Modèles de comportement métallurgique des aciers

Résumé :

Ce document présente les modèles de comportement métallurgique au chauffage et au refroidissement permettant de décrire les transformations structurales des aciers lors de cycles thermiques excédant des températures de l'ordre de $800\,°C$.

Pour les deux types de transformations (au chauffage et au refroidissement) une description détaillée des modèles disponibles est faite et des méthodes d'identification sont données.

Enfin, on présente le modèle de calcul de dureté associé à la métallurgie.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

Table des matières

1 Introduction....3
2 Modèle de comportement métallurgique au refroidissement....4
2.1 Introduction....4
2.2 Hypothèses....5
2.3 Choix des variables d'état....6
3 Identification et mise en œuvre du modèle au refroidissement....9
3.1 Principe....9
3.2 Intégration des données expérimentales au modèle....9
3.2.1 Principe....9
3.2.2 Règles d'interprétation des diagrammes TRC....10
3.2.3 Effet de la taille de grain austénitique sur la cinétique des transformations au refroidissement....12
3.2.4 Saisie des diagrammes TRC....13
3.3 Évaluation de la fonction d'évolution à partir des données expérimentales....14
3.3.1 Évaluation de la fonction d'évolution pour les histoires expérimentales....14
3.3.2 Calcul de l'avancement des transformations pour un état quelconque....14
4 Modèle de comportement métallurgique au chauffage....17
4.1 Hypothèses....17
4.2 Forme du modèle retenu....18
4.3 Intégration de l'équation d'évolution....19
4.4 Évolution de la taille de grain austénitique au chauffage....19
4.4.1 Traitement numérique....20
4.5 Sens de l'évolution métallurgique....20
5 Identification du modèle au chauffage....21
5.1 Détermination de la fonction Zeq (T)....21
5.2 Détermination de la fonction TAU (T)....21
5.2.1 Identification de TAU_3 à partir de AC'3....22
5.2.2 Identification de TAU_1 à partir de AC'1....22
6 Modèle de calcul de dureté....23
7 Bibliographie....24
8 Description des versions du document....24

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

1 Introduction

Les opérations d'assemblage et de traitement thermomécanique que subissent les composants métalliques des centrales REP, peuvent engendrer, dans les matériaux qui les constituent, des champs de contraintes, dits résiduels, qui existent avant tout chargement de service. Les transformations métallurgiques et principalement les transformations structurales sont une cause importante de ces champs de contraintes car elles modifient le comportement (en modifiant les caractéristiques physiques) et engendrent des sollicitations thermo-mécaniques au sein des matériaux qui les subissent (chaleurs latentes, déformations dues aux différences de masse volumique des différentes phases métallurgiques).

Ces transformations structurales sont dues pour l'essentiel à la succession d'un chauffage (souvent au-delà de $800\,°C$) et d'un refroidissement plus ou moins rapide des pièces lors de leur fabrication. Ces "cycles" thermiques peuvent être voulus (cas des traitements thermiques) ou "subis" (cas du soudage). Dans tous les cas, ils sont très variables d'un point à un autre de la pièce.

Le présent document concerne la modélisation de ces transformations structurales au chauffage et au refroidissement pour les aciers faiblement alliés et ce, à une échelle qui, tout en restant "raisonnable" pour le métallurgiste, soit facilement utilisable par le mécanicien.

Ce type de modélisation est réalisable au sein de *Code_Aster* pour l'ensemble des éléments (PLAN, AXIS, 3D) du PHENOMENE "THERMIQUE" par l'utilisation de l'opérateur CALC_META en « post-traitement » d'un calcul d'évolution thermique. La relation de comportement dédiée à l'acier, par différence avec celle dédiée aux zircaloys, à utiliser sous le mot-clé COMPORTEMENT de l'opérateur est la relation « ACIER ». Pour la définition du comportement métallurgique de l'acier le renseignement de la commande DEFI_TRC et du mot clé facteur META_ACIER sous la commande DEFI_MATERIAU est nécessaire. Enfin, la définition de l'état métallurgique initial est réalisable à l'aide de la commande CREA_CHAMP, sous le mot clé facteur ETAT_INIT de l'opérateur CALC_META. Le calcul de métallurgie est nécessaire à la réalisation de calculs mécaniques qui tiennent compte des conséquences mécaniques de ces phénomènes métallurgiques [R4.04.02].

