cinétique des
atmosphères.

C_2H_2 et NH_3 – $T=800\text{-}1200 \text{ K}$ et $P \approx 2026 \text{ Pa}$.

| Métallurgie | Processus Gaz et Surface |
|--|--|
| Rôles du C et N dans le matériau. | Comportement cinétique des atmosphères. |
| Cémentation ($\text{CO} + \text{H}_2$) et nitruration ($\text{NH}_3 + \text{N}_2 + \text{H}_2$) – $\approx 1173 \text{ K}$ | C_2H_2 et NH_3 – $T=800\text{-}1200 \text{ K}$ et $P \approx 2026 \text{ Pa}$. |
| Microstructure, dureté, profils de diffusion, analyse des précipités | Chromatographie et spectroscopie des produits issus de la pyrolyse des précurseurs |

| Métallurgie | Processus Gaz et Surface |
|--|--|
| Rôles du C et N dans le matériau. | Comportement cinétique des atmosphères. |
| Cémentation ($\text{CO} + \text{H}_2$) et nitruration ($\text{NH}_3 + \text{N}_2 + \text{H}_2$) – $\approx 1173 \text{ K}$ | C_2H_2 et NH_3 – $T=800\text{-}1200 \text{ K}$ et $P \approx 2026 \text{ Pa}$. |
| Microstructure, dureté, profils de diffusion, analyse des précipités | Chromatographie et spectroscopie des produits issus de la pyrolyse des précurseurs |
| <i>Thermocalc³, DICTRA^{3,4}</i> | |

| Métallurgie | Processus Gaz et Surface |
|--|--|
| Rôles du C et N dans le matériau. | Comportement cinétique des atmosphères. |
| Cémentation ($\text{CO} + \text{H}_2$) et nitruration ($\text{NH}_3 + \text{N}_2 + \text{H}_2$) – $\approx 1173 \text{ K}$ | C_2H_2 et NH_3 – $T=800\text{-}1200 \text{ K}$ et $P \approx 2026 \text{ Pa}$. |
| Microstructure, dureté, profils de diffusion, analyse des précipités | Chromatographie et spectroscopie des produits issus de la pyrolyse des précurseurs |
| <i>Thermocalc</i> ³ , <i>Dictra</i> ^{3,4} | <i>Fluent</i> ^{1,2} et code développé pour le traitement du problème |





Institut Jean Lamour

PENSER LES MATÉRIAUX DE DEMAIN

Étude Bibliographique

Sujet de Recherche

Le comportement cinétique chimique de l'atmosphère détermine la méthode de contrôle utilisée pour la mise au point d'un procédé thermochimique.

Sujet de Recherche

Le comportement cinétique chimique de l'atmosphère détermine la méthode de contrôle utilisée pour la mise au point d'un procédé thermochimique.

Caractérisation des Atmosphères⁷⁻⁹

Comportement {

Sujet de Recherche

Le comportement cinétique chimique de l'atmosphère détermine la méthode de contrôle utilisée pour la mise au point d'un procédé thermochimique.

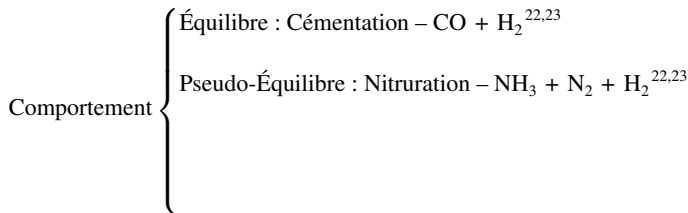
Caractérisation des Atmosphères⁷⁻⁹

Comportement { Équilibre : Cémentation – $\text{CO} + \text{H}_2$ ^{22,23}

Sujet de Recherche

Le comportement cinétique chimique de l'atmosphère détermine la méthode de contrôle utilisée pour la mise au point d'un procédé thermochimique.

Caractérisation des Atmosphères⁷⁻⁹



Sujet de Recherche

Le comportement cinétique chimique de l'atmosphère détermine la méthode de contrôle utilisée pour la mise au point d'un procédé thermochimique.

Caractérisation des Atmosphères⁷⁻⁹

$$\text{Comportement} \left\{ \begin{array}{l} \text{Équilibre : Cémentation} - \text{CO} + \text{H}_2^{22,23} \\ \text{Pseudo-Équilibre : Nitruration} - \text{NH}_3 + \text{N}_2 + \text{H}_2^{22,23} \\ \text{Hors-Équilibre} \left\{ \begin{array}{l} \text{Cémentation} - \text{Hydrocarbures}^{11,14,25} \\ \text{Nitruration à basse pression} - \text{NH}_3 \end{array} \right. \end{array} \right.$$

- Implications de l'absence d'équilibre :

- ▶ Implications de l'absence d'équilibre :
 - i. soit consommation excessive de gaz pour obtenir une atmosphère saturée et avec forte pollution du four

- ▶ Implications de l'absence d'équilibre :
 - i. soit consommation excessive de gaz pour obtenir une atmosphère saturée et avec forte pollution du four
 - ii. soit le besoin de simulation couplée de l'hydrodynamique du four et cinétique chimique des précurseurs.

- ▶ Implications de l'absence d'équilibre :
 - i. soit consommation excessive de gaz pour obtenir une atmosphère saturée et avec forte pollution du four
 - ii. soit le besoin de simulation couplée de l'hydrodynamique du four et cinétique chimique des précurseurs.
- ▶ Le nombre important d'espèces qui doit être pris en compte empêche une telle simulation pour géométries complexes dans un temps raisonnable^{5,11}.

- ▶ Implications de l'absence d'équilibre :
 - i. soit consommation excessive de gaz pour obtenir une atmosphère saturée et avec forte pollution du four
 - ii. soit le besoin de simulation couplée de l'hydrodynamique du four et cinétique chimique des précurseurs.
- ▶ Le nombre important d'espèces qui doit être pris en compte empêche une telle simulation pour géométries complexes dans un temps raisonnable^{5,11}.
- ▶ Plusieurs méthodes de simplification du problème chimique sont disponibles^{5,16,20}.

- Méthode de simplification adoptée :

DRG – « Graphe Relationnel Orienté¹⁶ ».

