

CHAPITRE 2

Introduction à l'analyse thermique métallurgique mécanique couplée



2.1. Introduction

2.2. Rappels généraux de métallurgie

2.1. INTRODUCTION

La réduction des efforts à mettre en oeuvre et la possibilité d'engendrer des déformations importantes sans risque de rupture expliquent le nombre important des pièces métalliques formées à chaud. Le retour à la température ambiante peut se faire par un refroidissement naturel ou une trempe. Un revenu peut succéder à une trempe et on voit la panoplie des traitements thermiques apparaître. Ces traitements ont pour but d'optimiser les caractéristiques de la pièce face à ses conditions d'emploi.

L'état final d'une pièce est en effet caractérisé par sa microstructure, son profil de contraintes résiduelles et sa géométrie exacte. Chacune de ces caractéristiques est importante :

- la microstructure détermine les performances mécaniques de la pièce ;
- les contraintes résiduelles influencent la tenue de la pièce à la fatigue et au flambement (pièces élancées comprimées) ;
- la géométrie de la pièce est généralement le premier critère à satisfaire avec une erreur admissible qui varie selon son utilisation (forge de précision ou non).

De très nombreux phénomènes interviennent pour déterminer cet état final. Au cours du refroidissement d'une pièce métallique, on ne peut dissocier la recherche de l'état thermique (la température), de l'état mécanique (contraintes et déformations) et de l'état métallurgique (% des différentes phases existantes). En effet, les phénomènes responsables de ces divers états sont fortement couplés (fig. 2.1).

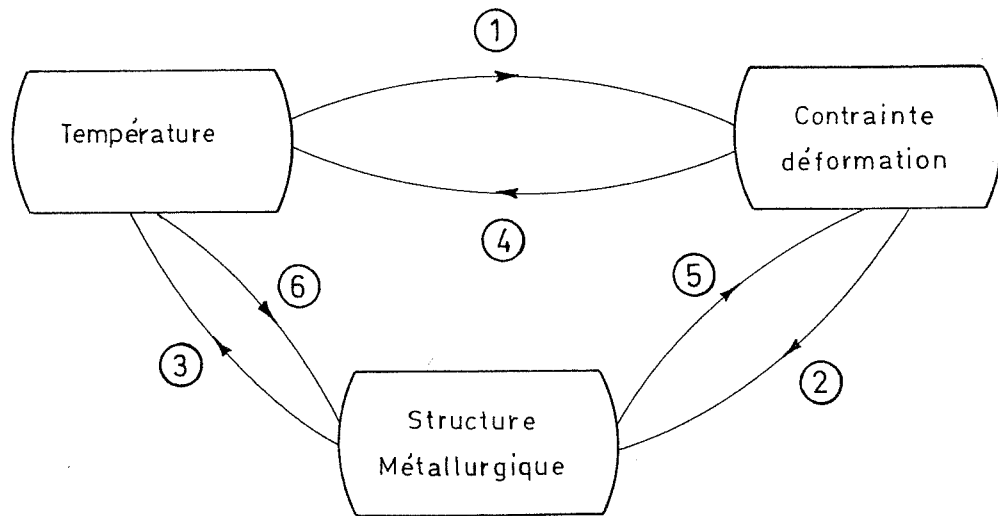


Figure 2.1.
Couplages entre les différentes analyses

1. Un champ de température induit des contraintes et déformations thermiques.
2. L'état de contraintes et de déformations influence les transformations de phase : retard ou avancement du début de la transformation, accélération ou ralentissement de la transformation ...
3. Les transformations sont généralement exothermiques et au cours d'un refroidissement, elles ont tendance à provoquer un accroissement momentané de la température (phénomène de recalescence).
4. Lors de déformations plastiques importantes, l'énergie dissipée n'est pas négligeable et elle constitue une source de chaleur pour le calcul thermique.
5. Les masses volumiques des différentes phases sont inégales, toute transformation provoque donc des contraintes et déformations. Le phénomène de plasticité de transformation traduit l'apparition de plasticité au cours d'un changement de phase pour des niveaux de contrainte nettement inférieurs à la limite de plasticité du matériau.
6. L'histoire des températures constitue le facteur prépondérant qui règle les changements de phase.

Les chapitres 3 à 5 analysent en détail les différents phénomènes en présence, leurs origines physiques et leurs interactions. De plus, nous y décrivons les modèles adoptés pour simuler le comportement mécanique, thermique et métallurgique d'une pièce. L'introduction de ces modèles dans le code d'éléments finis non linéaires LAGAMINE a entraîné certains problèmes numériques. La solution de ces difficultés constitue une partie importante de notre travail (chapitre 6).

Précisons que nous n'insistons pas sur l'aspect "*analyse mécanique en grandes déformations*" qui a déjà fait l'objet de nombreuses publications au sein de notre équipe de travail (EF10, EF11, EF12, EF13). Le côté "*analyse thermique non linéaire*" est également bien connu et de nombreux codes sont aptes à traiter ce phénomène (FOR 10, EF14). Par contre, l'introduction dans un même code de simulation numérique des phénomènes mécaniques, thermiques et métallurgiques est un sujet en plein essor (section CP de la bibliographie).

L'introduction d'une analyse détaillée de l'évolution microstructurale dans la partie thermique du code LAGAMINE a constitué une première étape de notre travail (chapitres 3 et 4). Une fois les phénomènes thermiques, métallurgiques et leur couplage (flèches 3 et 6 de la fig. 2.1) bien assimilés, on peut aborder leur intégration à une analyse mécanique. Les 6 couplages représentés fig. 2.1 doivent alors être traités simultanément. Il s'agit de la seconde étape de notre travail qui est résumée par les chapitres 5 et 6.

Des comparaisons entre des résultats fournis par LAGAMINE, des résultats expérimentaux et des résultats obtenus par un autre code de calcul ont été effectués sur des simulations de refroidissement d'éprouvettes cylindriques (chapitre 3). Enfin, une application industrielle du programme a été réalisée. Il s'agit de la simulation du refroidissement d'une poutrelle laminée par diverses séquences d'arrosage à l'eau (chapitre 11).

Pour bien comprendre la suite de cet ouvrage, une certaine connaissance des phénomènes de changement de phase est nécessaire. Si vous n'êtes pas un métallurgiste habitué à ces notions, vous pourrez vous rafraîchir la mémoire grâce aux quelques rappels qui suivent.

2.2. RAPPELS GENERAUX DE METALLURGIE

Les notions de base sont tirées des ouvrages CP27, CP28, CP29 auxquels nous vous renvoyons pour une information plus complète.

Un acier est un alliage de fer et de carbone contenant moins de 2,06% de carbone. Le carbone non dissout dans le fer peut se trouver, soit à l'état de graphite, soit à l'état de carbure Fe_3C .

Dans le cas des aciers, la forme stable (graphite) n'apparaît qu'exceptionnellement et on considère toujours le diagramme d'équilibre fer-carbone correspondant à la présence du carbone non dissout sous forme de carbure. Nous représentons ce diagramme à la fig. 2.2.

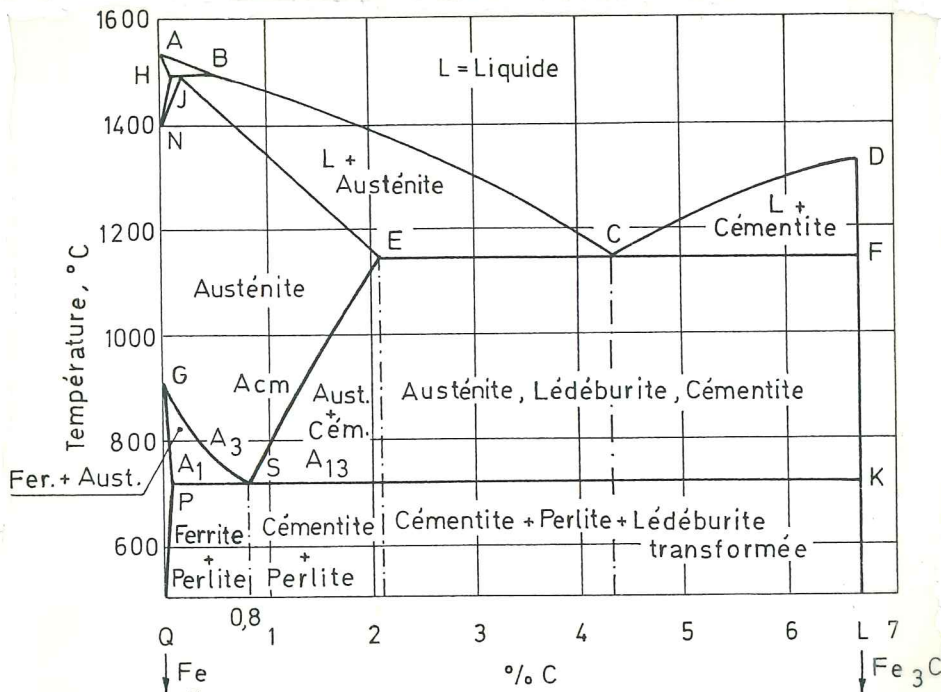


Figure 2.2 a.- Diagramme d'équilibre Fer Carbone ($Fe - Fe_3C$) des aciers

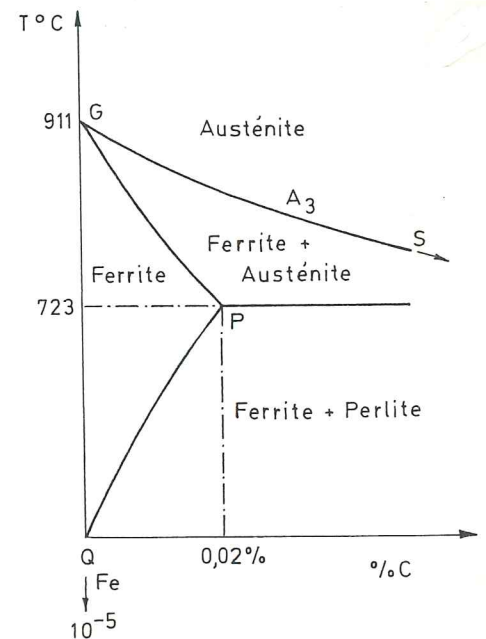


Figure 2.2 b.- Détail de la transformation allotropique $\gamma \rightarrow \alpha$ pour les alliages $Fe - C$ à très faible teneur en carbone.

Nous nous préoccupons par la suite des phases de l'acier à des températures inférieures à 1200° . Il nous suffit donc de définir les termes et les symboles suivants :

- AUSTENITE : solution solide de Fer γ (structure cubique à faces centrées) qui peut contenir jusqu'à 2,06% de C à $1142^\circ C$

- FERRITE : solution solide de Fer α (structure cubique centrée) dont la concentration maximale en carbone est de 0,02% C à 723° C
- CEMENTITE : combinaison intermétallique $Fe_3 C$
- point S : situé à 0,8% de C et 723° C, ce point correspond à l'apparition d'un composant appelé EUTECTOÏDE selon la terminologie des diagrammes d'équilibre. Dans le cas des aciers, l'eutectoïde ne constitue pas une phase distincte. Il est appelé PERLITE et est formé de deux familles de lamelles alternées de ferrite et de cémentite
- COMPOSANT PROEUTECTOÏDE : phase résultant de la transformation de l'austénite avant l'apparition de la perlite. Selon que le pourcentage de carbone est supérieur ou inférieur à 0,8%, on a respectivement de la cémentite ou de la ferrite, et l'acier est qualifié de hyper- ou hypoeutectoïde
- A_3 : température d'équilibre pour le début de la précipitation de la ferrite proeutectoïde
- A_{cm} : température d'équilibre pour le début de la précipitation de la cémentite proeutectoïde
- A_1 : température d'équilibre pour la transformation eutectoïde (723° C).

Dans la pratique, la décomposition de l'austénite se déroule dans des conditions suffisamment éloignées de l'équilibre thermodynamique pour que les renseignements fournis par un diagramme d'équilibre ne soient plus suffisants pour déterminer la nature et les proportions relatives des microconstituants formés.

Une première étape, dans l'étude de la transformation de l'austénite est le travail de DAVENPORT et BAIN (1930) qui refroidissent brusquement un acier austénitique à une température T qu'ils maintiennent constante pendant le processus de transformation. Ils relèvent ainsi les temps de début et de fin des transformations pour chaque température envisagée. Ils tracent ensuite des courbes résumant leurs résultats. Ces courbes sont appelées courbes TTT (Temps, Température, Transformation). On en trouvera deux exemples à la fig. 2.3, qui illustre les connexions existant entre le diagramme d'équilibre et les courbes TTT.