Les modèles présentés (au chauffage et au refroidissement) sont formulés dans le cadre des relations de comportement à variables internes (ou mémoratrices), et autorisent une identification simple et rapide fondée sur les diagrammes expérimentaux (diagrammes TRC de Transformations en Refroidissement Continu). Le choix des variables et les formes des lois d'évolution retenues sont donnés et la description de la mise en œuvre des modèles (méthode d'identification) est également présentée.

Enfin, on présente le modèle de calcul de dureté qui peut si nécessaire venir compléter les calculs métallurgiques.

Note :

- *Les notions métallurgiques de base nécessaires à la compréhension du problème général et de la démarche adoptée sont rassemblées en [bib1] et [bib2] où l'on trouvera également une étude bibliographique du problème.*
- *Ce document est extrait de [bib3] et [bib4] où l'on fait une présentation plus détaillée des modèles et de quelques éléments de validation. Des éléments de validation plus complets peuvent également être trouvés en [bib5] pour le modèle du refroidissement et en [bib14] pour le modèle de dureté.*

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

2 Modèle de comportement métallurgique au refroidissement

2.1 Introduction

Sur la base de l'essai de dilatométrie [Figure 2.1-a], la seule connaissance, à un instant donné, de la température d'un acier subissant des transformations structurales ne permet pas de connaître son état de déformation. En revanche, le comportement d'un tel acier semble pouvoir être décrit dans le cadre des modèles de comportement à variables mémoratrices ou internes [bib6]. En effet, si l'on introduit :

- $Z=\left(Z_i ; i=1,p\right)$ le p -uplet des proportions des constituants métallurgiques possibles présents en un point M et à un instant t donnés (ici, $Z_1+Z_2+Z_3+Z_4$ seront les proportions de ferrite, perlite, bainite et martensite et la proportion d'austénite en M sera égale à : $1-(Z_1+Z_2+Z_3+Z_4)$) ;

- $\varepsilon_\gamma^{th}(T)=\alpha_\gamma\left(T-T^\gamma\right)$ et $\varepsilon_\alpha^{th}(T)=\alpha_\alpha\left(T-T^\gamma\right)+\Delta\varepsilon_{\alpha\gamma}\left(T^\gamma\right)$ les déformations thermiques de l'austénite et des phases ferritique, perlitique, bainitique et martensitique ; en notant :

  - α_γ le coefficient de dilatation thermique moyen de l'austénite ;
  - T^γ la température de référence à laquelle on considère ε_γ^{th} nulle ;
  - α_α le coefficient de dilatation thermique moyen supposé identique pour la ferrite, la perlite, la bainite et la martensite ;
  - $\Delta\varepsilon_{\alpha\gamma}^{\gamma}$ la déformation, à la température T^γ , des phases ferritique, perlitique, bainitique et martensitique par rapport à l'austénite (en prenant cette dernière comme la phase de référence) ;

- si l'on considère, de plus, que la déformation d'un mélange multiphasé peut être obtenue à partir des déformations de chaque phase par une loi de mélange linéaire, on peut alors décrire l'évolution de l'état de déformation lors d'un essai dilatométrique par :

$$\begin{aligned}\varepsilon^{th}(Z,T)&=\left(1-\sum_{i=1}^{i=4}Z_i\right)\varepsilon_\gamma^{th}(T)+\left(\sum_{i=1}^{i=4}Z_i\right)\varepsilon_\alpha^{th}(T)\\&=\left(1-\sum_{i=1}^{i=4}Z_i\right)\left[\alpha_\gamma\left(T-T^\gamma\right)\right]+\left(\sum_{i=1}^{i=4}Z_i\right)\left[\alpha_\alpha\left(T-T^\gamma\right)+\Delta\varepsilon_{\alpha\gamma}^{\gamma}\right].\end{aligned}\qquad \text{éq 2.1-1}$$

Le problème réside alors dans la détermination de Z ou, plus précisément et dans le cadre des matériaux simples à variables mémoratrices, dans la détermination de la fonction d'évolution f telle que : $\dot{Z}=f\left(T,Z,...\right)$.