- ▶ Méthode de simplification adoptée :

DRG – « Graphe Relationnel Orienté¹⁶ ».

- ▶ Mécanisme pour la pyrolyse de l'acétylène :

Norinaga *et collab.*^{17,18} – 241 espèces et 903 réactions.

- ▶ Méthode de simplification adoptée :

DRG – « Graphe Relationnel Orienté¹⁶ ».

- ▶ Mécanisme pour la pyrolyse de l'acétylène :

Norinaga *et collab.*^{17,18} – 241 espèces et 903 réactions.

- ▶ Mécanisme pour la pyrolyse de l'ammoniac :

Dirtu *et collab.*⁶ – 11 espèces et 21 réactions.



Institut Jean Lamour

PENSER LES MATÉRIAUX DE DEMAIN

Résultats Expérimentaux



Institut Jean Lamour

PENSER LES MATÉRIAUX DE DEMAIN

Résultats Expérimentaux

Réponse Métallurgique des Alliages Étudiés

- ▶ Microanalyses chimiques pour les profils de C et N.

- ▶ Microanalyses chimiques pour les profils de C et N.
- ▶ Simulation de l'azote résiduel en solution solide à l'aide de *Thermocalc*³.

- ▶ Microanalyses chimiques pour les profils de C et N.
- ▶ Simulation de l'azote résiduel en solution solide à l'aide de *Thermocalc*³.
- ▶ Modèle de durcissement par trempe : Norstrom^{15,19}

$$H \propto \sqrt{x_i}.$$

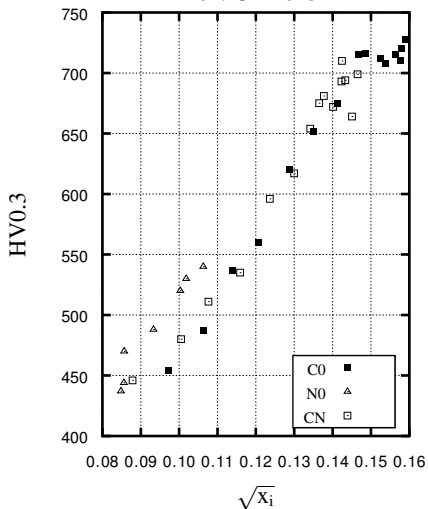
- ▶ Microanalyses chimiques pour les profils de C et N.
- ▶ Simulation de l'azote résiduel en solution solide à l'aide de *Thermocalc*³.
- ▶ Modèle de durcissement par trempe : Norstrom^{15,19}

$$H \propto \sqrt{x_i}.$$

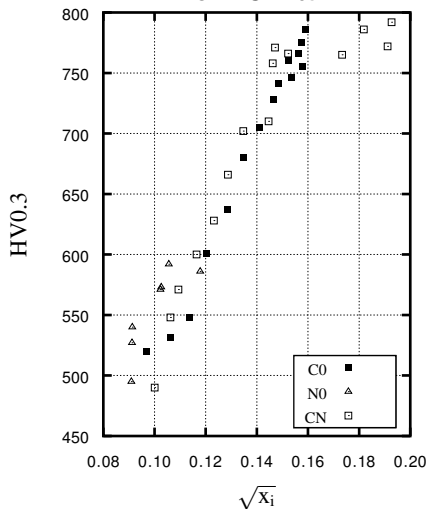
- ▶ Plateau de durcissement pour les deux alliages.

Réponses Métallurgiques Modèle de Norstrom

16NiCrMo13



23MnCrMo5



16NiCrMo13

23MnCrMo5

Filiations de dureté similaires ont été obtenues pour la carbonitruration et la cémentation.

16NiCrMo13

23MnCrMo5

Filiations de dureté similaires ont été obtenues pour la carbonitruration et la cémentation.

16NiCrMo13 Gain en dureté à 0,2 mm : de l'ordre de 150 HV.

23MnCrMo5

Filiations de dureté similaires ont été obtenues pour la carbonitruration et la cémentation.

16NiCrMo13 Gain en dureté à 0,2 mm : de l'ordre de 150 HV.

Précipitation secondaire pendant le revenu de l'alliage nitruré.

23MnCrMo5

Filiations de dureté similaires ont été obtenues pour la carbonituration et la cémentation.

16NiCrMo13 Gain en dureté à 0,2 mm : de l'ordre de 150 HV.

Précipitation secondaire pendant le revenu de l'alliage nitruré.

23MnCrMo5 Pour une teneur élevée d'azote cet alliage a présenté un durcissement supérieur lors de la carbonituration par rapport à la cémentation.

Filiations de dureté similaires ont été obtenues pour la carbonituration et la cémentation.

16NiCrMo13 Gain en dureté à 0,2 mm : de l'ordre de 150 HV.

Précipitation secondaire pendant le revenu de l'alliage nitruré.

23MnCrMo5 Pour une teneur élevée d'azote cet alliage a présenté un durcissement supérieur lors de la carbonituration par rapport à la cémentation.

Gain en dureté à 0,2 mm : ≈ 150 HV (cémentation) et ≈ 220 HV (carbonituration).



Institut Jean Lamour

PENSER LES MATÉRIAUX DE DEMAIN

Résultats Expérimentaux

Caractérisation des Atmosphères Employées

- Faibles nombres de Reynolds ($Re \approx 10$) : laminaire.

- ▶ Faibles nombres de Reynolds ($Re \approx 10$) : laminaire.
- ▶ Mesure de la distribution de temps de séjour : détecteur FID.