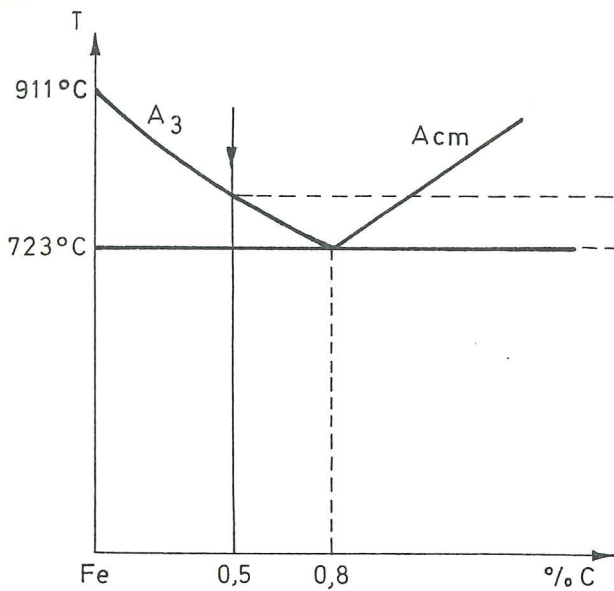
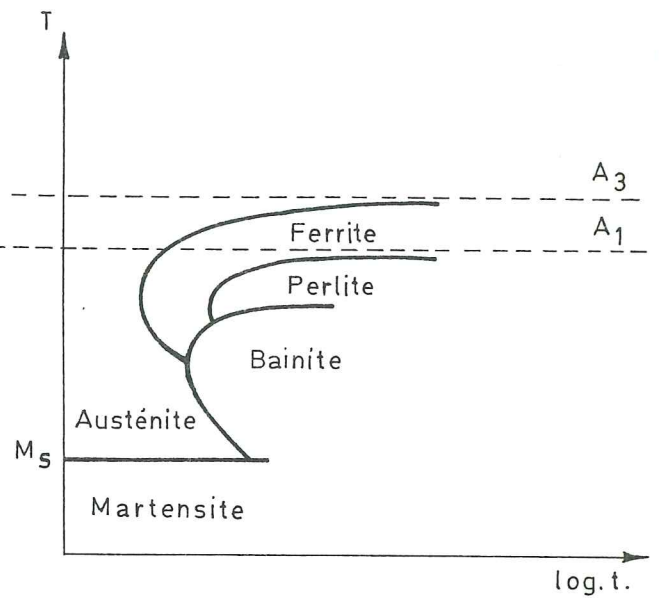


DIAGRAMME D'EQUILIBRE



COURBE TTT

INDIQUANT LE DEBUT DES TRANSFORMATIONS.

Figure 2.3 a.

Exemple de courbe TTT d'un acier hypoeutectoïde à 0,5% C.

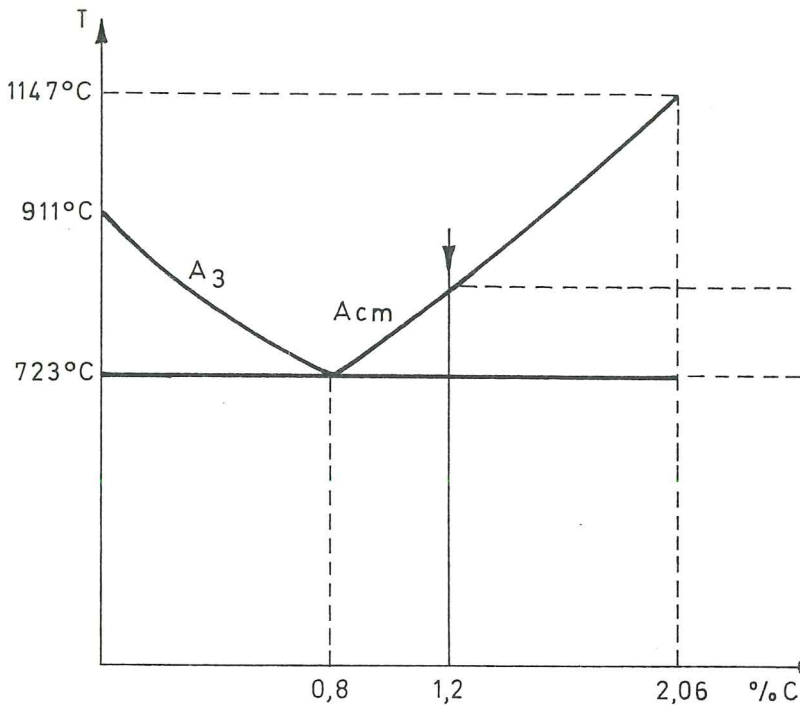
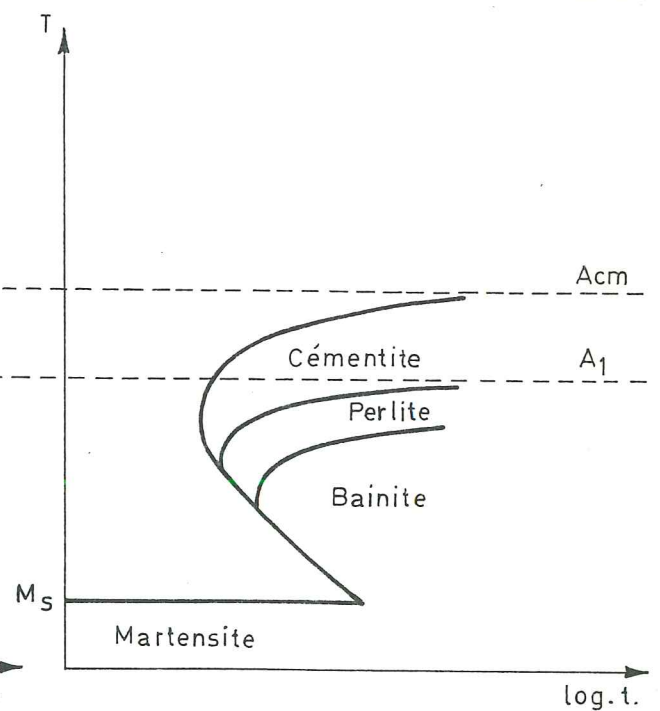


DIAGRAMME D'EQUILIBRE



COURBE TTT

INDIQUANT LE DEBUT DES TRANSFORMATIONS

Figure 2.3 b.

Exemple de courbe TTT d'un acier hypereutectoïde à 1.2% de C

Deux nouvelles microstructures apparaissent :

- la bainite : phase constituée de ferrite et de cémentite dont la structure est différente de la perlite et varie selon la température :
 - *bainite supérieure* : constituant "en barbes de plumes" formé de ferrite contenant des plaquettes de cémentites très fines, fort fragmentées et présentant une certaine orientation privilégiée,
 - *bainite inférieure* : constituant affiné en faisceaux de lamelles d'orientation définies (on parle des aiguilles de bainite) ;
- la martensite : phase constituée d'une solution solide d'insertion d'atomes de carbone dans un réseau de fer quadratique s'apparentant au réseau cubique centré de la ferrite.

Lorsque la migration des atomes de carbone intervient dans la formation d'une nouvelle phase, on parle de **transformation par diffusion**. C'est le cas de la formation de ferrite, de cémentite, de perlite et de bainite. Ces transformations sont caractérisées par la conjugaison de deux phénomènes : la germination de particules et leur croissance.

Au contraire, **la formation de la martensite** s'effectue très rapidement (10^{-7} sec), sans période d'incubation. Aucune migration des atomes de carbone n'intervient, il s'agit d'une sorte de rabattement de l'ensemble des divers plans cristallins de l'austénite.

Dans la pratique industrielle, on réalise assez rarement des transformations à température constante. C'est généralement par un refroidissement continu plus ou moins rapide que l'on amène la pièce métallique à température ambiante. Les courbes de transformation en refroidissement continu ou "*courbes CCT*" (Continuous Cooling Transformation) traduisent les résultats expérimentaux. On y retrouve les mêmes types de transformations que dans les courbes TTT mais les zones de transformations sont déplacées et déformées (fig. 2.4).

DIAGRAMME T.T.T.

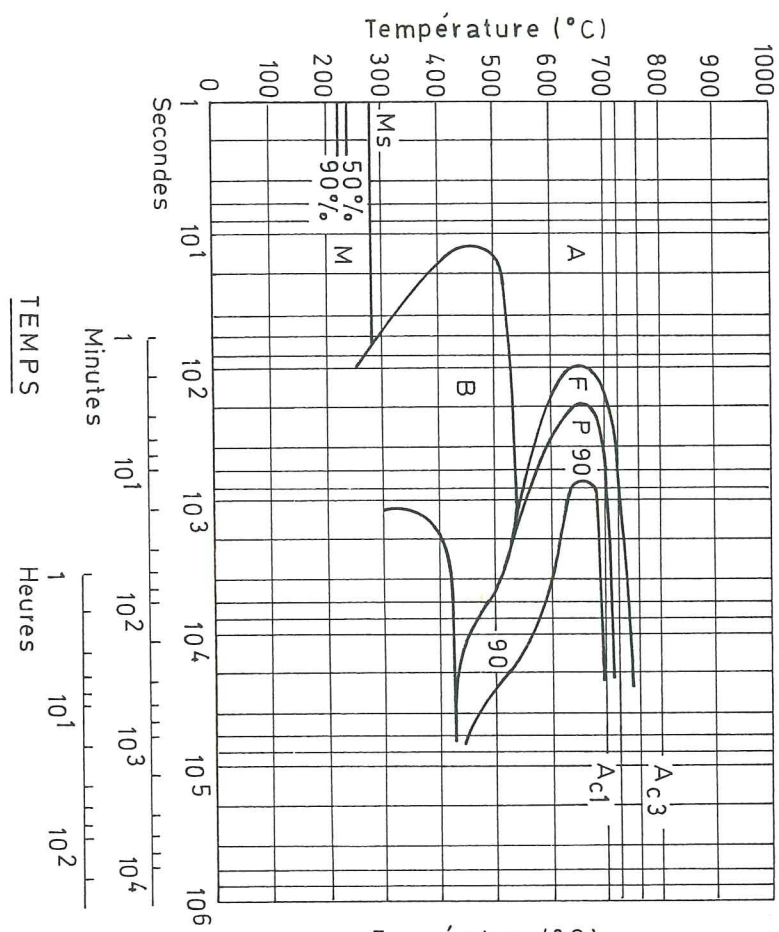


DIAGRAMME C.C.T.

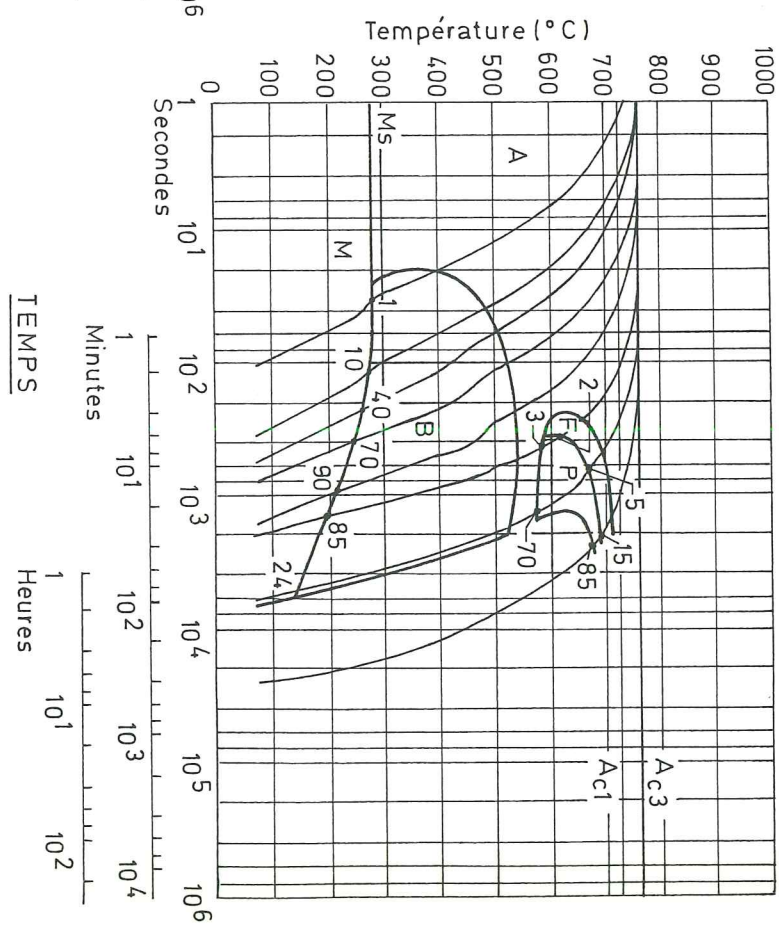


Figure 2.4. - Courbes TTT et CCT d'un acier faiblement allié au chrome-molybdène.
Les nombres indiquent les pourcentages d'austénite transformée.

La construction des diagrammes TTT et CCT basée sur les cinétiques de transformations est proposée par TANAKA (CP18, CP19).

Pour terminer, rappelons la *règle des segments* qui sera utilisée par la suite.