Pour rendre compte d'un effet de la vitesse de refroidissement sur l'évolution des transformations structurales, nous proposons, dans le cadre des matériaux simples à variables mémoratrices, une modélisation du comportement métallurgique des aciers au refroidissement qui inclut, a priori, $\dot{T}$ parmi ses variables d'état.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

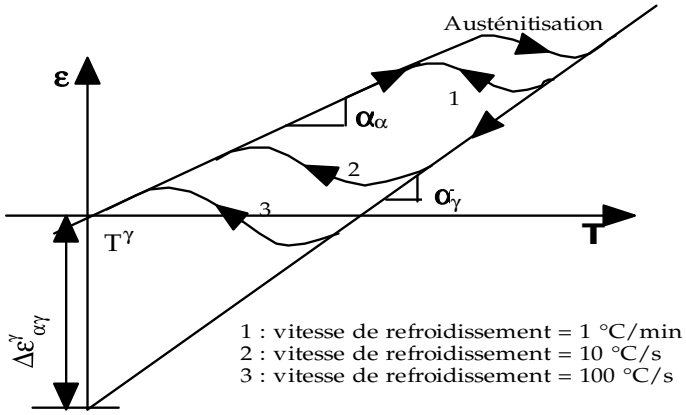


Figure 2.1-2.1-a : Courbes schématiques de dilatométrie

2.2 Hypothèses

H1 : *Un acier susceptible de subir des transformations structurales est un matériau simple à variables mémoratrices parmi lesquelles on peut choisir le quadruplet Z caractérisant la structure métallurgique en un point et à un instant donnés .*

On modélise donc les transformations structurales à une échelle où le point matériel peut être multiphasé. Cette échelle de modélisation qui peut apparaître métallurgiquement grossière est conforme à la notion de point matériel utilisée en mécanique des milieux continus et dont l'éprouvette de dilatométrie, supposée homogène, est représentative.

H2 : *Les diagrammes TRC complétés de la cinétique de transformation martensitique de Koistinen-Marburger [bib7] caractérisent complètement le comportement métallurgique d'un acier austénitisé lors d'un refroidissement continu.*

Cette hypothèse résulte directement de la pratique métallurgique et précise le premier des objectifs à fixer au modèle : être compatible avec l'ensemble des données expérimentales relatives au comportement métallurgique qui accompagne le refroidissement des aciers austénitisés. Par ailleurs, cette hypothèse engendre également un choix "naturel" et des restrictions quant aux variables à introduire dans le modèle.

H3 : *Les transformations ferritique, perlitique et (surtout) bainitique sont impossibles en deçà de la température de début de transformation martensitique Ms .*

Cette hypothèse, conforme à la représentation des diagrammes TRC, permet de découpler les transformations par diffusion de la transformation martensitique.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

2.3 Choix des variables d'état

Variables d'état pilotes

En thermo-mécanique des milieux continus, les variables d'état pilotes sont généralement la température et l'état de contraintes ou de déformations. Cependant, en raison de l'hypothèse H2, la température est la seule variable pilote retenue. En effet, l'influence de l'état de contraintes sur les transformations structurales n'apparaît pas dans les diagrammes TRC. De plus, il n'existe pas (hormis un effet de type Le Châtelier) de modèle théorique même si des données expérimentales relatives à cette influence en conditions isothermes ont été obtenues pour certains aciers [bib8].

Variables d'état mémoratrices

La première variable mémoratrice à introduire est le quadruplet Z caractérisant la structure métallurgique et dont la connaissance suffit, a priori, à décrire d'un point de vue mécanique un essai dilatométrique [§2.2].

Outre la température T, sa dérivée $\dot{T}$ et l'état de contraintes σ, la taille de grain austénitique d et la teneur en carbone C de l'austénite se transformant influencent également le comportement métallurgique des aciers au refroidissement. Cependant, toujours en raison de l'hypothèse H2, on choisit de ne pas introduire C comme variable mémoratrice. En effet, la diffusion du carbone n'apparaît pas explicitement sur les diagrammes TRC, bien qu'elle soit implicitement prise en compte, au moins partiellement, dans la notion même de constituant métallurgique. Par ailleurs Giusti a montré que si la prise en compte de C était théoriquement possible, elle conduisait à des équations d'évolution couplées entre C et Z dont l'identification expérimentale "semble très difficile, pour ne pas dire impossible" [bib9]. Néanmoins, un effet de la teneur en carbone sur la décomposition de l'austénite au refroidissement apparaît indirectement sur les diagrammes TRC. C'est le phénomène de stabilisation de l'austénite qui se traduit par une décroissance de la température de transformation martensitique Ms [Figure 2.3-a].

Contrairement à la teneur en carbone, la taille de grain austénitique d apparaît sur les diagrammes TRC qui sont relatifs à des conditions d'austénitisation auxquelles correspondent une valeur de d. Nous choisissons donc d'introduire d comme variable mémoratrice. Cependant, la taille de grain austénitique, qui résulte de l'histoire thermique subie au chauffage n'évolue plus au refroidissement et d intervient uniquement en tant que paramètre dans le modèle de comportement au refroidissement.