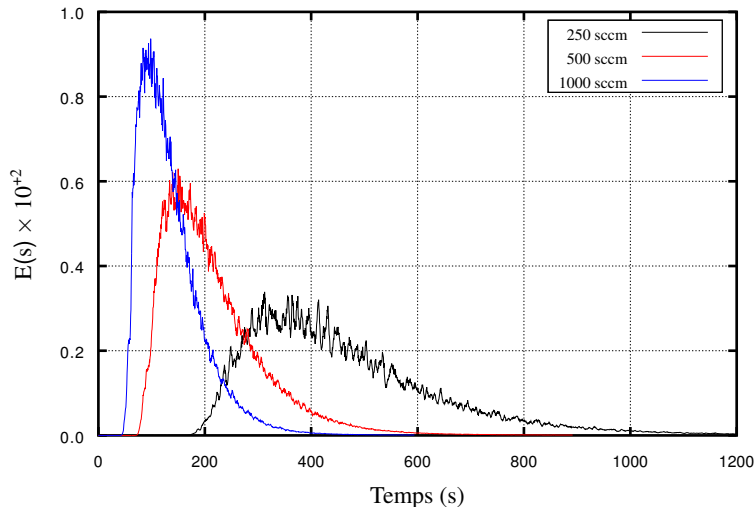
- ▶ Faibles nombres de Reynolds ($Re \approx 10$) : laminaire.
- ▶ Mesure de la distribution de temps de séjour : détecteur FID.
- ▶ Chromatographie en phase gazeuse à la pression atmosphérique.

- ▶ Faibles nombres de Reynolds ($Re \approx 10$) : laminaire.
- ▶ Mesure de la distribution de temps de séjour : détecteur FID.
- ▶ Chromatographie en phase gazeuse à la pression atmosphérique.
- ▶ Mesures limitées aux hydrocarbures jusqu'à C3.

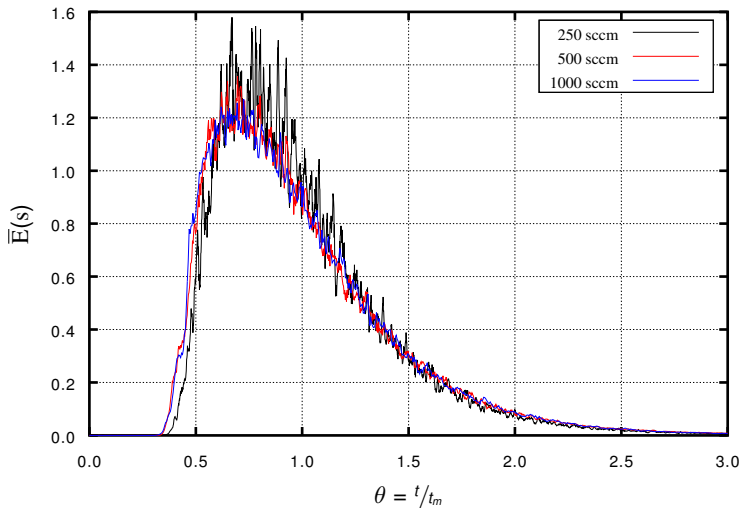
- ▶ Faibles nombres de Reynolds ($Re \approx 10$) : laminaire.
- ▶ Mesure de la distribution de temps de séjour : détecteur FID.
- ▶ Chromatographie en phase gazeuse à la pression atmosphérique.
- ▶ Mesures limitées aux hydrocarbures jusqu'à C3.
- ▶ Bilan de matière pour le carbone et pour l'hydrogène.

- ▶ Faibles nombres de Reynolds ($Re \approx 10$) : laminaire.
- ▶ Mesure de la distribution de temps de séjour : détecteur FID.
- ▶ Chromatographie en phase gazeuse à la pression atmosphérique.
- ▶ Mesures limitées aux hydrocarbures jusqu'à C3.
- ▶ Bilan de matière pour le carbone et pour l'hydrogène.
- ▶ Estimation des espèces non mesurées.

Distribution de Temps de Séjour Densité de Probabilité

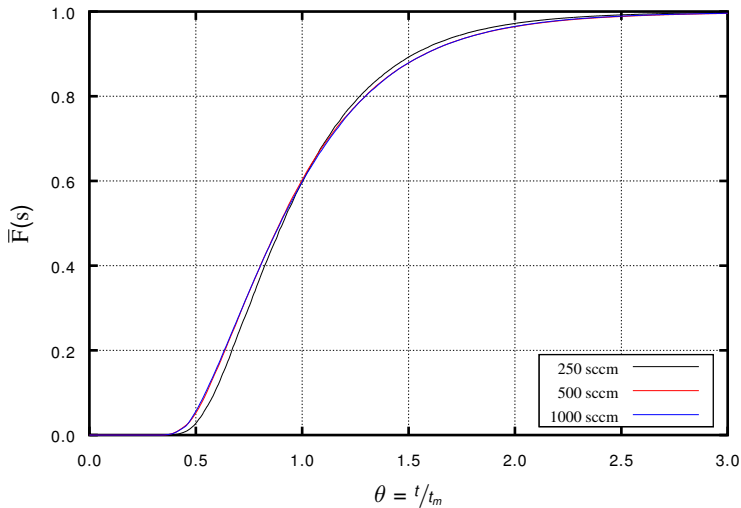


Distribution de Temps de Séjour Densité de Probabilité Normalisée



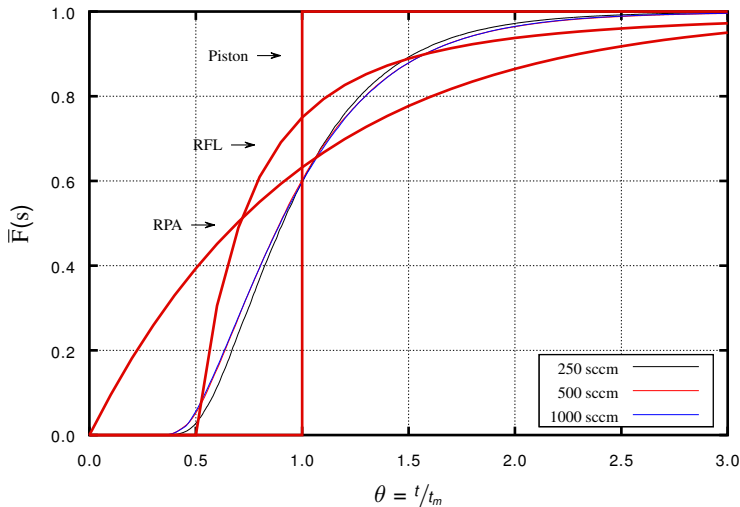
Distribution de Temps de Séjour

Intégrale de la Densité de Probabilité Normalisée



Distribution de Temps de Séjour

Comportements Limites



- ▶ Réacteur avec comportement intermédiaire entre :

« Piston » et « Parfaitement Agité (RPA) ».