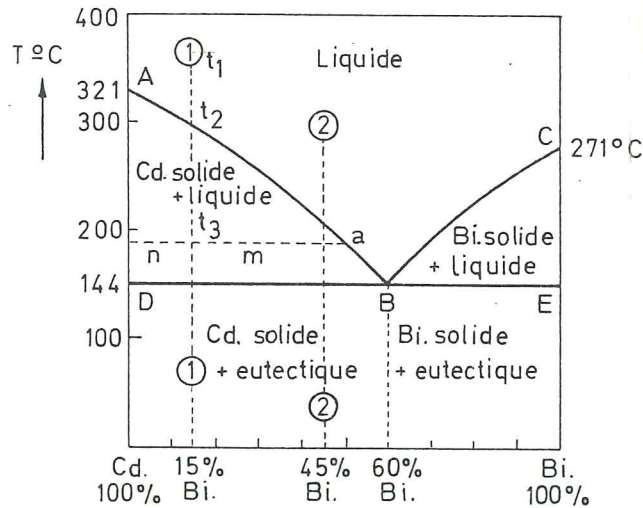


Figure 2.5. - Diagramme d'équilibre du système cadmium-bismuth. Métaux complètement insolubles à l'état solide.

Observons le refroidissement d'une solution liquide contenant 15% Bi et 85% Cd (les pourcents fournissent des compositions en *poids*). A la température t_3 , on a d'une part du Cd à l'état solide et d'autre part une solution liquide contenant 50% Bi, 50% Cd (point a).

Si l'on note :

P_s = poids du Cd solide

P_1 = poids de la solution liquide finale (50% Cd ; 50% Bi)

P = poids de la solution liquide initiale (15% Bi, 85% Cd)

On démontre facilement que :

$$P_s = \frac{m}{n+m} P ; P_1 = \frac{n}{n+m} P ; \frac{P_s}{P_1} = \frac{m}{n}$$

Le rapport des poids des 2 composants (solide et liquide) est égal au rapport inverse des segments m et n . Cette règle est générale et applicable à tous les diagrammes binaires, que l'on envisage l'état liquide ou solide.

CHAPITRE 3

Modèle d'analyse métallurgique thermique couplée



3.1. Introduction

3.2. Transformations par diffusion

3.2.1. Aspect physique

3.2.2. Modèle mathématique

3.2.2.1. La modélisation des transformations avec diffusion à température constante

3.2.2.2. Modélisation des cinétiques de transformation en condition anisotherme

3.2.2.3. Précisions relatives à l'application du modèle

3.3. Transformation martensitique

3.4. Modèle thermique

3.5. Tests de validation

3.6. Prévission de la dureté

3.7. Conclusions

3.1. INTRODUCTION

La modélisation des changements de phase successifs qui apparaissent lors du refroidissement continu d'une pièce métallique a fait l'objet de nombreux travaux.

Il n'entre pas dans les objectifs de ce travail de réaliser une recherche d'ordre métallurgique pour améliorer les modèles existants. Nous nous situons plutôt comme utilisateur des résultats de ces travaux afin de les appliquer à des cas industriels concrets.

Notre choix d'un modèle mathématique pour les cinétiques de transformations s'est basé essentiellement sur le travail de F.M. FERNANDES (CP30) qui a réalisé une étude bibliographique très détaillée de divers modèles.

En se basant sur certains d'entre-eux, il a développé un code de calcul basé sur la méthode des différences finies permettant la simulation numérique du refroidissement de cylindres métalliques infiniment longs. Il a choisi cette géométrie particulière pour deux raisons essentielles :

- les équations à résoudre sont très simplifiées puisqu'on se ramène à un problème unidimensionnel (seule la dimension radiale est significative) ; cela permet notamment d'éviter un bon nombre de difficultés numériques que l'on rencontre dans les cas bi- ou tridimensionnels ;
- de nombreuses expériences de laboratoire destinées à caractériser les changements de phases métalliques sont réalisées sur des éprouvettes cylindriques dont le diamètre est faible vis-à-vis de la longueur ; ces expériences peuvent donc servir à valider les modèles mathématiques sur lesquels se base le programme de simulation.

Nous avons retenu le même modèle mathématique que FERNANDES pour les raisons suivantes :

- les simulations numériques unidimensionnelles précipitées prouvent qu'en général, il reproduit bien la réalité expérimentale ;
- nous pouvons disposer des paramètres thermiques et métallurgiques qui le caractérisent pour deux aciers (42 CD4 et XC 80). Pour un nouvel acier, les données sont aisément accessibles puisque la majorité des informations métallurgiques nécessaires peut être obtenue à partir des courbes TTT. Quant aux paramètres thermiques (conductivité, capacité calorifique et enthalpie de transformation), ils sont généralement disponibles dans la littérature.

Comme vous l'aurez sans doute remarqué, nous parlons toujours du refroidissement d'une pièce métallique. Le modèle choisi couvre en effet les refroidissements naturels et les traitements thermiques de trempe. Il suppose qu'au départ, la pièce analysée est constituée à 100% d'austénite et que sa température est suffisamment élevée pour que cette phase soit stable. Ceci correspond bien à la pratique industrielle où les pièces subissent un traitement d'austénisation avant de subir une opération de formage à chaud (forgeage, estampage ou encore laminage). Cette austénisation consiste à chauffer l'acier de la température ambiante à une température du domaine de l'austénite et à faire à cette température un maintien d'une certaine durée permettant la transformation totale en austénite de la phase stable à la température ambiante, une mise en solution du carbone et des autres éléments présents, ainsi qu'une homogénéisation plus ou moins complète de l'austénite. Cette opération d'austénisation est classique et la littérature (CP 29) fournit suffisamment d'informations à ce sujet pour éviter tout problème aux industries.

Dans cette optique, la limitation du modèle au refroidissement n'est pas gênante. Cependant après la trempe, on applique parfois un revenu : traitement thermique qui comporte un ou plusieurs chauffages à des températures déterminées, avec maintien à ces températures, suivi de refroidissements appropriés.

Le but de ce traitement est d'amener les propriétés de la pièce métallique au niveau souhaité (modification de la dureté, de la ductilité, ...). Il entraîne des modifications de la microstructure telles que par exemple la transformation en martensite ou bainite de l'austénite résiduelle.

Pour fournir un outil complet aux industriels, il faudrait donc adapter le modèle pour simuler le revenu. Un essai a été réalisé dans ce sens lors de la simulation du traitement thermique d'une poutrelle laminée. Les détails des hypothèses adoptées seront fournis dans la présentation de cet exemple d'application (chapitre 11). Une analyse plus complète des phénomènes, ainsi que des tests de validation avec l'expérience sont cependant nécessaires. Ce travail n'a pu être réalisé dans le cadre de cette thèse, il constituera un développement intéressant du modèle dès la réception des résultats expérimentaux.

Les paragraphes qui suivent décrivent le modèle de refroidissement adopté qui traite les cas de transformations par diffusion et la transformation martensitique. Les tests de validation réalisés sont présentés en 3.5.

3.2. TRANSFORMATIONS PAR DIFFUSION (ferrite, cémentite, perlite, bainite).

3.2.1. Aspect physique.

Les transformations de ce type sont caractérisées par la conjugaison de deux phénomènes : la germination de particules et leur croissance. Le nombre de germes apparaissant par unité de temps et de volume (taux de germination \dot{N}) dépend des zones perturbées du réseau cristallin. Il s'agit normalement des joints de grain et des régions environnant les inclusions ; cependant si la vitesse de refroidissement est grande, des germes apparaissent dans les grains eux-mêmes.

La vitesse de croissance de ces germes (G) dépend surtout de la vitesse de diffusion du carbone.

3.2.2. Modèle mathématique.

3.2.2.1. *La modélisation des transformations par diffusion à température constante.*

De nombreux chercheurs se sont penchés sur ce problème (CP30, chap. I). Le meilleur compromis entre la simplicité de la formulation et la représentativité de la cinétique expérimentale est celui obtenu par la formule de JOHNSON-MEHL-AVRAMI en 1941 (CP*1 à CP*4)

$$y = 1 - \exp(-b t^n) \quad (3.1)$$

où y = proportion de phase formée

t = temps

b, n = paramètres de la loi qui sont fonction de la température.

Les autres formulations exigent la connaissance de trop nombreux paramètres difficiles à déterminer. Par ailleurs, pour certaines conditions particulières, leurs expressions sont semblables à celle de JOHNSON-MEHL-AVRAMI.

Pour établir cette formule, JOHNSON et MEHL se basent sur un taux de germination \dot{N} et une vitesse de croissance G constants, ainsi que sur l'hypothèse que la phase produite se développe sous la forme de nodules sphériques jusqu'à ce que ceux-ci se rencontrent.

AVRAMI ajoute l'hypothèse que des germes de la nouvelle phase existent déjà dans le domaine de stabilité de la phase mère et travaille dans des conditions isocinétiques, c'est-à-dire $\dot{N}/G = \text{constante}$ et non plus $\dot{N} = \text{constante}$ et $G = \text{constante}$.

3.2.2.2. Modélisation des cinétiques de transformation en condition anisotherme.

Le modèle choisi se base sur les 3 concepts suivants :

A : le principe d'additivité ;

B : le calcul du temps de germination par la somme de SCHEIL ;

C : le calcul de la croissance selon la méthode de PUMPHEY et JONES.

Chacun des concepts est présenté ci-après, avec les limitations de validité et les imprécisions qu'il entraîne. On peut ainsi mieux comprendre les différences qui subsistent parfois entre les simulations numériques et les expériences pour certains refroidissements appliqués à certains aciers.

A. Le principe d'additivité.

Selon ce principe, la structure obtenue à la fin d'un refroidissement continu donné est le résultat d'une succession de "*transformations élémentaires isothermes*", chacune d'entre-elles se déroulant de façon indépendante de l'histoire thermique antérieure. On peut donc baser la prévision de l'évolution structurale en refroidissement continu sur des cinétiques de transformation isothermes.

Trois conditions de validité de ce principe sont avancées par UMEMOTO et ses collaborateurs (CP*5, CP*6, CP*7) :

- la réaction doit être isocinétique ($\dot{N}/G = \text{constante}$) ;
- la saturation des sites de germination doit survenir très tôt ;
- la croissance doit démarrer très rapidement et ralentir lorsque la nouvelle phase atteint une certaine taille limite.

En évoquant l'une ou l'autre de ces conditions, UMEMOTO démontre que pour les 3 transformations avec diffusion (Ferrite, Perlite, Bainite) le principe d'additivité est valable (CP30, p. 28 et p. 125).

En réalité, les principaux écarts détectés entre les expériences et les calculs peuvent être rattachés à une non additivité de la transformation.

KENNON (CP*8) rappelle en effet les changements de composition chimique de la phase-mère (austénite) dus à la ségrégation du carbone vers les produits de transformation (cémentite, ferrite, perlite ou bainite) et/ou au partage des éléments d'alliage entre phase-mère et phase(s) produite(s) au fur et à mesure de la décomposition de l'austénite.

Lors d'une simulation d'un refroidissement de l'acier 90MCV8, le calcul prévoit une poursuite de la décomposition de l'austénite en bainite et en martensite après la formation d'une quantité considérable de perlite. L'exploitation des résultats expérimentaux montre que l'austénite qui reste après avoir formé de 85 à 90% de perlite ne se décompose pas pendant le refroidissement jusqu'à la température ambiante.

De même pour un refroidissement d'un acier 42CD4 qui donne lieu à une transformation ferrito-perlitique importante, le calcul prédit une transformation bainitique plus rapide que celle observée expérimentalement.

Dans ces deux cas de divergence entre le modèle et la réalité, la modélisation ne tient pas compte de la stabilisation de l'austénite par la formation préalable d'une quantité importante d'un produit de transformation. Dans ce cas, le principe d'additivité est mis en défaut.

Soulignons cependant que dans la majorité des cas, première transformation de l'austénite ou apparition de bainite et martensite suite à la transformation d'une faible quantité de ferrite et/ou de perlite, le principe d'additivité est respecté et le calcul traduit la réalité de façon satisfaisante.

HILDENWALL (CP37) résoud ce problème de la façon suivante. Il utilise 2 à 5 diagrammes TTT relatifs à des aciers de même composition excepté leur teneur en carbone. Il calcule l'augmentation de la teneur en carbone de l'austénite suite à la formation de ferrite, constituant où le carbone est quasi absent. Les transformations martensitiques et bainitiques qui sont affectées par la teneur en carbone de l'austénite seront correctement prises en

compte grâce à l'utilisation d'un diagramme TTT calculé par interpolation entre les diagrammes connus.

Cette approche constitue certainement une amélioration de notre modèle. Elle requiert cependant un plus grand nombre de données expérimentales.

A propos de la quantité de données, remarquons l'avantage des formulations basées sur le principe d'additivité, telles les méthodes d'INOUE (CP2, CP13, CP36), de HILDENWALL (CP37), de SJÖSTRÖM (CP11, CP38), de DENIS et FERNANDES (CP5, CP7, CP8). Avec un seul diagramme TTT, on peut approcher la réalité quelle que soit la courbe de refroidissement considérée.

Les méthodes basées sur l'utilisation des courbes CCT (CP24, CP25, CP39) impliquent de connaître ces diagrammes pour tous les types de refroidissements considérés. Ainsi, pour le refroidissement d'une pièce massive, la courbe de température est très différente selon la position du point considéré. Malgré l'usage d'interpolation entre les différentes courbes CCT, le nombre de données nécessaires sera nettement plus important.

B. Modélisation de la germination selon SCHEIL.

Dans les modèles de refroidissement continu, il est très fréquent de séparer la période de germination et de croissance.

