



HAL
open science

Modélisation d'un phénomène d'oxydation interne par la méthode X-FEM

Éric Feulvarch, Jean-Christophe Roux, Jean-Michel Bergheau

► **To cite this version:**

Éric Feulvarch, Jean-Christophe Roux, Jean-Michel Bergheau. Modélisation d'un phénomène d'oxydation interne par la méthode X-FEM. 9e Colloque national en calcul des structures, CSMA, May 2009, Giens, France. hal-01408406

HAL Id: hal-01408406

<https://hal.science/hal-01408406v1>

Submitted on 4 Dec 2016

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Distributed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License

Modélisation d'un phénomène d'oxydation interne par la méthode X-FEM

E. Feulvarch¹, J.-C. Roux², J.-M. Bergheau¹

¹ LTDS, UMR 5513 CNRS/ECL/ENISE
58 rue Jean Parot, 42023 SAINT-ETIENNE cedex 2, France
{bergheau,feulvarch}@enise.fr

² DIPI, EA 3719 ENISE
58 rue Jean Parot, 42023 SAINT-ETIENNE cedex 2, France
roux@enise.fr

Résumé — La simulation de problèmes de diffusion et précipitation d'éléments chimiques au cours de phénomènes d'oxydation interne est présentée ici à partir de la méthode X-FEM. Cette technique semble tout à fait appropriée lorsque les produits de solubilité mis en jeu sont très faibles voir quasi-nuls. Dans ce cas, un front de précipitation apparaît et doit être correctement représenté par la simulation. La méthode X-FEM revêt alors un intérêt très fort car sans remaillage, elle permet de connaître précisément la position du front de précipitation à chaque instant de la simulation.

Mots clés — diffusion, précipitation, oxydation interne, discontinuité, X-FEM.

1 Introduction

Le problème envisagé ici concerne la diffusion d'atomes d'oxygène au travers d'une matrice métallique contenant des atomes d'aluminium en très faible quantité («hypothèse des solutions diluées»). La formation d'alumines Al_2O_3 peut alors se produire au sein de la matrice métallique sous forme d'une oxydation interne. Récemment, Flauder et *al.* [4] ont proposé une approche numérique couplant un modèle de diffusion pour chacune des espèces chimiques avec la loi d'action des masses. Cette méthode est basée sur la technique des différences finies 1D en espace couplée avec une intégration explicite en temps. Cependant, l'intégration explicite en temps requiert des pas de temps très petits, ce qui rallonge notablement les temps de calcul.

Très récemment, Feulvarch et *al.* [3] ont étendus cette approche aux éléments finis en espace couplés à une intégration implicite en temps au moyen de l'algorithme d'Euler. Les avantages d'une telle méthode sont très clairs :

- utilisation d'éléments finis plutôt que des différences finies, ce qui facilite grandement les maillages en 2D et en 3D ;
- intégration implicite en temps, qui permet l'utilisation de pas de temps beaucoup plus grands, sans dégradation apparente de la qualité des résultats.

Le but de cet article est de proposer une méthode de type X-FEM pour le cas où la précipitation est induite par un produit de solubilité quasi-nul. En effet, dans cette situation, les profils de fraction massique totale présentent une discontinuité au niveau d'un front de précipitation de façon similaire à l'enthalpie en présence d'une transformation isotherme [2]. La technique X-FEM revêt alors un intérêt évident pour la représentation de ce front.

Nous proposons ici une discrétisation de type X-FEM basée sur les travaux de Chessa et *al.* [1] pour un changement d'état isotherme en intégrant la technique Level-Set. Un premier exemple 1D montre les possibilités d'une telle approche pour un problème d'oxydation interne.

2 Le problème

Le contexte du problème et ses équations sont exposées ici de manière brève ; pour plus de détails, se reporter à [4].

Soient C_O et C_{Al} , les concentrations correspondant aux atomes d'oxygène et d'aluminium respectivement. Soient F_O et F_{Al} , les fractions massiques totales en oxygène et en aluminium incluant les atomes contenus dans les précipités d'alumine Al_2O_3 et ceux qui diffusent au sein de la matrice métallique. $P_{Al_2O_3}$ représente la fraction massique des précipités d' Al_2O_3 .