- ▶ Réacteur avec comportement intermédiaire entre :

« Piston » et « Parfaitement Agité (RPA) ».

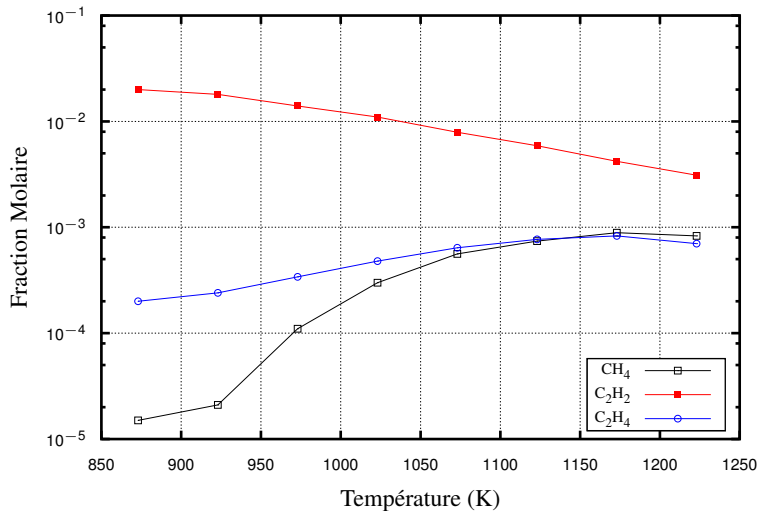
- ▶ Comportement faiblement couplé au débit.

- ▶ Réacteur avec comportement intermédiaire entre :

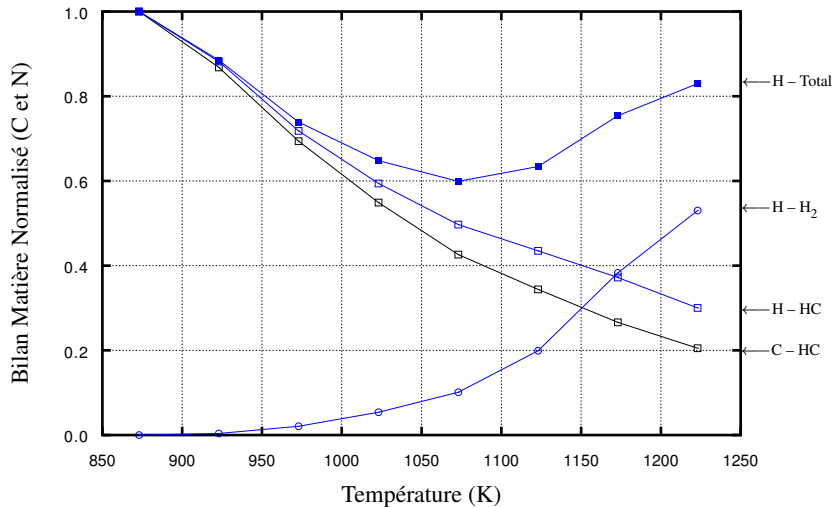
« Piston » et « Parfaitement Agité (RPA) ».

- ▶ Comportement faiblement couplé au débit.
- ▶ Temps caractéristique de l'ordre de 600 s pour un débit de $500 \text{ cm}^3 \cdot \text{mn}^{-1}$.