"Le temps d'incubation" mesure la période de germination pendant laquelle les germes apparaissent, se multiplient et commencent à croître. Lorsque la nouvelle phase atteint un pourcentage faible mais mesurable, un pourcent par exemple, la germination est terminée et la croissance commence.

Pour une transformation isotherme, la courbe TTT fournit directement le temps d'incubation noté $\Pi(T)$ (fig. 3.1). La précision de cette information n'est pas constante.

- Pour les températures proches des températures d'équilibre (A_3 , A_1 , A_{cm}), les transformations débutent très lentement et la forme exacte de la courbe de début de transformation est malaisée à déterminer.
- Par ailleurs, le relevé d'une courbe TTT implique un refroidissement faisant passer le solide de la température d'austénisation à la température T de maintien isotherme. L'origine des temps correspond au début du maintien isotherme et la lecture du temps d'incubation sur la courbe TTT implique qu'aucune incubation n'ait eu lieu pendant le refroidissement. Selon la vitesse de refroidissement et la position de la température T face au nez de la courbe TTT, l'importance de cette erreur varie (CP30, p. 119 à 122).

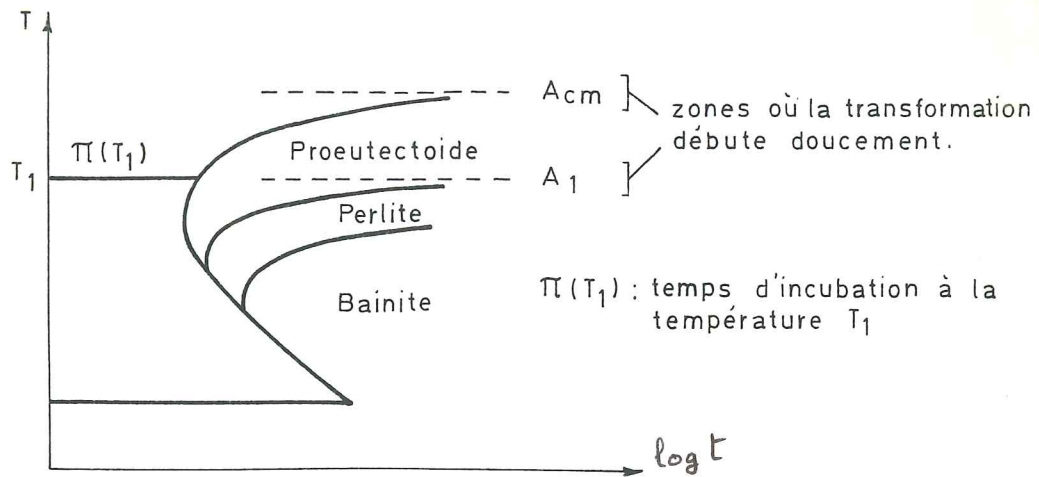


Figure 3.1

Mesure du temps d'incubation sur une courbe TTT de début de transformation.

Pour les cas de refroidissements continus, SCHEIL (CP*9) utilise le principe d'additivité. Il décompose la loi de refroidissement en une succession de paliers isothermes de durée dt et de température T . Si $\Pi(T)$ est le temps d'incubation de la transformation isotherme à la température T , le quotient $dt / \Pi(T)$ fournit la fraction d'incubation consommée à cette température.

On considère que la croissance débute lorsque la somme des fractions d'incubation réalisée pour les différentes températures atteint l'unité :

$$\int_0^{t_j} \frac{dt}{\Pi(T)} = 1 \quad (3.2)$$

avec t_j = temps d'incubation pour le refroidissement $T(t)$ considéré.

En pratique, cette intégrale se calcule numériquement et l'on définit "la somme de SCHEIL"

$$\sum_{\text{Scheil}} = \sum_{i=1}^j \frac{\Delta t_i}{\Pi(T_i)} = 1 \quad (3.3)$$

Δt_i = durée du palier isotherme à la température T_i . (Dans une approche numérique, Δt_i représentera naturellement la taille du pas de temps adopté pour la discrétisation temporelle des phénomènes étudiés).

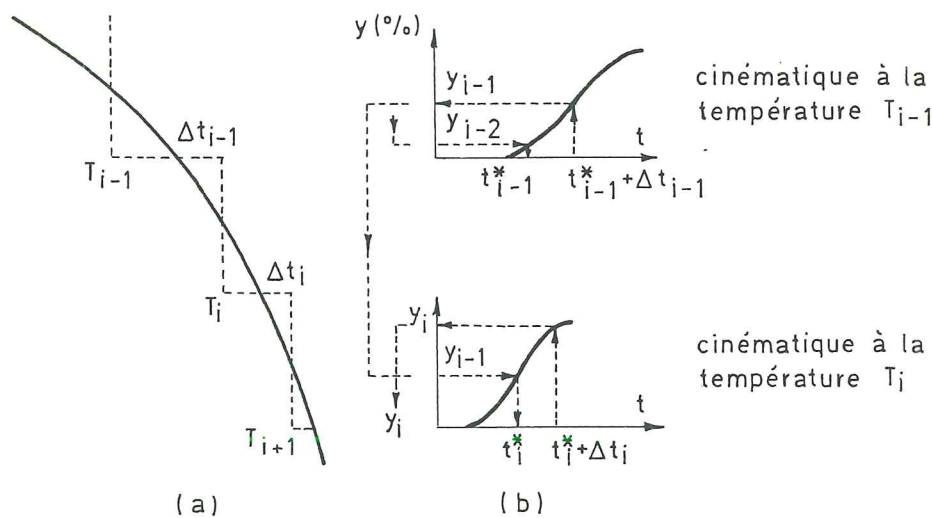
Selon l'expérience de MANNING et LORIG (CP*10), la germination effectuée dans le domaine du composant proeutectoïde (ferrite ou cementite) et de la perlite n'est pas additive à celle réalisée dans le domaine bainitique.

La somme de SCHEIL est donc multipliée par un coefficient F appelé "facteur correcteur de germination" lorsqu'on passe pour la première fois sous la température B_S qui détermine le début du domaine bainitique. Pour les aciers traités par FERNANDES (CP30), le 42CD4 et le 90MCV8, ce facteur est nul.

Les erreurs citées à propos de la détermination du temps d'incubation des transformations isothermes ont un effet mineur sur le calcul de la germination en refroidissement continu. En effet, en germination, l'accord expérience-calcul est en général satisfaisant et d'autres causes d'incertitudes, tel le transfert de la germination d'un type de transformation à un autre, peuvent avoir une importance plus grande (CP30, p. 122).

C. Modélisation de la croissance selon PUMPHEY et JONES.

Dès 1948, PUMPHEY et JONES (CP*11) appliquent le concept d'additivité pour modéliser la croissance d'une phase lors d'un refroidissement continu. La figure 3.2 explique les étapes du calcul de la fraction volumique de la nouvelle phase formée (y) qu'ils proposent.



y_{i-1} = proportion de nouvelle phase au temps t_{i-1}

y_i = proportion de nouvelle phase au temps $t_i = t_{i-1} + \Delta t_i$

Figure 3.2.

Illustration de la méthode de PUMPHEY et JONES (principe du temps fictif)

La proportion y_{i-1} de phase formée à la fin du palier de température T_{i-1} est connue. En inversant la formule de JOHNSON-MEHL-AVRAMI (3.1), on peut calculer le temps fictif t_{i-1}^* qu'il faudrait pour obtenir cette proportion y_{i-1} avec une transformation isotherme à température T_i :

$$t_{i-1}^* = \left[\frac{-\ln(1 - y_{i-1})}{b_i} \right]^{1/n_i} \quad (3.4)$$

où n_i et b_i sont les paramètres de la loi de JOHNSON-MEHL-AVRAMI à la température T_i .

On recherche alors la proportion y_i de phase formée après l'intervalle de temps Δt , durée du palier à température T_i . En utilisant à nouveau la loi de JOHNSON-MEHL-AVRAMI pour décrire la cinétique de transformation à température constante T_i , on obtient :

$$y_i = 1 - \exp(-b_i (t_{i-1}^* + \Delta t)^{n_i}) \quad (3.5)$$

A partir de cette valeur, on trouve un nouveau temps fictif t_i^* pour le palier suivant et le processus se poursuit.

Cette formulation a été améliorée par HILDENWALL et ERICSON (CP*12) de façon à prendre en compte les cas de transformations incomplètes. Soient :

- y_{\max} = la proportion maximum de nouvelle phase à la température T_i considérée ;
- $y_\gamma + y_{i-1}$ = la proportion d'austénite dont on dispose à l'entrée du domaine de transformation envisagé. Au cours de la transformation, y_γ (proportion d'austénite) diminue alors que y_{i-1} augmente mais leur somme est constante ;
- $y_{i-1 \text{ fic}} = \frac{y_{i-1}}{(y_\gamma + y_{i-1}) y_{\max}}$ = la proportion fictive qui permet par une mise à l'échelle de traiter le cas d'une transformation incomplète comme une transformation complète.

On applique ensuite la formule (3.4) pour obtenir le temps fictif correspondant au $(y_{i-1} \text{ fic})$:

$$t_{i-1}^* = \left[\frac{-\ln(1 - y_{i-1} \text{ fic})}{b_i} \right]^{1/n_i} \quad (3.6)$$

Le pourcentage y_i obtenu à la fin du palier isotherme T_i , est alors calculé par (3.5) et un calcul inverse au $y_{i-1} \text{ fic}$:

$$y_i = (y_\gamma + y_{i-1}) y_{\max} \{ 1 - \exp [- b_i (t_{i-1}^* + \Delta t_i)^{n_i}] \} \quad (3.7)$$

On vérifie que si l'on est dans le cas d'une transformation complète ($y_\gamma + y_{i-1} = 1$ et $y_{\max} = 1$), on retrouve la première formulation.

Cette formulation ne permet pas d'obtenir immédiatement une forme analytique dérivée en fonction du temps de la proportion y de la nouvelle phase.

Cette valeur est pourtant nécessaire pour le calcul thermique ainsi que dans l'approche mécanique thermique métallurgique comme nous le verrons au chapitre 5. On peut bien sûr l'évaluer de façon numérique par exemple :

$$\dot{y} = \frac{y(t + \Delta t) - y(t)}{\Delta t} \quad (3.8)$$

Les lois mécaniques élastoplastiques ou élastoviscoplastiques utilisées dans le LAGAMINE ont une formulation différentielle. Par exemple :

$$\underline{\sigma}(t + dt) = \underline{\sigma}(t) + \dot{\underline{\sigma}}(t) dt \quad (3.9)$$

avec $\underline{\sigma}$ tenseur des contraintes de Cauchy

$\dot{\underline{\sigma}}$ dérivée par rapport au temps de $\underline{\sigma}$

Dans le but d'avoir une approche semblable pour le calcul des pourcentages de phase :

$$y(t + dt) = y(t) + \dot{y}(t) dt \quad (3.10)$$

nous avons cherché la forme analytique de $\dot{y}(t)$. Selon les développements précédents (formules 3.4 à 3.8), la valeur de $y(t + dt)$ est donnée par la formule :

$$y(t + dt) = c' [1 - \exp(-b'(t + dt)^{n'})] \quad (3.11)$$

où $c' = (y_{\gamma} + y_{i-1}) y_{\max}$, n' et b' sont évalués à la température $T(t + dt)$. Par un développement de TAYLOR limité au premier ordre, on a :

$$(t^* + dt)^{n'} = (t^*)^{n'} + n' dt t^{*n'-1} \quad (3.12)$$

$$\text{où } t^* = - \left[\frac{\ln \left(1 - \frac{y(t)}{c'} \right)}{b'} \right]^{1/n'} \text{ selon (3.6)}$$

A partir de (3.12) et (3.11) on obtient :

$$y(t + dt) = y(t) + c'b'^{1/n'} n' \left[-\ln \left(1 - \frac{y(t)}{c'} \right) \right]^{1-1/n'} \left(1 - \frac{y(t)}{c'} \right) dt \quad (3.12.a)$$

$$\text{soit } \dot{y}(t) = c'b'^{1/n'} n' \left[-\ln \left(1 - \frac{y(t)}{c'} \right) \right]^{1-1/n'} \left(1 - \frac{y(t)}{c'} \right) \quad (3.12.b)$$

où les 3 paramètres c' , b' , n' peuvent être remplacés par c , b , n , paramètres calculés pour $T(t)$, dans la mesure où seuls les termes du premier ordre sont conservés.

Cette formulation que nous avons crue originale avait déjà été introduite par SJÖSTRÖM (CP38). Nous avons comparé les résultats obtenus par la formulation utilisée par FERNANDES (3.6 et 3.7) et celle basée sur la dérivée (3.9 et 3.12) lors de la simulation d'une transformation bainitique incomplète (0 à 6%). Le schéma d'intégration utilisé est celui de GALERKIN.

La figure 3.4 montre que pour des pas de temps petits, les résultats coïncident. Cependant, la première formulation non différentielle donne des résultats nettement plus précis en cas de discrétisation plus grossière du temps. Le caractère exponentiel des lois de cinétiques de transformation justifie la mauvaise précision obtenue par la seconde formulation. On peut bien sûr améliorer les résultats en utilisant une subdivision du pas en sous-intervalles, cela entraînerait cependant une augmentation inutile du temps de calcul puisque la première formulation convient pour des pas de temps importants. En conclusion, nous avons conservé la première méthode malgré notre désir de définir une formulation différentielle.