En considérant un volume élémentaire représentatif et en comptant dans ce volume les atomes d'oxygène et d'aluminium sous forme précipité ou dissout, on obtient les relations suivantes :

$$\begin{aligned}\frac{F_O}{M_O} &= \frac{C_O}{M_O} + 3 \frac{P_{Al_2O_3}}{M_{Al_2O_3}} \\ \frac{F_{Al}}{M_{Al}} &= \frac{C_{Al}}{M_{Al}} + 2 \frac{P_{Al_2O_3}}{M_{Al_2O_3}}\end{aligned}$$

où M_O , M_{Al} et $M_{Al_2O_3}$ désignent respectivement les masses atomiques de l'oxygène, de l'aluminium et la masse moléculaire du précipité Al_2O_3 .

Le flux des éléments d'oxygène et d'aluminium sont donnés par les expressions suivantes :

$$\begin{aligned}J_O &= -D_O \text{ grad } C_O \\ \text{et } J_{Al} &= -D_{Al} \text{ grad } C_{Al}\end{aligned}$$

où D_O et D_{Al} désignent les coefficients de diffusion. Dans ces expressions, les concentrations sont supposées être égales aux activités thermodynamiques.

Les lois locales de conservation pour chacun des éléments s'écrivent :

$$\begin{aligned}\frac{\partial C_O}{\partial t} &= \text{div} (D_O \text{ grad } C_O) \\ \text{et } \frac{\partial C_{Al}}{\partial t} &= \text{div} (D_{Al} \text{ grad } C_{Al})\end{aligned}$$

Les relations entre les fractions massiques totales d'oxygène et d'aluminium et leur concentration sont supposées être régies par un équilibre thermodynamique instantané local, *i.e.* par la loi d'action des masses.

$$\begin{cases} P_{Al_2O_3} = 0 & \text{et } C_{Al}^2 C_O^3 \leq K_{Al_2O_3} \\ \text{ou} \\ P_{Al_2O_3} > 0 & \text{et } C_{Al}^2 C_O^3 = K_{Al_2O_3} \end{cases} \quad (1)$$

où $K_{Al_2O_3}$ désigne le produit de solubilité de l'alumine.

En pratique, le produit de solubilité peut être très faible et atteindre une valeur de l'ordre de $10^{-18} (ppm)^5$ pour l'alumine [4]. Cela implique de scinder le domaine d'étude Ω en deux sous-domaines Ω_O et Ω_{Al} , séparés par un front de précipitation $\partial\Omega_{int}$ qui se propage à une vitesse v (*cf.* figure 1).

En effet, lorsque $K_{Al_2O_3}$ est nul dans l'équation (1), l'oxygène et l'aluminium ne peuvent pas coexister sous forme dissoute. Ainsi, on obtient soit $C_O = 0$ soit $C_{Al} = 0$ de part et d'autre de la frontière $\partial\Omega_{int}$ se propageant à la vitesse v définie par :

$$v = -\frac{2}{M_{Al}} J_{Al} \cdot n_s = \frac{3}{M_O} J_O \cdot n_s \quad \text{sur } \partial\Omega_{int} \quad (2)$$

Sur le front de précipitation $\partial\Omega_{int}$, par continuité des profils de concentration, il est clair que :

$$C_O = C_{Al} = 0 \text{ ppm}$$

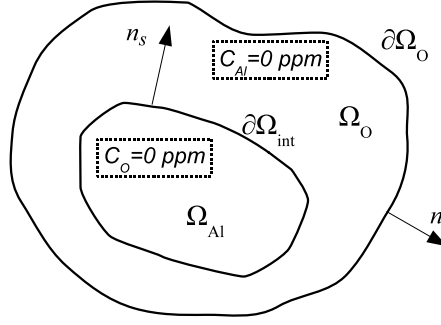


Figure 1 – Topologie du domaine d'étude Ω .