Pyrolyse de l'Acétylène Évolution avec la Température

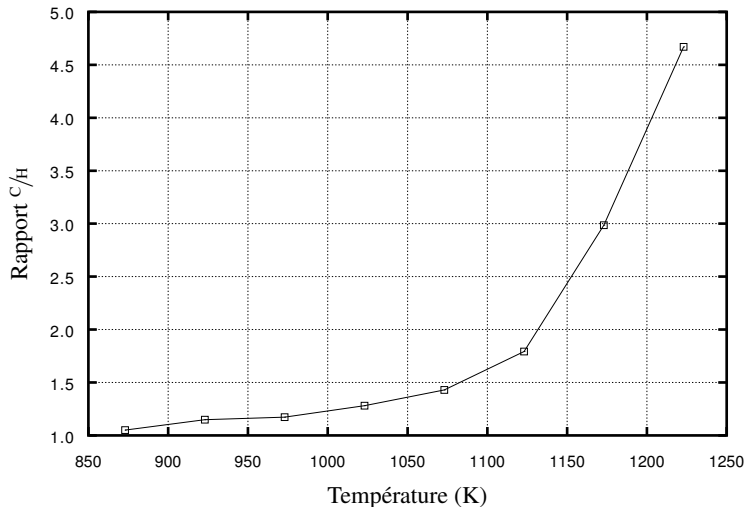


Pyrolyse de l'Acétylène Apport en Carbone et Hydrogène



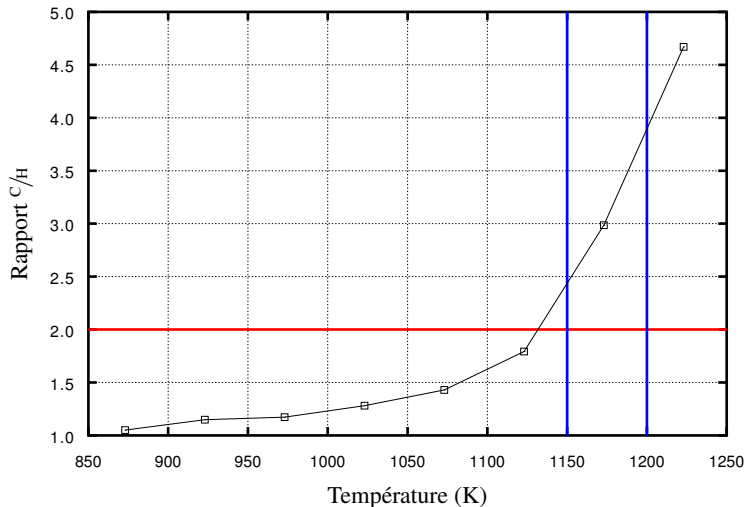
Pyrolyse de l'Acétylène

Rapport C/H des Espèces Non-mesurées

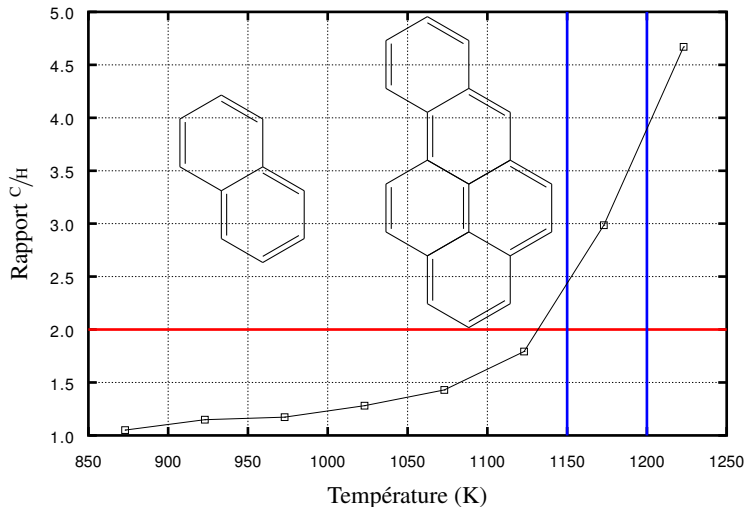


Pyrolyse de l'Acétylène

Rapport C/H des Espèces Non-mesurées



Pyrolyse de l'Acétylène Rapport C/H des Espèces Non-mesurées



- Décomposition détectable de C_2H_2 à partir de 873 K.

Caractérisation des Atmosphères Composition

- ▶ Décomposition détectable de C_2H_2 à partir de 873 K.
- ▶ Moins de 30% du carbone injecté dans le réacteur est récupéré à la sortie quand la température est de l'ordre de 1173 K.

Caractérisation des Atmosphères

Composition

- ▶ Décomposition détectable de C_2H_2 à partir de 873 K.
- ▶ Moins de 30% du carbone injecté dans le réacteur est récupéré à la sortie quand la température est de l'ordre de 1173 K.
- ▶ Le bilan de carbone (70 à 80%) se trouve sous forme d'hydrocarbures avec plus de 3 atomes de carbone et rapport $C/H \geq 3$ (formation de HAP ou suie).



Institut Jean Lamour

PENSER LES MATÉRIAUX DE DEMAIN

Modélisation du Procédé

- Système d'équations pour le modèle cinétique élémentaire zéro-dimensionnel :

Équations {

Modélisation des Atmosphères

Le Système d'Équations

- Système d'équations pour le modèle cinétique élémentaire zéro-dimensionnel :

$$\text{Équations} \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial Y_i}{\partial t} = \frac{\dot{\omega}_i}{\rho} \end{array} \right. \quad \text{Espèces}$$

Modélisation des Atmosphères Le Système d'Équations

- Système d'équations pour le modèle cinétique élémentaire zéro-dimensionnel :

$$\text{Équations} \left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial Y_i}{\partial t} = \frac{\dot{\omega}_i}{\rho} & \text{Espèces} \\ \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{\rho c_p} \sum_{k=1}^{N_{\text{espec}}} h_k \dot{\omega}_k & \text{Énergie} \end{array} \right.$$

Modélisation des Atmosphères

Le Système d'Équations

- Système d'équations pour le modèle cinétique élémentaire zéro-dimensionnel :

$$\text{Équations} \left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial Y_i}{\partial t} = \frac{\dot{\omega}_i}{\rho} & \text{Espèces} \\ \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{\rho c_p} \sum_{k=1}^{N_{\text{espec}}} h_k \dot{\omega}_k & \text{Énergie} \end{array} \right.$$

- Où la vitesse de formation d'une espèce est donnée par :

$$\dot{\omega}_i = M_i \sum_{k=1}^{N_{\text{reac}}} (\nu''_{ik} - \nu'_{ik}) \mathbb{C}_k \left[k_{fk} \prod_{j=1}^{N_{\text{espec}}} \left(\frac{Y_j \rho}{M_j} \right)^{\nu'_{jk}} - k_{bk} \prod_{j=1}^{N_{\text{espec}}} \left(\frac{Y_j \rho}{M_j} \right)^{\nu''_{jk}} \right]$$

Modélisation des Atmosphères

Le Code Développé

- Code développé dans les langages C++ et Python avec les librairies TChem²¹, Cantera¹⁰ et CVode¹³.

Modélisation des Atmosphères

Le Code Développé

- ▶ Code développé dans les langages C++ et Python avec les librairies TChem²¹, Cantera¹⁰ et CVode¹³.
- ▶ Code validé à partir de reproduction des résultats de Norinaga et Deutschmann¹⁸.

Modélisation des Atmosphères

Le Code Développé

- ▶ Code développé dans les langages C++ et Python avec les librairies TChem²¹, Cantera¹⁰ et CVode¹³.
- ▶ Code validé à partir de reproduction des résultats de Norinaga et Deutschmann¹⁸.
- ▶ Possibilité de réaliser l'analyse de sensibilité par rapport aux concentrations des espèces²⁴.

Modélisation des Atmosphères Le Code Développé

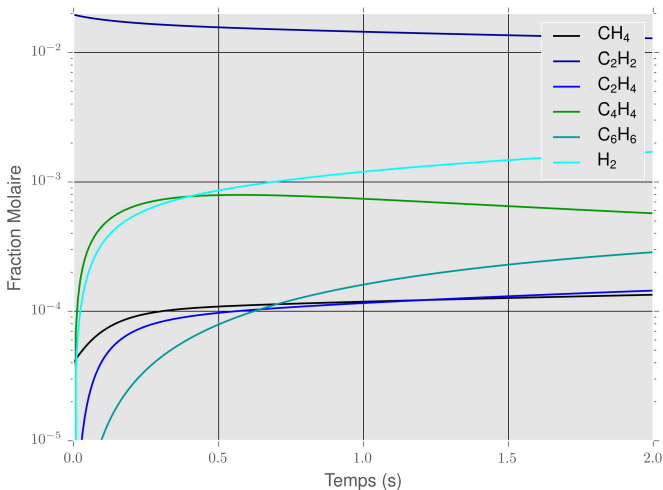
- ▶ Code développé dans les langages C++ et Python avec les librairies TChem²¹, Cantera¹⁰ et CVode¹³.
- ▶ Code validé à partir de reproduction des résultats de Norinaga et Deutschmann¹⁸.
- ▶ Possibilité de réaliser l'analyse de sensibilité par rapport aux concentrations des espèces²⁴.
- ▶ Modèles de réacteur parfaitement agité et piston.