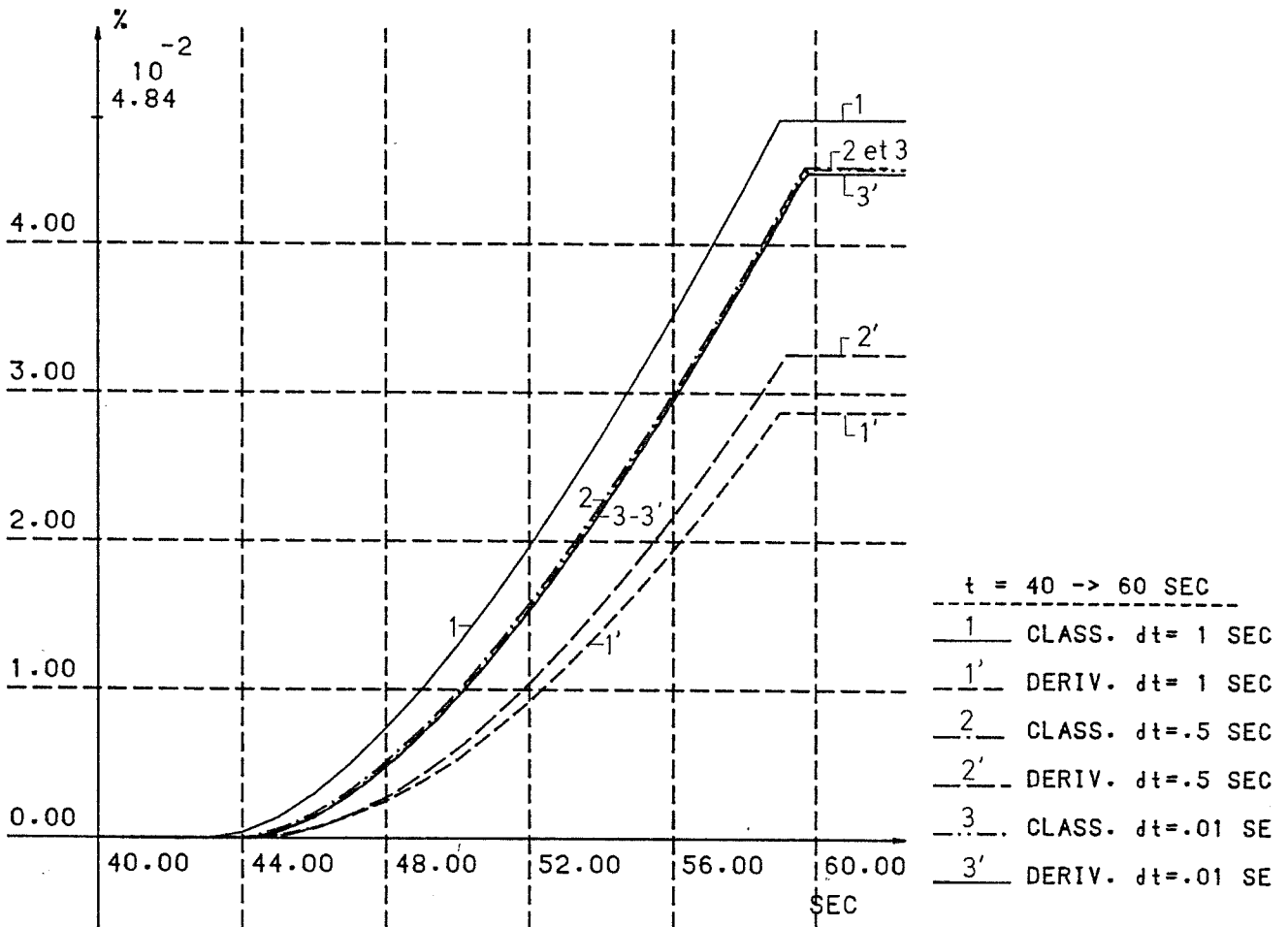


Figure 3.4.

Simulation d'une transformation bainitique incomplète, dt signifie pas de temps

3.2.2.3. Précisions relatives à l'application du modèle.

Si les grandes lignes du modèle ont été présentées au paragraphe précédent, son application pratique requiert cependant certaines précisions sur les sujets suivants :

- comment obtenir les paramètres n et b de la loi de JOHNSON-MEHL-AVRAMI (3.1) ?
- quelle est l'origine des temps utilisés dans cette loi ?
- où trouver le paramètre y_{\max} en cas de transformation incomplète ?
- comment traduire la transition qui existe entre une transformation proeutectoïde et une transformation perlitique ?

Nous adoptons les réponses proposées par FERNANDES (CP30) à ces différentes questions. Même s'il s'agit là de problèmes classiques pour des métallurgistes, nous estimons nécessaire de les présenter dans le cadre de cette thèse, passerelle entre le travail des métallurgistes et celui des ingénieurs numériques.

a. Coefficients n et b.

Dans un repère logarithmique adéquat, ces deux coefficients définissent une droite : "la droite d'AVRAMI". En effet, on peut transformer la loi de JOHNSON-MEHL-AVRAMI :

$$y = 1 - \exp(-b t^n) \tag{3.2}$$

et obtenir la relation suivante :

$$\ln\left(\ln\frac{1}{1-y}\right) = \ln b + n \ln t \tag{3.13}$$

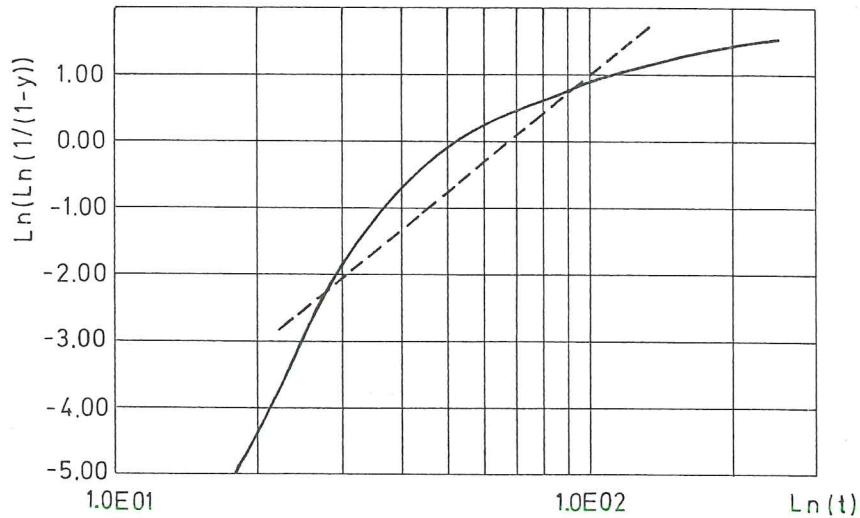


Figure 3.5. - Cinétique de la transformation isotherme à 480° de l'acier 42CD4 représentée sur un repère $\ln(\ln(1/(1-y))) - \ln(t)$. La ligne pointillée est la droite d'AVRAMI passant par les points 10% et 90%.

En réalité, les transformations isothermes expérimentales exprimées dans un repère $\ln(\ln(1/(1-y)))$ et $\ln t$ ne sont pas linéaires et les coefficients n et b sont variables au cours du temps. AVRAMI propose d'ailleurs différentes définitions de ces coefficients en fonction du taux de germination \dot{N} et de la vitesse de croissance G (CP*30, p. 13). Cependant, par simplicité, on adopte souvent des coefficients n et b constants et on

remplace la courbe exprimant la cinétique de transformation par une droite appelée droite d'AVRAMI. Cette droite peut être obtenue de deux façons :

- (1) adaptation d'une droite aux points expérimentaux par la méthode des moindres carrés ;
- (2) choix de 2 points par lesquels on fait passer la droite.

La méthode (1) n'a pas été retenue car elle requiert la connaissance d'un nombre de points expérimentaux plus important que la méthode (2). De plus, la méthode (2) permet de choisir la partie de la courbe que l'on désire modéliser au mieux. En effet, il est préférable d'avoir une bonne modélisation dans le domaine où la transformation avance rapidement (ce qui est le cas entre 10% et 90%) plutôt qu'en début ou fin de transformation, où l'erreur de modélisation n'aura pas de grandes conséquences sur le pourcentage de phase formée.

Dans une étude sur l'acier 42CD4, STOUVENOT a confirmé (CP*13) qu'une droite passant par les points 10% et 90% de transformation permettait une meilleure concordance avec la cinématique expérimentale que l'utilisation des points extrêmes de 1% à 99% de transformation. Une seconde justification de cette meilleure concordance réside dans une plus grande incertitude concernant la détermination des points de 1% et 99% de transformation.

b. Origine des temps.

Puisque notre calcul sépare le temps de germination, calculé par la somme de SCHEIL (3.2), et le temps de croissance, l'origine des temps pour le calcul de la croissance peut être placée en fin de période d'incubation. Le fait de prendre n et b constants au cours de la cinétique est un autre argument en faveur de cette origine des temps au début de la croissance. En effet, dans la réalité, n et b sont variables, ils dépendent du taux de germination (\dot{N}) et de la vitesse de croissance G qui varient fortement au cours de la transformation. Pendant l'incubation, les valeurs de \dot{N} varient très fortement et G passe d'une valeur nulle à une valeur finie. Par conséquent, les paramètres b et n intègrent des variations de \dot{N} et G moins importantes si l'origine des temps est placée après l'incubation. Les figures 3.6 et 3.7 montrent ces diverses variations.

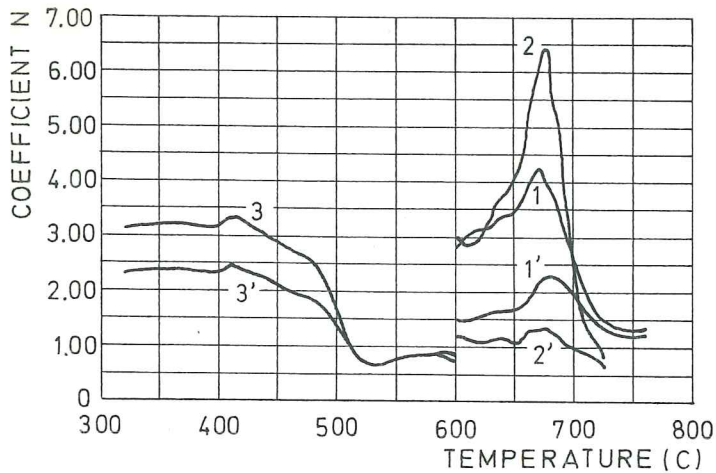


Figure 3.6.- Variation de n en fonction de la température, acier 42CD4 (d'après CP30)

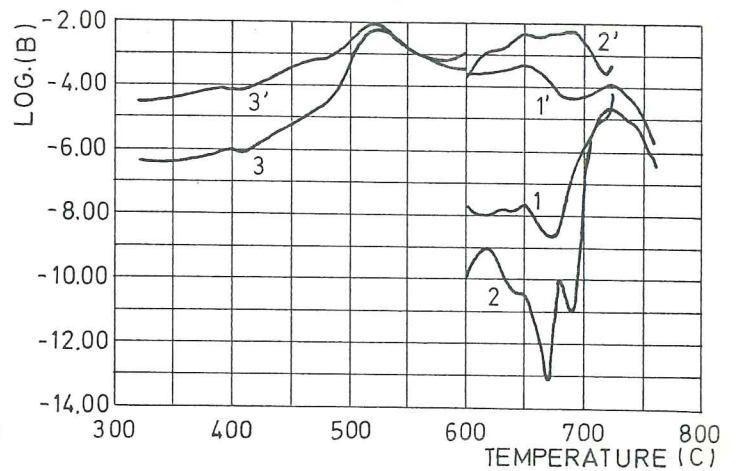


Figure 3.7.- Variation du $\log b$ en fonction de la température, acier 42CD4 (d'après CP30).

- 1 courbe concernant la transformation proeutectoïde
- 2 courbe concernant la transformation perlitique
- 3 courbe concernant la transformation bainitique
- 1, 2, 3 origine des temps au début du palier isotherme (période d'incubation comprise)
- 1', 2', 3' origine des temps au début de la croissance.

c. Paramètre y_{\max} .

Selon la composition de l'acier, certaines transformations resteront toujours incomplètes. La proportion maximale de phase formée y_{\max} dépend de la température ; elle peut être obtenue en mesurant les quantités de phases présentes à la fin de chaque maintien isotherme. Cette valeur $y_{\max}(T)$ peut aussi être obtenue à partir du diagramme d'équilibre Fer-Carbone pour le constituant proeutectoïde par application de la règle des segments (chapitre 2, section 2). Cette méthode ne pose aucun problème pour les températures supérieures à A_1 . Par contre, pour les températures inférieures à A_1 , elle implique de prolonger les lignes A_3 ou A_{cm} sous A_1 selon la notion d'extrapolation d'HULTGREN (figure 3.8). Dans ce domaine de températures, des points expérimentaux permettent de mieux situer les prolongements des lignes A_3 et A_{cm} .