3 Modélisation et discrétisation

Le problème étudié peut être formulé de la manière suivante :

Trouver C_O et C_{Al} définies sur un domaine $\Omega \times [0; T] = \Omega_O \cup \Omega_{Al} \times [0; T]$ telles que :

$$\begin{cases} \frac{\partial C_O}{\partial t} = \text{div} (D_O \text{ grad } C_O) & \text{dans } \Omega \\ D_O \text{ grad } C_O \cdot n = J_O^{(imp)} + \lambda_O (C_O^{(imp)} - C_O) & \text{sur } \partial\Omega_O \end{cases} \quad (3)$$

avec la condition initiale $C_O(t = 0) = 0$.

et

$$\frac{\partial C_{Al}}{\partial t} = \text{div} (D_{Al} \text{ grad } C_{Al}) \quad \text{dans } \Omega \quad (4)$$

avec la condition initiale $C_{Al}(t = 0) \neq 0$.

où $J_O^{(imp)}$ est un flux entrant imposé, $C_O^{(imp)}$ une valeur imposée et λ_O le coefficient de transfert pour l'oxygène.

Les formulations variationnelles sont obtenues en multipliant les équations (3) et (4) par des fonctions test C_O^* et C_{Al}^* , et en intégrant sur le domaine Ω :

Trouver C_O et C_{Al} telles que, $\forall C_O^*$ et $\forall C_{Al}^*$:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{\partial C_O}{\partial t} C_O^* dV + \int_{\Omega} D_O \text{ grad } C_O \cdot \text{ grad } C_O^* dV + \int_{\partial\Omega_O} \lambda_O C_O C_O^* dS \\ - \int_{\partial\Omega_O} (J_O^{(imp)} + \lambda_O C_O^{(imp)}) C_O^* dS = 0 \end{aligned} \quad (5)$$

et

$$\int_{\Omega} \frac{\partial C_{Al}}{\partial t} C_{Al}^* dV + \int_{\Omega} D_{Al} \text{ grad } C_{Al} \cdot \text{ grad } C_{Al}^* dV = 0 \quad (6)$$

Pour la résolution des problèmes (5 et 6) et comme proposé dans [1], les champs de concentration sont approchés par la méthode X-FEM de la manière suivante :

$$C(x, t) = \sum_{j=1}^n N_j(x) C_j(t) + \sum_{k=1}^{n_e} \psi_k(x, t) a_k(t)$$

où les $N_j(x)$ sont les fonctions de forme classiques, les $C_j(t)$ sont les valeurs nodales de C , les $\psi_k(x, t)$ sont les fonctions d'enrichissement et les $a_k(t)$ les degrés de libertés nodaux d'enrichissement pour les n_e nœuds enrichis.

La fonction d'enrichissement $\Psi_k(x,t)$ est donnée par

$$\Psi_k(x,t) = N_k(x) (|\varphi(x,t)| - |\varphi_k(t)|)$$

où les $\varphi_k(t)$ sont les valeurs nodales du champ de Level-Set et $\varphi(x,t)$ est défini par :

$$\varphi(x,t) = \sum_{j=1}^n N_j(x) \varphi_j(t)$$

Comme le proposent Chessa et *al.* [1], le champ de Level-Set est mis à jour en résolvant l'équation de conservation suivante de façon explicite :

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{\partial\varphi}{\partial t} + v \cdot \text{grad } \varphi = \frac{\partial\varphi}{\partial t} + F |\text{grad } \varphi| \quad (7)$$

où v est un champ de vitesses d'évolution du champ de Level-Set, et F est un champ scalaire de vitesses défini par :

$$F = n \cdot v = \frac{\text{grad } \varphi}{|\text{grad } \varphi|} \cdot v$$

La détermination de F se fait en résolvant l'équation :

$$\text{sign}(\varphi) \text{ grad } F \cdot \text{grad } \varphi = 0 \quad \text{dans } \Omega \quad (8)$$

avec la condition aux limites : $F(x,t) = v$ sur $\partial\Omega_{int}$.

Finalement, la procédure de résolution est la suivante :

Connaissant C_O^n , C_{Al}^n et φ^n au temps $t = n\Delta t$,

1. calculer v à partir de l'équation (2) dans les éléments enrichis ;
2. construire le champ F en résolvant l'équation (8) ;
3. déterminer le nouveau champ φ^{n+1} à partir de (7) ;
4. connaissant φ^{n+1} , résoudre les équations (5) et (6) en utilisant un algorithme d'EULER implicite pour déterminer les valeurs de C_O^{n+1} et C_{Al}^{n+1} au temps $(n+1)\Delta t$.

4 Application

Nous considérons ici un milieu semi-infini, en se plaçant dans un cadre 1D.