Modélisation des Atmosphères Le Code Développé

- ▶ Code développé dans les langages C++ et Python avec les librairies TChem²¹, Cantera¹⁰ et CVode¹³.
- ▶ Code validé à partir de reproduction des résultats de Norinaga et Deutschmann¹⁸.
- ▶ Possibilité de réaliser l'analyse de sensibilité par rapport aux concentrations des espèces²⁴.
- ▶ Modèles de réacteur parfaitement agité et piston.
- ▶ Mécanisme réduit de Graf¹² comparé aux résultats expérimentaux.

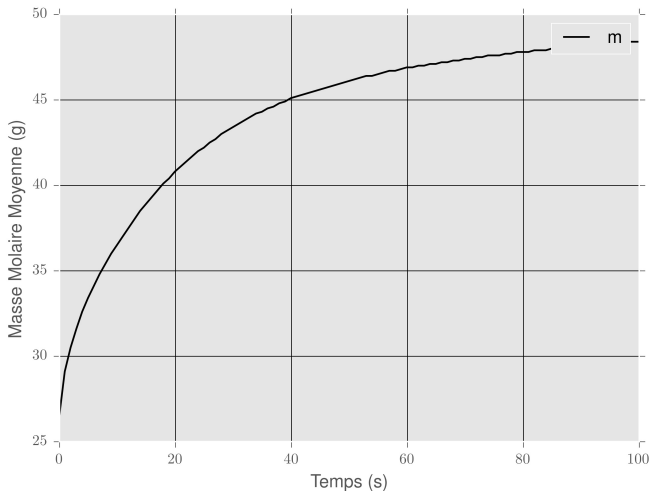
Modélisation des Atmosphères

Réponse Temporelle – Réacteur Piston à 1173 K



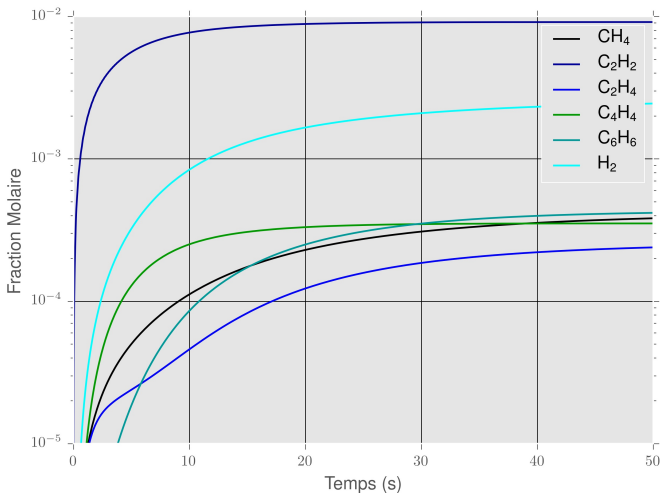
Modélisation des Atmosphères

Évolution de la Masse Molaire Moyenne à 1173 K



Modélisation des Atmosphères

Réponse Temporelle – Réacteur Agité Ouvert à 1173 K



Utilisation des Données de DTS

Réacteur avec Profil de Température

Conversion

DTS + Modèle de Mélange + Cinétique

Utilisation des Données de DTS

Réacteur avec Profil de Température

Conversion

DTS + Modèle de Mélange + Cinétique

Tableau: Comparaison entre mesures expérimentales et simulation.
Zone isotherme à 1173 K.

| | H ₂ | CH ₄ | C ₂ H ₂ | C ₂ H ₄ |
|--------|----------------------|----------------------|-------------------------------|-------------------------------|
| Mesuré | $1,1 \times 10^{-2}$ | $8,1 \times 10^{-4}$ | $4,9 \times 10^{-3}$ | $7,2 \times 10^{-4}$ |
| S.D. | $1,2 \times 10^{-2}$ | $1,0 \times 10^{-3}$ | $3,3 \times 10^{-3}$ | $7,9 \times 10^{-4}$ |

Modélisation des Atmosphères

Étapes de la Modélisation

| Étape | Code | Simulation |
|---|------|------------|
| Solution zéro-dimensionnelle : homogène | | |
| Analyse de sensibilité : homogène | | |
| Solution zéro-dimensionnelle : homogène et hétérogène | | |
| Simplification des modèles cinétiques | | |
| Simulation 2-D avec <i>Fluent</i> ^{1,2} | | |

Modélisation des Atmosphères

Étapes de la Modélisation

| Étape | Code | Simulation |
|---|------|------------|
| Solution zéro-dimensionnelle : homogène | | |
| Analyse de sensibilité : homogène | | |
| Solution zéro-dimensionnelle : homogène et hétérogène | | |
| Simplification des modèles cinétiques | | |
| Simulation 2-D avec <i>Fluent</i> ^{1,2} | | |

Modélisation des Atmosphères

Étapes de la Modélisation

| Étape | Code | Simulation |
|---|------|------------|
| Solution zéro-dimensionnelle : homogène | | |
| Analyse de sensibilité : homogène | | |
| Solution zéro-dimensionnelle : homogène et hétérogène | | |
| Simplification des modèles cinétiques | | |
| Simulation 2-D avec <i>Fluent</i> ^{1,2} | | |

Modélisation des Atmosphères

Étapes de la Modélisation

| Étape | Code | Simulation |
|---|------|------------|
| Solution zéro-dimensionnelle : homogène | | |
| Analyse de sensibilité : homogène | | |
| Solution zéro-dimensionnelle : homogène et hétérogène | | |
| Simplification des modèles cinétiques | | |
| Simulation 2-D avec <i>Fluent</i> ^{1,2} | | |

Modélisation des Atmosphères

Étapes de la Modélisation

| Étape | Code | Simulation |
|---|------|------------|
| Solution zéro-dimensionnelle : homogène | | |
| Analyse de sensibilité : homogène | | |
| Solution zéro-dimensionnelle : homogène et hétérogène | | |
| Simplification des modèles cinétiques | | |
| Simulation 2-D avec <i>Fluent</i> ^{1,2} | | |