Dans les cas de transformations incomplètes, la partie intéressante de la cinétique à modéliser n'est plus nécessairement l'intervalle de 10% à 90% de phase formée. On

choisira de faire passer la droite d'AVRAMI par les points correspondant à $10.y_{\max}$ et $90.y_{\max}$ % de transformation. Les coefficients n et b déterminés par cette droite permettront de modéliser au mieux la partie intéressante de la courbe.

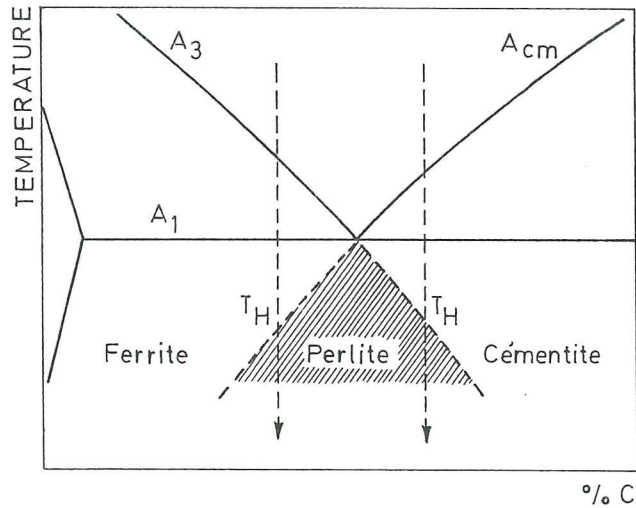


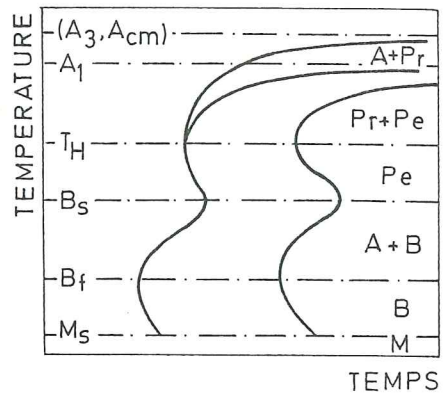
Figure 3.8. - Représentation schématique de l'extrapolation des lignes A_3 et A_{cm} du diagramme d'équilibre Fe - C (extrapolation d'HULTGREN).

d. Transformation proeutectoïde suivie d'une transformation perlitique.

Les températures supérieures à M_s et inférieures à A_3 ou A_{cm} concernent les transformations par diffusion. Pour un refroidissement continu, lorsque la germination est terminée, la température permet généralement de déterminer quelle phase est en formation : proeutectoïde, perlite, ou bainite (figure 3.9). Cependant dans le domaine proeutectoïde-perlite ($A_1 > T > T_H$), la transformation perlitique est précédée de la précipitation proeutectoïde et la température seule ne permet pas de déterminer la phase formée (fig. 3.10).

A = austénite
 Pr = proeutectoïde
 Pe = perlite
 B = bainite
 M = martensite

A_3, A_{cm}, A_1, M_s sont définis dans les rappels métallurgiques (2.2).



- T_H : température en-dessous de laquelle la transformation perlitique n'est plus précédée d'une précipitation d'un constituant proeutectoïde ;
- B_S : plus basse température au-dessus de laquelle la bainite ne peut se former ;
- B_f : plus basse température au-dessus de laquelle la transformation bainitique est incomplète.

Figure 3.9.- Courbes TTT de début et de fin de transformation.

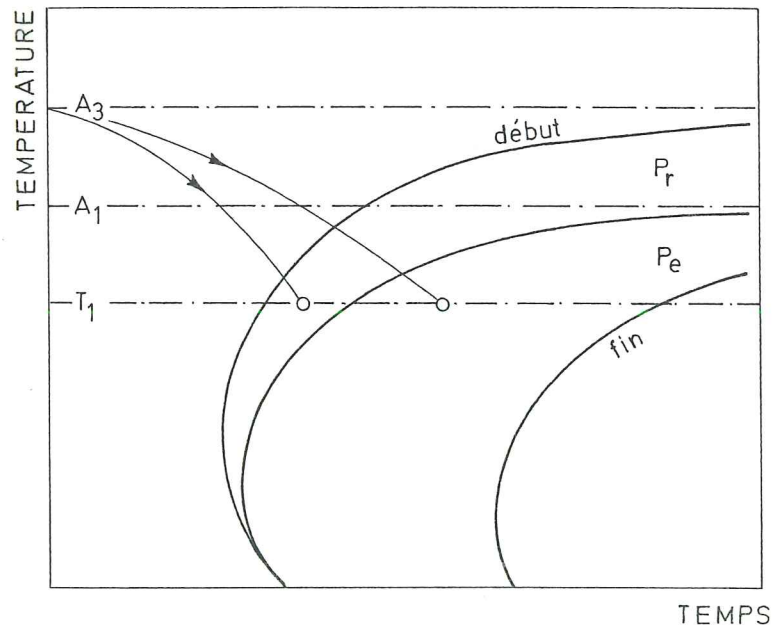


Figure 3.10.- Représentation schématisée d'un diagramme CCT sur lequel on peut voir deux lois de refroidissement pour lesquelles le seul constituant qui est en train de se former à la température T_1 est dans un cas le proeutectoïde et dans l'autre la perlite.

La prise en compte de transformations incomplètes permet de traiter ce problème sans difficulté.

Une fois les quantités maximales $y_{\max 1}$ et $y_{\max 2}$ de proeutectoïde et de perlite connues pour quelques températures, on détermine les temps correspondant à $10.y_{\max 1}$, $10.y_{\max 2}$, $90.y_{\max 1}$ et $90.y_{\max 2}$ % de transformation pour ces différentes températures. On peut ainsi calculer les coefficients $n(T)$ et $b(T)$ permettant de modéliser au mieux ces cinétiques incomplètes (voir paragraphes a et c ci-dessus). Le temps de début de transformation perlitique est difficile à déterminer dans cette plage de température. Aussi, par simplification, on le prend égal à la moyenne des temps de formation de $90.y_{\max 1}$ % de proeutectoïde et $10.y_{\max 2}$ % de perlite.

Le calcul se déroule alors de la façon suivante. Une fois la germination terminée, la croissance du constituant proeutectoïde démarre. Si pour une température T , le temps fictif (3.8) correspondant au pourcentage de proeutectoïde formé dépasse le temps de début de la perlite, on arrête la formation de proeutectoïde et on débute la croissance de la perlite.

Dans la réalité, il subsiste un domaine de transition relativement perturbé entre la formation exclusive de proeutectoïde et la formation exclusive de perlite. La décomposition de ce phénomène global en deux cinétiques partielles (proeutectoïde et perlite) a cependant permis de modéliser la réalité de façon satisfaisante.

3.3. TRANSFORMATION MARTENSITIQUE.

Cette transformation est plus facile à modéliser dans la mesure où elle est indépendante de la vitesse de refroidissement. La formulation la plus souvent utilisée est celle de KOISTINEN et MARBURGER qui conduit à une très bonne corrélation calcul-expérience (CP2, CP5, CP7, CP10, CP13, CP30, CP33, CP34) :

$$y_M = [1 - \exp(-\alpha(M_s - T))] \cdot y_\gamma \quad (3.14)$$

avec M_s = température de début de transformation martensitique,

y_M = proportion de martensite formée,

y_γ = proportion d'austénite avant transformation martensitique.

Le paramètre α est une constante pour chaque acier, qui peut être déterminée à partir de la teneur en austénite résiduelle à la température ambiante, ou par la représentation de la cinétique expérimentale sur un repère $\ln(1 - \frac{y}{M}) - (M_S - T)$. La pente de la droite adaptée aux points expérimentaux est alors égale à α . Ce coefficient α vaut 0,011 pour un grand nombre d'aciers.

3.4. MODELE THERMIQUE.

Grâce aux développements introduits par CHARLIER (EF4) et BOURDOUXHE (EF6, EF15, EF16), le code LAGAMINE peut traiter une analyse thermique non linéaire. Des éléments finis de solide bi ou tri-dimensionnels ainsi que des éléments de surface permettent de traiter les échanges thermiques de conduction, convection et rayonnement.

Rappelons les différentes équations qui modélisent ces phénomènes et soulignons les développements du modèle nécessaires pour prendre en compte les changements de phase.

L'équilibre thermique à l'intérieur d'un solide isotrope Ω est traduit par l'équation classique de conduction (EF4) :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) + r = \rho c \frac{\partial T}{\partial t} \quad (3.15)$$

T = température (K)

x, y, z = coordonnées cartésiennes

k = conductivité thermique (W / m K)

ρc = capacité calorifique (J / m³ K)

avec ρ masse volumique (kg / m³)

c chaleur spécifique (J / kg K)

r = taux de production de chaleur interne volumique (W / m³)

t = temps (sec).

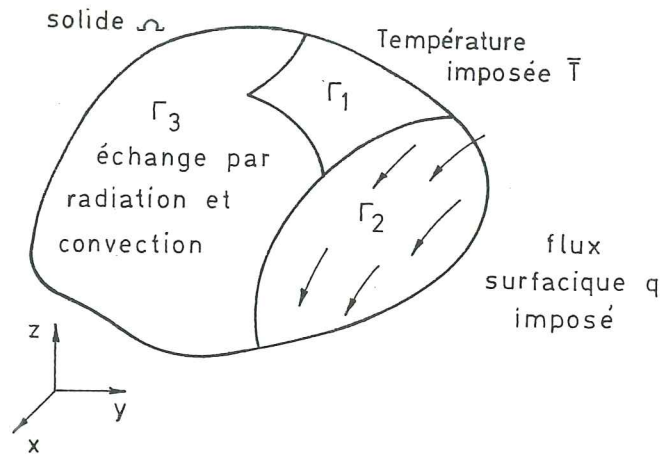


Figure 3.11.

Subdivision de la surface du solide Ω selon les conditions thermiques imposées.

A l'équation (3.15), il faut adjoindre les conditions aux limites suivantes :

$$\begin{aligned}
 T &= \bar{T} \text{ sur } \Gamma_1 \\
 k \left(\frac{\partial T}{\partial x} l_x + \frac{\partial T}{\partial y} l_y + \frac{\partial T}{\partial z} l_z \right) + q &= 0 \text{ sur } \Gamma_2 \\
 k \left(\frac{\partial T}{\partial x} l_x + \frac{\partial T}{\partial y} l_y + \frac{\partial T}{\partial z} l_z \right) + q_c + q_r &= 0 \text{ sur } \Gamma_3
 \end{aligned} \tag{3.16}$$

où l_x, l_y, l_z = cosinus directeurs de la normale extérieure à la surface du solide

q_c = flux de chaleur évacué par unité de surface par convection (W / m^2),

$$\text{soit : } q_c = \alpha_c (T - T_{ac}) \tag{3.17}$$

α_c = coefficient de transfert convectif ($W / m^2 K$)

T_{ac} = température d'équilibre pour laquelle aucun échange convectif n'a lieu

q_r = flux de chaleur évacué par unité de surface par radiation (W / m^2),

$$\text{soit } q_r = \varepsilon \sigma (T^4 - T_{ar}^4) = \alpha_r (T - T_{ar}) \tag{3.18.}$$

ε = émissivité relative globale prenant en compte l'émissivité et la géométrie des surfaces ;

σ = constante de BOLTZMAN ($W / m^2 K^4$)

T_{ar} = température d'équilibre pour laquelle aucun échange radiatif n'a lieu

$$\alpha_r = \varepsilon \sigma (T^2 + T_{ar}^2) (T + T_{ar}).$$

La présence des différentes phases de l'acier a évidemment une influence sur les différents coefficients définis dans ces équations. Les coefficients k , ρ , c sont obtenus par une loi de mélange :

$$X = \sum_{k=1}^m y_k X_k \quad (3.19)$$

X = caractéristique cherchée (k , ρ ou c)

y_k = proportion de la phase k

$k = 1$ austénite $k = 4$ perlite

$k = 2$ ferrite $k = 5$ bainite

$k = 3$ cémentite $k = 6$ martensite

X_k = valeur de la caractéristique X pour la phase k , fonction uniquement de la température.

Le coefficient de transfert convectif α_c pourrait être défini de façon analogue. Cependant dans l'état actuel des connaissances, ce coefficient est défini de façon globale en fonction de la température $\alpha_c(T)$.

Quant au coefficient d'émissivité globale ε , il est calculé en début de simulation selon l'émissivité et la géométrie des surfaces.

Le taux de production de chaleur interne r est directement relié aux transformations :

$$r = \sum_{k=2}^m \dot{y}_k H_k(T) \quad (3.20)$$

$H_k(T)$ = chaleur latente ou enthalpie de transformation de l'austénite en la phase y_k à la température T (J/m^3)

\dot{Y}_k = dérivée de la fraction de phase k en fonction du temps (s^{-1}).

La présence du terme de régime transitoire $\rho c \partial T / \partial t$ a pour conséquence de rendre inutilisable les méthodes entièrement basées sur les principes variationnels. On se tourne donc vers la méthode des résidus pondérés. La première étape consiste à réaliser la discrétisation de l'équation dans l'espace en un moment quelconque t . Remarquons que pour un problème couplé thermomécanique, se placer en un temps t fixé entraîne une géométrie fixe.