Les coefficients de diffusion pour l'aluminium et l'oxygène sont :

$$D_O = 8,02 \mu m^2 s^{-1} \quad \text{et} \quad D_{Al} = 5,58 \cdot 10^{-4} \mu m^2 s^{-1}$$

La fraction massique totale initiale d'oxygène est nulle, alors que la concentration en aluminium est de 1200 ppm. En surface c'est à dire en $x = 0$, une concentration de $9,24 \cdot 10^{-3}$ ppm en oxygène est imposée. A l'infini, les flux d'aluminium et d'oxygène sont considérés comme nuls.

Le graphique de la figure 2 représente le profil de concentration en aluminium à $t = 60$ s.

Deux types de résultats sont présentés :

- la solution analytique donnée par Wagner [5] ;
- la concentration calculée aux nœuds du maillage par la méthode X-Fem.

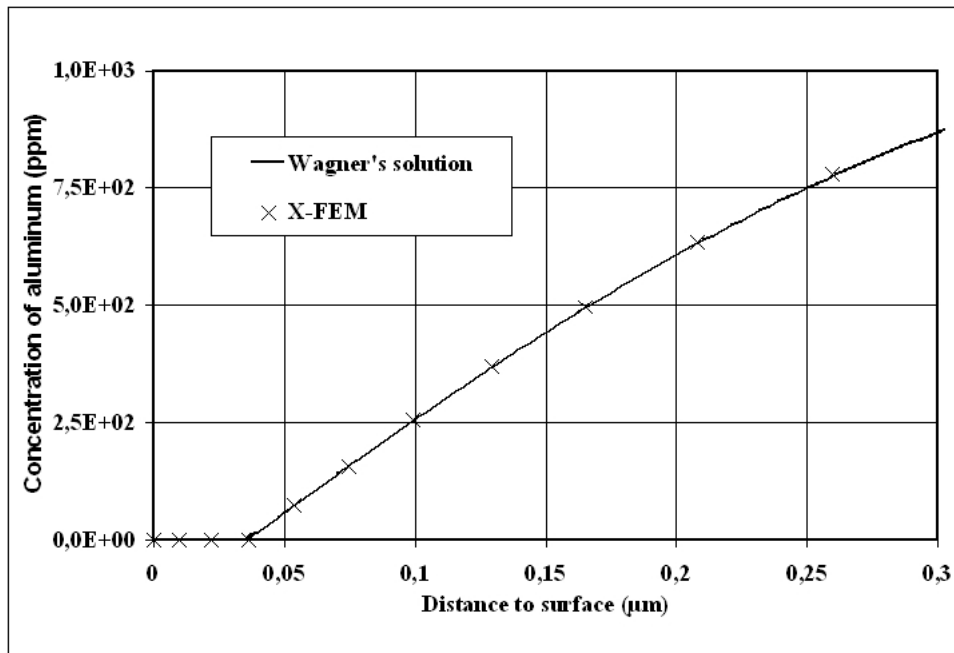


Figure 2 – Profil de concentration en aluminium à $t = 60$ s.

5 Conclusion

Comme on peut le voir dans l'application, la méthode X-Fem est bien adaptée à ce type de problème, et les résultats obtenus concordent avec la solution analytique de façon très satisfaisante.

Les travaux actuels visent à étendre cette approche, en 2D et en 3D, aux cas de plusieurs éléments chimiques pouvant produire plusieurs précipités, à produits de solubilité quasi-nuls.

Références

- [1] J. Chessa, P. Smolinski, T. Belytschko. The extended finite element method for solidification problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 53 : 1959-1977, 2002.
- [2] E. Feulvarch, J.-M. Bergheau. An implicit fixed-grid method for the finite element analysis of heat transfer involving phase changes. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 51 : 585-610, 2007.
- [3] E. Feulvarch, J.-M. Bergheau, J.-B. Leblond. An implicit finite element algorithm for the simulation of diffusion with phase changes in solid. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, accepted 26 november 2008.
- [4] P. Flauder, D. Huin, J.-B. Leblond. Numerical simulation of internal oxidation of steels during annealing treatments. *Oxidation of Metals*, 64 : 131-167, 2005.
- [5] C. Wagner. Reaktionstypen bei der oxydation von Legierungen. *Zeitschrift für Elektrochemie*, 63 : 772-782, 1959.