Modélisation des Atmosphères

Étapes de la Modélisation

| Étape | Code | Simulation |
|---|------|------------|
| Solution zéro-dimensionnelle : homogène | | |
| Analyse de sensibilité : homogène | | |
| Solution zéro-dimensionnelle : homogène et hétérogène | | |
| Simplification des modèles cinétiques | | |
| Simulation 2-D avec <i>Fluent</i> ^{1,2} | | |

Modélisation des Atmosphères

Étapes de la Modélisation

| Étape | Code | Simulation |
|---|------|------------|
| Solution zéro-dimensionnelle : homogène | | |
| Analyse de sensibilité : homogène | | |
| Solution zéro-dimensionnelle : homogène et hétérogène | | |
| Simplification des modèles cinétiques | | |
| Simulation 2-D avec <i>Fluent</i> ^{1,2} | | |

Modélisation des Atmosphères

Étapes de la Modélisation

| Étape | Code | Simulation |
|---|------|------------|
| Solution zéro-dimensionnelle : homogène | | |
| Analyse de sensibilité : homogène | | |
| Solution zéro-dimensionnelle : homogène et hétérogène | | |
| Simplification des modèles cinétiques | | |
| Simulation 2-D avec <i>Fluent</i> ^{1,2} | | |

Modélisation des Atmosphères

Étapes de la Modélisation

| Étape | Code | Simulation |
|---|------|------------|
| Solution zéro-dimensionnelle : homogène | | |
| Analyse de sensibilité : homogène | | |
| Solution zéro-dimensionnelle : homogène et hétérogène | | |
| Simplification des modèles cinétiques | | |
| Simulation 2-D avec <i>Fluent</i> ^{1,2} | | |

Modélisation des Atmosphères

Étapes de la Modélisation

| Étape | Code | Simulation |
|---|------|------------|
| Solution zéro-dimensionnelle : homogène | | |
| Analyse de sensibilité : homogène | | |
| Solution zéro-dimensionnelle : homogène et hétérogène | | |
| Simplification des modèles cinétiques | | |
| Simulation 2-D avec <i>Fluent</i> ^{1,2} | | |

Modélisation des Atmosphères

Étapes de la Modélisation

| Étape | Code | Simulation |
|---|------|------------|
| Solution zéro-dimensionnelle : homogène | | |
| Analyse de sensibilité : homogène | | |
| Solution zéro-dimensionnelle : homogène et hétérogène | | |
| Simplification des modèles cinétiques | | |
| Simulation 2-D avec <i>Fluent</i> ^{1,2} | | |



Institut Jean Lamour

PENSER LES MATÉRIAUX DE DEMAIN

Prochaines Démarches

Prochaines Démarches

| Activité | Durée Prévue |
|----------|--------------|
|----------|--------------|

| Activité | Durée Prévue |
|--|-------------------|
| Modélisation des processus de surface. | 03/2015 - 07/2015 |

Prochaines Démarches

| Activité | Durée Prévue |
|---|-------------------|
| Modélisation des processus de surface. | 03/2015 - 07/2015 |
| Mesure par spectroscopie infrarouge des espèces formées avec et en absence d'un échantillon métallique. | 05/2015 - 06/2015 |

Prochaines Démarches

| Activité | Durée Prévue |
|---|-------------------|
| Modélisation des processus de surface. | 03/2015 - 07/2015 |
| Mesure par spectroscopie infrarouge des espèces formées avec et en absence d'un échantillon métallique. | 05/2015 - 06/2015 |
| Suivi de la pyrolyse du C_2H_2 et du NH_3 à basse pression par chromatographie. | 07/2015 - 08/2015 |

Prochaines Démarches

| Activité | Durée Prévue |
|---|-------------------|
| Modélisation des processus de surface. | 03/2015 - 07/2015 |
| Mesure par spectroscopie infrarouge des espèces formées avec et en absence d'un échantillon métallique. | 05/2015 - 06/2015 |
| Suivi de la pyrolyse du C_2H_2 et du NH_3 à basse pression par chromatographie. | 07/2015 - 08/2015 |
| Essais de carbonitruration à basse pression. | 08/2015 - 10/2015 |

Prochaines Démarches

| Activité | Durée Prévue |
|----------|--------------|
|----------|--------------|

Prochaines Démarches

| Activité | Durée Prévue |
|---|-------------------|
| Analyse par microscopie électronique en transmission des précipités formés lors du revenu des échantillons nitrurés et carbonitrurés. | 07/2015 - 12/2015 |

Prochaines Démarches

| Activité | Durée Prévue |
|---|-------------------|
| Analyse par microscopie électronique en transmission des précipités formés lors du revenu des échantillons nitrurés et carbonitrurés. | 07/2015 - 12/2015 |
| Simplification des modèles cinétiques pour emploi en simulations CFD. | 08/2015 - 02/2016 |

Prochaines Démarches

| Activité | Durée Prévue |
|---|-------------------|
| Analyse par microscopie électronique en transmission des précipités formés lors du revenu des échantillons nitrurés et carbonitrurés. | 07/2015 - 12/2015 |
| Simplification des modèles cinétiques pour emploi en simulations CFD. | 08/2015 - 02/2016 |
| Rédaction de publications à partir des résultats obtenus. | 03/2015 - 04/2016 |



Institut Jean Lamour

PENSER LES MATÉRIAUX DE DEMAIN

Publications et Présentations

- ▶ Rapport d'avancement de première année de thèse livré à l'IRT M2P : Mise au Point de la Carbonituration Gazeuse des Alliages 16NiCrMo13 et 23MnCrMo5 : Modélisation et Procédés.
- ▶ Présentation orale intitulée « Thermochemical treatments of alloys 16NiCrMo13 and 23MnCrMo5 : the roles of carbon and nitrogen on metallurgical response to carbonitriding » acceptée pour le « 22ème Congrès de l'IFHTSE » à Venise, le 20 à 22 mai 2015. Auteurs : Walter Dal'Maz Silva, Jacky Dulcy, Grégory Michel, Pascal Lamesle et Thierry Belmonte.