L'équilibre thermique sera vérifié au sens des éléments finis, si pour les N noeuds définissant le solide Ω discrétisé, on vérifie l'équation (TCP8) :

$$K_{ij} T_j + C_{ij} \dot{T}_j + F_i = 0 \quad (3.21)$$

avec T_j = température du noeud j
 \dot{T}_j = dérivée par rapport au temps de T_j
 i, j = 1, N

$$K_{ij} = \sum \int_{\Omega_e} k \left(\frac{\partial \phi_i}{\partial x} \frac{\partial \phi_j}{\partial x} + \frac{\partial \phi_i}{\partial y} \frac{\partial \phi_j}{\partial y} + \frac{\partial \phi_i}{\partial z} \frac{\partial \phi_j}{\partial z} \right) d\Omega \quad (3.22a)$$

$$+ \sum \int_{\Gamma_e} (\alpha_c + \alpha_r) \phi_i \phi_j d\Gamma \quad (\text{matrice de conduction})$$

$$C_{ij} = \sum \int_{\Omega_e} \rho c \phi_i \phi_j d\Omega \quad (\text{matrice de capacité}) \quad (3.22b)$$

$$F_i = \sum \int_{\Omega_e} \phi_i r d\Omega + \sum \int_{\Gamma_e} \phi_i (q - \alpha_c T_{ac} - \alpha_r T_{ar}) d\Gamma \quad (3.22c)$$

où Ω_e = région définie par un élément fini
 Γ_e = élément de surface du solide où des conditions du type convection radiation ou encore flux imposé sont définies
 ϕ_i = fonction d'interpolation relative au noeud i (elle dépend du type d'élément fini utilisé).

L'intégration de cette équation au cours du temps constitue la seconde étape. Elle sera approfondie au chapitre 4.

Dans ce modèle thermique, les éléments de surface qui traduisent le flux convectif ou radiatif ne sont pas affectés par les changements de phase. Par contre, l'élément de solide doit être développé pour y introduire le modèle métallurgique décrit en 3.2 et 3.3 afin de déterminer les proportions y_k et leur dérivée temporelle. Ce travail a été réalisé dans un élément isoparamétrique bidimensionnel du second degré (fig. 3.10). Cet élément peut être utilisé dans le cadre d'une analyse thermique bidimensionnelle classique, d'une analyse axisymétrique ou encore d'une analyse en état plan généralisé (des précisions seront fournies à ce sujet au chapitre 6).

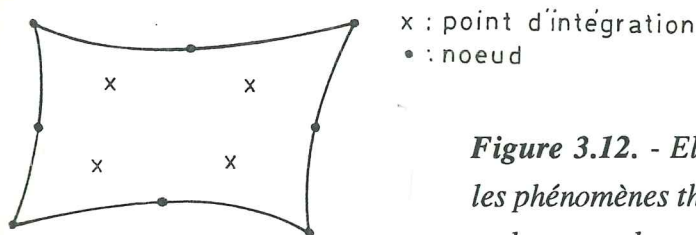


Figure 3.12. - *Elément PL8TM qui intègre les phénomènes thermiques, métallurgiques et leur couplage*

Le calcul des proportions de phases y_k et des flux thermiques est réalisé aux points d'intégration alors que la température est obtenue aux noeuds.

Ce modèle est évidemment plus complet que celui de FERNANDES (CP30) qui traite uniquement le cas d'un cylindre infini, avec un flux imposé en surface ou un échange convectif. L'équation à résoudre est réduite à une direction :

$$k \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{1}{x} \frac{\partial T}{\partial x} \right) + r = \rho c \dot{T}$$

avec x = coordonnée spatiale le long du rayon.

Les conditions aux limites sont :

- soit un flux imposé :

$$-k \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_{x=R} = q$$

où R : le rayon du cylindre ;

q : densité de flux de chaleur surfacique

- soit un flux convectif :

$$-k \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_{x=R} = \alpha_c (T - T_{ac})$$

FERNANDES s'est tourné vers la méthode aux différences finies pour résoudre ce problème.

3.5. TESTS DE VALIDATION.

Les tests ont été réalisés en deux étapes :

- la validation du modèle par FERNANDES qui compare ce que son programme prédit avec des expériences (section a),
- la validation de l'implémentation correcte du modèle dans le LAGAMINE (élément PL8TM) par comparaison de simulations faites avec le programme de FERNANDES et le nôtre dans le cas de cylindres (section b).

a. Validation du modèle.

FERNANDES a réalisé la comparaison expérience-simulation pour une série de refroidissements de cylindres de différents diamètres et différentes compositions (CP30, CP5, CP6).

Les tests relatifs à des cylindres épais présentent de fortes différences entre la simulation numérique et l'expérience. En effet, pour les cylindres épais, la sollicitation thermique présente des gradients de température importants selon le rayon et entraîne un champ de contraintes mécaniques non négligeable. Il en résulte qu'une analyse thermique couplée avec la métallurgie ne suffit plus, les interactions mécaniques doivent être prises en compte dans la modélisation. Les chapitres 5 et 6 traitent cette analyse plus complète.

Pour des cylindres de faible diamètre, le champ thermique est quasi homogène et les sollicitations mécaniques qui en résultent sont négligeables. Le modèle thermique métallurgique permet donc la simulation de ces refroidissements. FERNANDES a traité le cas de l'acier eutectoïde XC80 (CP5), de l'acier 42CD4 (CP6) et de l'acier 90MCV8 (CP30). Les figures 3.13 et 3.14 présentent succinctement les résultats qu'il a obtenus pour certains tests relatifs à l'acier XC80 et 42CD4.

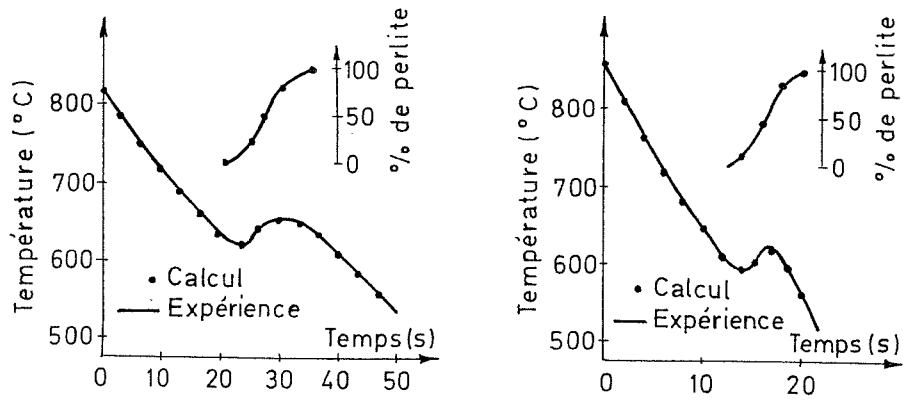


Figure 3.13.- Comparaison entre les lois de refroidissement et les cinétiques de transformation expérimentales et calculées obtenues sur des éprouvettes dilatométriques en acier XC80 (diamètre 4mm), d'après CP5.

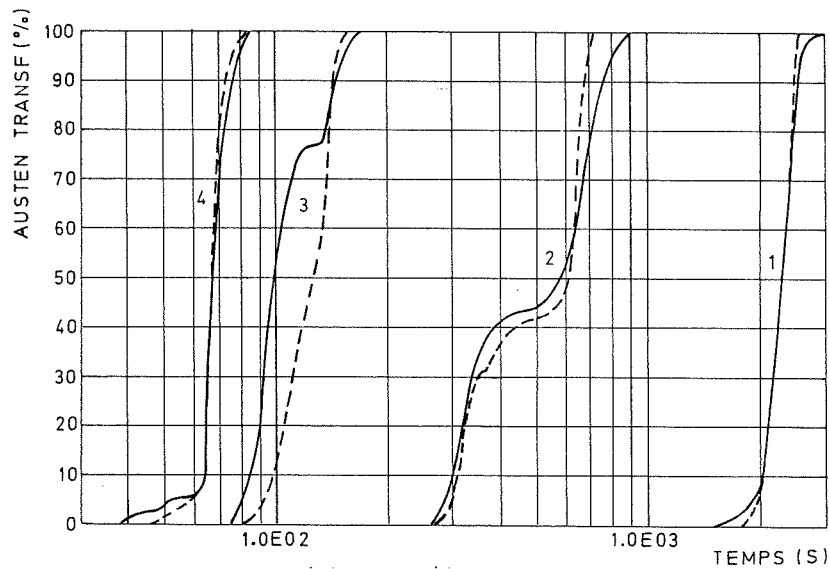


Figure 3.14.- — cinétique expérimentale ——— cinétique calculée pour des refroidissements à vitesse constante réalisés sur des éprouvettes dilatométriques en acier 42CD4 (diamètre 4mm).

Courbe	Vitesse de refroidissement °C/s	STRUCTURE FINALE	
		Expérience	Calcul
1	0,0661	100% (ferrite + perlite)	50% ferrite + 50% perlite
2	0,559	43% (ferrite + perlite) + 57% bainite	32% ferrite + 9% perlite + 59% bainite
3	4,04	75% bainite + 25% martensite	60% bainite + 40% martensite
4	8,42	6% bainite + 94% martensite	8% bainite + 92% martensite

(d'après CP6)

Au vu de tous les tests qu'il a réalisés, FERNANDES définit les conditions de validité suivantes pour son modèle (CP30) :

- du point de vue thermique, on retrouve les lois de refroidissement expérimentales par calcul, l'accord expérience-calcul est donc très bon ;
- du point de vue métallurgique, la qualité des résultats obtenus dépend de la transformation simulée :
 - les transformations perlitique et ferrito-perlitique sont très bien décrites par le calcul, surtout lorsqu'elles sont les seules transformations observées ;
 - la transformation bainitique est décrite de façon satisfaisante dans le cas de l'acier 90MCV8 (CP30) et généralement mal représentée pour la plus grande partie des cas traités avec l'acier 42CD4 (CP6) ;
 - la transformation martensitique est bien décrite par la loi de KOISTINE-MARGURGER.

En pratique, la plus grande partie des cas où l'accord n'est pas très bon concerne une transformation de phase qui est précédée par la formation à plus haute température d'une quantité importante d'un autre constituant. Comme nous l'avons expliqué au paragraphe 3.2.2.2.A, le principe d'additivité appliqué dans la simulation n'est plus respecté dans ce cas.

Une autre source d'erreur provient de l'hypothèse de coefficients constants n et b dans la loi de JOHNSON-MEHL-AVRAMI (3.2.2.3.a). L'importance de cette erreur est plus grande dans le cas de la bainite pour laquelle le coefficient n varie plus fortement que dans les autres transformations (figure 3.5).

b. Validation de l'analyse thermique-métallurgique du LAGAMINE.

La partie thermique non linéaire du code LAGAMINE avait déjà été testée par rapport au programme SAMCEF (EF17) ainsi que grâce à la simulation de refroidissements expérimentaux (EF18).

Notre tâche s'est donc limitée à vérifier si la notion de changement de phase était bien prise en compte. La transformation perlitique fut la première testée grâce à la simulation du refroidissement d'une éprouvette dilatométrique (diamètre 4mm) en acier XC80. Toutes les données concernant cet acier eutectoïde, sont disponibles en CP30.

L'expérience simulée consiste en un refroidissement de vitesse moyenne de 13° C/s mesurée entre la température d'austénisation et le début de la transformation. A partir de la loi de

refroidissement du centre de l'éprouvette et d'une méthode appelée "*calcul inverse*" (voir CP30 Annexe A), FERNANDES calcule le flux de chaleur extrait à la surface. Cette information définit la condition aux limites à appliquer au modèle thermique, métallurgique. Les différentes discrétisations spatiales utilisées par le programme de FERNANDES et le nôtre sont représentées (figure 3.15).

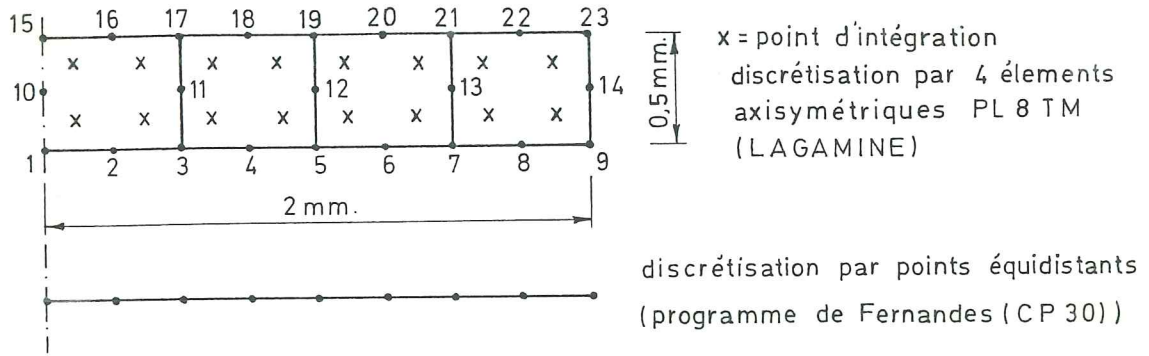


Figure 3.15.- Discrétisation spatiale du test sur l'acier XC80

Les figures 3.16 et 3.17 montrent la très bonne concordance entre la loi de refroidissement et la cinétique de transformation fournies par les deux programmes.