- Publication intitulée « The roles of carbon and nitrogen on metallurgical response of chromium-bearing low alloy steels » rédigée et en vérification finale pour soumission au journal « Materials Science and Engineering A ». Auteurs : Walter Dal'Maz Silva, Jacky Dulcy, Grégory Michel, Pascal Lamesle et Thierry Belmonte.



Institut Jean Lamour

PENSER LES MATÉRIAUX DE DEMAIN

Merci de Votre Attention!



Institut Jean Lamour

PENSER LES MATÉRIAUX DE DEMAIN

Références

1. 2012, *ANSYS FLUENT Theory Guide*, ANSYS Inc., Canonsburg, PA, USA.
2. 2012, *ANSYS FLUENT User's Guide*, ANSYS Inc., Canonsburg, PA, USA.
3. ANDERSSON, J.-O., T. HELANDER, L. HÖGLUND, P. SHI et B. SUNDMAN. 2002, « Thermo-calc & dictra, computational tools for materials science », *CALPHAD*, vol. 26, n° 2, p. 273–312.
4. BORGENTAM, A., A. ENGSTRÖM, L. HÖGLUND et J. A. GREN. 2000, « Dictra, a tool for simulation of diffusional transformations in alloys », *Journal of Phase Equilibria*, vol. 21, n° 3, p. 269–280.

Références II

5. COLES, T. M. K. 2011, *Model Simplification of Chemical Kinetics Systems Under Uncertainty*, mémoire de maîtrise, Massachusetts Institute of Technology.
6. DIRTU, D., L. ODOCHIAN, A. PUI et I. HUMELNICU. 2006, « Thermal decomposition of ammonia. N_2H_4 - an intermediate reaction product », *Central European Journal of Chemistry*.
7. DULCY, J. et M. GANTOIS. 2007, « Théorie des traitements thermochimiques — cémentation. carburation », *Techniques de l'Ingénieur*.
8. DULCY, J. et M. GANTOIS. 2012, « Formation et durcissement de la couche de diffusion en nitruration et nitrocarburation — systèmes fer-chrome-azote et fer-chrome-azote-carbone », *Techniques de l'Ingénieur*.

Références III

9. GANTOIS, M. et J. DULCY. 2010, « Théorie des traitements thermochimiques — nitruration - nitrocarburation systèmes binaire et ternaire fer-azote et fer-azote-carbone — couche de combinaison », *Techniques de l'Ingénieur*.
10. GOODWIN, D. G., H. K. MOFFAT et R. L. SPETH. 2014, « Cantera : An object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes », <http://www.cantera.org>. Version 2.1.2.
11. GOROCKIEWICZ, R. 2011, « The kinetics of low-pressure carburizing of low alloy steels », *Vacuum*, vol. 86, p. 448–451.
12. GRAF, F. 2007, *Pyrolyse- und Aufkohlungsverhalten von C_2H_2 bei der Vakuumaufkohlung von Stahl*, thèse de doctorat, Universität Karlsruhe (TH).

13. HINDMARSH, A. C., P. N. BROWN, K. E. GRANT, S. L. LEE, R. SERBAN, D. E. SHUMAKER et C. S. WOODWARD. 2005, « SUNDIALS : Suite of nonlinear and differential/algebraic equation solvers », *ACM Transactions on Mathematical Software*, vol. 31, n° 3, p. 363–396.
14. KHAN, R. U. 2008, *Vacuum Gas Carburizing - Fate of Hydrocarbons*, thèse de doctorat, Universität Karlsruhe (TH).
15. KRAUSS, G. 1999, « Martensite in steel : strength and structure », *Materials Science and Engineering : A*, vol. 273–275, n° 0, doi :[http://dx.doi.org/10.1016/S0921-5093\(99\)00288-9](http://dx.doi.org/10.1016/S0921-5093(99)00288-9), p. 40 – 57, ISSN 0921-5093.

16. LU, T. et C. K. LAW. 2005, « A directed relation graph method for mechanism reduction », *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 30, n° 1, doi :<http://dx.doi.org/10.1016/j.proci.2004.08.145>, p. 1333 – 1341, ISSN 1540-7489.
17. NORINAGA, K., O. DEUTSCHMANN, N. SAEGUSA et J. ICHIRO HAYASHI. 2009, « Analysis of pyrolysis products from light hydrocarbons and kinetic modeling for growth of polycyclic aromatic hydrocarbons with detailed chemistry », *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, vol. 86, n° 1, doi :<http://dx.doi.org/10.1016/j.jaap.2009.05.001>, p. 148 – 160, ISSN 0165-2370.

18. NORINAGA, K. et O.DEUTCHMANN. 2007, « Detailed kinetic modeling of gas-phase reactions in the chemical vapor deposition of carbon from light hydrocarbons », *Industrial and Engineering Chemistry Research*, vol. 46, n° 11, p. 3547–3557.
19. NORSTROM, L.-A. 1976, « On the yield strength of quenched low-carbon martensite », *Scandinavian Journal of Metallurgy*, vol. 5, p. 159–165.
20. PEPIOT-DESJARDINS, P. et H. PITSCH. 2008, « An efficient error-propagation-based reduction method for large chemical kinetic mechanisms », *Combustion and Flame*, vol. 154, n° 1–2, doi :<http://dx.doi.org/10.1016/j.combustflame.2007.10.020>, p. 67 – 81, ISSN 0010-2180.

Références VII

21. SAFTA, C., H. NAJM et O. KNIO. 2011, *TChem - A Software Toolkit for the Analysis of Complex Kinetic Models*, Sandia Corporation, Canonsburg, PA, USA.
22. SLYCKE, J. et T. ERICSSON. 1981, « A study of reactions occurring during the carbonitriding process », *Journal of Heat Treatment*, vol. 2, p. 3–19.
23. SLYCKE, J. et T. ERICSSON. 1981, « A study of reactions occurring during the carbonitriding process part ii », *Journal of Heat Treatment*, vol. 2, p. 97–112.
24. TURÁNYI, T. et T. BÉRCES. 1989, « Reaction rate analysis of complex kinetic systems », *International Journal of Chemical Kinetics*, vol. 21, p. 83–99.

25. YADA, K. et O. WATANABE. 2013, « Reactive flow simulation of vacuum carburizing by acetylene gas », *Computers and Fluids*, vol. 79, p. 65–76.