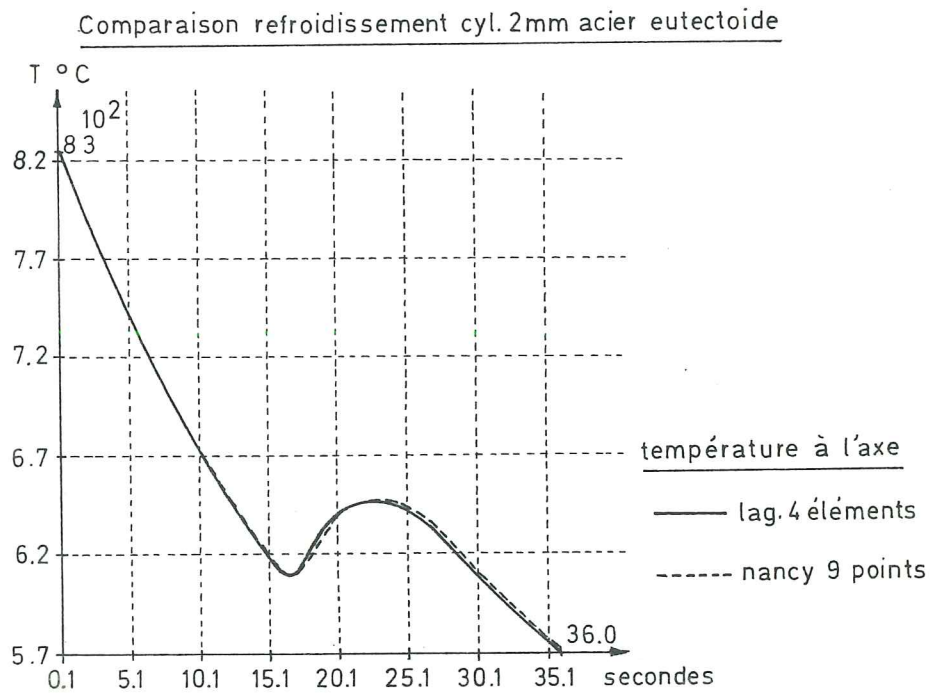


Figure 3.16.- Comparaison de la loi de refroidissement du test sur l'acier XC80.

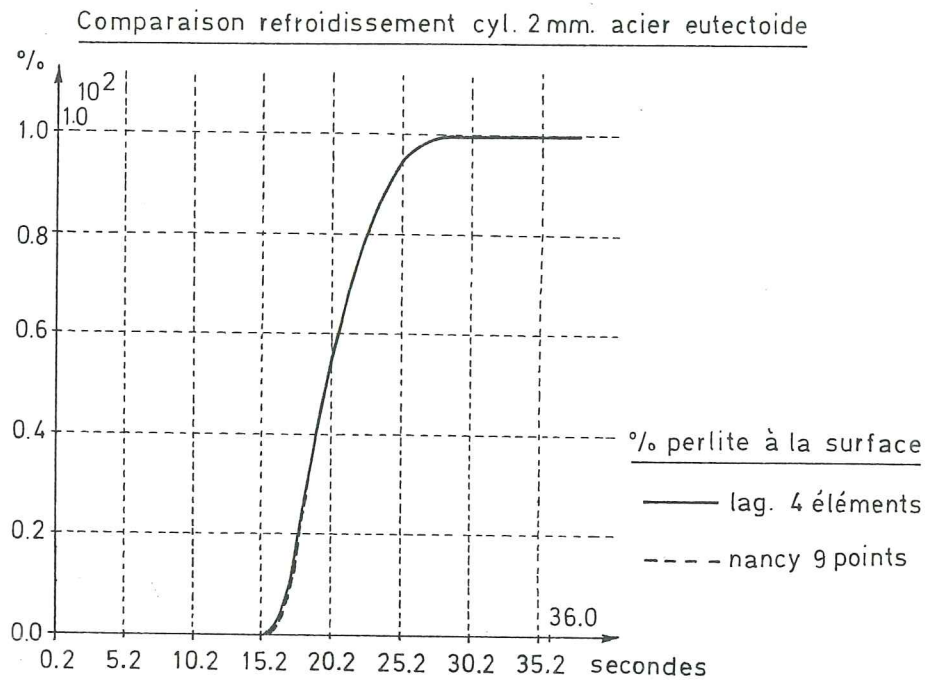


Figure 3.17.

Comparaison de la cinétique de transformation du test sur l'acier XC80.

Un second test concernant l'acier 42CD4 a permis de tester la formation de ferrite, de perlite et de bainite. Un cylindre de 2mm soumis à un flux surfacique de 3750 W / m^2 présente en effet ces trois transformations. La discrétisation spatiale adoptée est la même que précédemment (fig. 3.15) et les résultats montrent à nouveau la bonne concordance des deux programmes (fig. 3.18 et 3.19). Nous vous renvoyons à nouveau à la référence CP30 pour une description détaillée des caractéristiques de l'acier 42CD4.

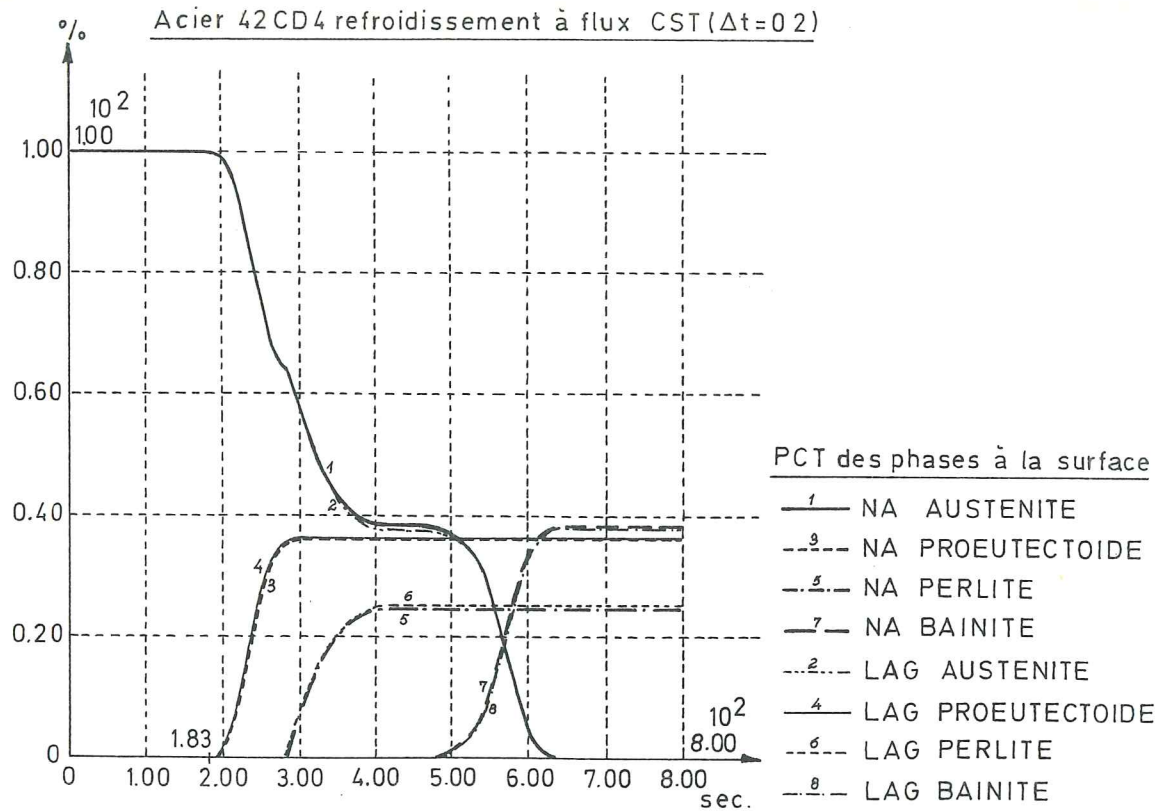


Figure 3.18.- Cinétique des transformations (NA indique les résultats du programme de FERNANDES ET LAG ceux du code LAGAMINE)

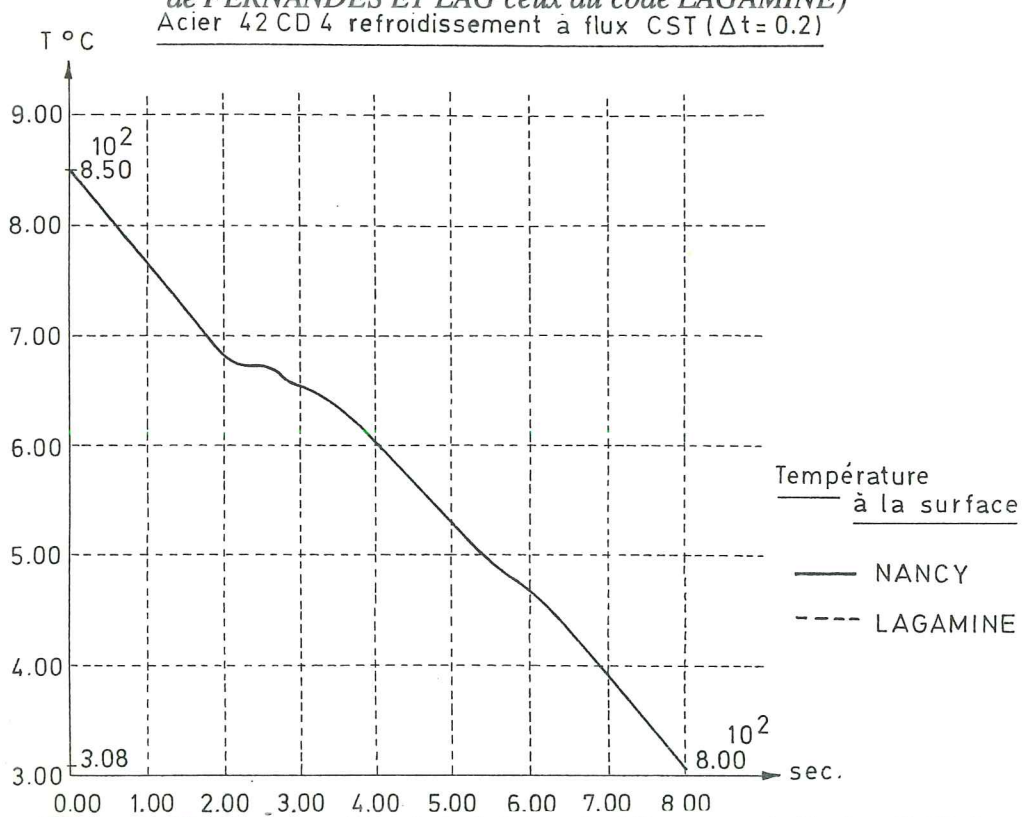


Figure 3.19.- Comparaison de la loi de refroidissement de l'acier 42CD4 (cylindre de 4 mm de diamètre soumis à un flux en surface de $3750 \text{ W / m}^2 \text{ K}$)

La formation de cémentite n'a pas été testée. Cependant, du point de vue du code de calcul, seule la notion de phase proeutectoïde est définie ; qu'il s'agisse de ferrite ou de cémentite n'a aucune influence sur la méthode de calcul, seules les données sont modifiées.

La transformation martensitique a été testée par comparaison avec le code de FERNANDES. A nouveau, les deux programmes ont donné des courbes de refroidissement et des cinétiques de transformation presque confondues.

3.6. PREVISION DE LA DURETE.

Nous avons également introduit le calcul de la dureté Hv suggéré par FERNANDES (CP30) aux points d'intégration de l'élément PL8TM :

$$Hv = \sum_j \left(\sum_k \Delta y_{jk} Hv_k \right)$$

- où j : indice de somme sur les différents paliers isothermes constituant la discrétisation de la loi de refroidissement continu,
k : indice relatif aux différentes phases (austénite, ferrite, ...),
 Δy_{jk} : incrément du pourcentage de la phase k durant le palier isotherme j,
 Hv_k : dureté du constituant k à la température considérée, la variation de Hv_k avec la température est décrite par une fonction polynomiale

$$Hv_k = C_{k1} + C_{k2} T + C_{k3} T^2$$

du second degré par exemple.

3.7. CONCLUSIONS.

Dans les cas où les interactions avec les phénomènes mécaniques peuvent être négligées (pièces non massives), le modèle thermique métallurgique décrit dans ce chapitre permet de simuler le refroidissement d'une pièce métallique. Il fournit en tout instant du refroidissement la température et le pourcentage des phases présentes. La dureté du matériau obtenu est évaluée.

L'utilisation de la méthode des éléments finis autorise une très grande liberté quant à la géométrie des pièces traitées. L'extension des développements réalisés dans l'élément PL8TM (bidimensionnel) à un élément du type brique tridimensionnel ne pose aucun problème. Par ailleurs, l'utilisation d'éléments finis de rayonnement et de convection permet de se rapprocher des conditions réelles de refroidissement.