Par ailleurs, la température de transformation martensitique Ms, qui dépend de l'histoire thermo-métallurgique subie, intervient dans la loi de Koistinen-Marburger adoptée dans l'hypothèse **H2** pour décrire la transformation martensitique. On choisit donc d'introduire Ms comme variable mémoratrice.

Le caractère mémorateur des variables mémoratrices introduites ici en plus de Z apparaît clairement : d caractérise l'histoire thermique subie lors du passage en phase austénitique et Ms relie la décomposition de l'austénite aux conditions de sa transformation en martensite.

La relation `'ACIER'` de l'opérateur `CALC_META` comporte donc 7 variables internes :

$V1$: $Z1$, proportion de la ferrite,
$V2$: $Z2$, proportion de la perlite,
$V3$: $Z3$, proportion de la bainite,
$V4$: $Z4$, proportion de la martensite,
$V5$: d, taille de grain austénitique,
$V6$: température aux points de Gauss.
$V7$: Ms température de transformation martensitique,

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

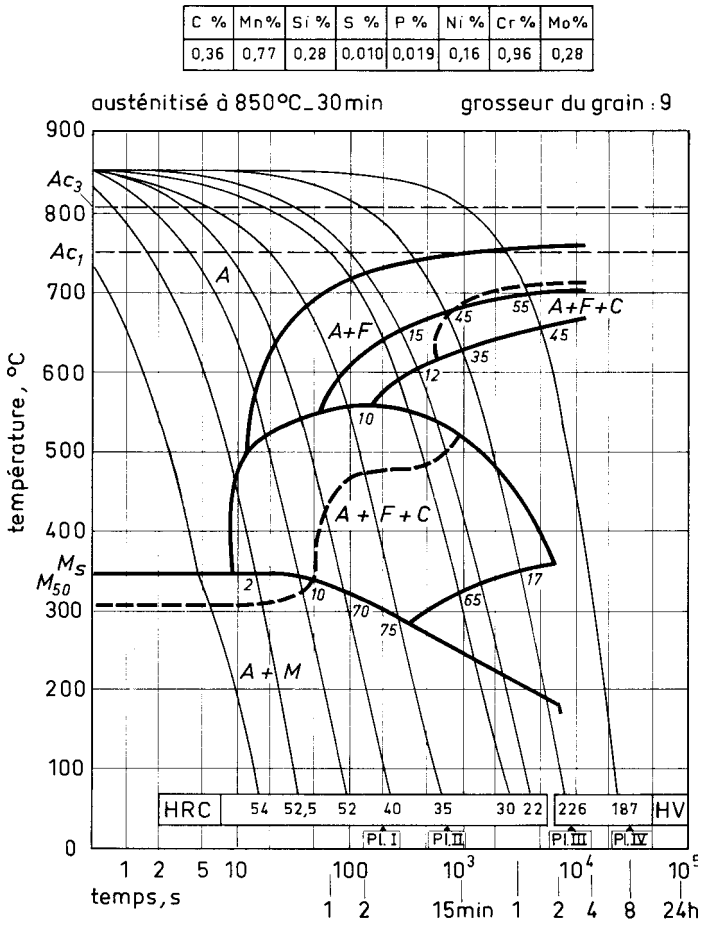


Figure 2.3-2.3-a : Exemple de diagramme TRC

Il est également nécessaire pour modéliser l'ensemble des phénomènes mis en jeu lors d'une opération de soudage d'introduire d'autres variables mémoratrices telles que les tenseurs de déformations anélastiques qui peuvent correspondre aux déformations plastiques, de plasticité de transformation ou de viscosité. Mais, conformément à l'hypothèse **H2**, on considère que ces variables n'interviennent pas dans les fonctions d'évolutions de Z et de Ms .

Enfin, les hypothèses suivantes permettent de simplifier et préciser davantage la forme générale du modèle.

H4 : *∇T n'intervient que dans la relation de comportement exprimant le vecteur courant de chaleur q ; sa dérivée temporelle première $\dot{\nabla} T$ n'est pas une variable d'état et la relation de comportement exprimant le vecteur courant de chaleur est la loi de Fourier : $q=-\lambda(T,Z,d)\nabla T$.*

H5 :

Un diagramme TRC permet d'identifier une relation empirique entre Ms , d et $\sum_{i=1}^{i=3} Z_i$:

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$Ms\left(Z_1, Z_2, Z_3; d\right)=Ms_0(d)+AM(d)\left[\sum_{i=1}^{i=3} Z_i-Z^s(d)\right]^+ . \qquad \text{éq 2.3-1}$$

L'hypothèse **H5** signifie que la température de début de transformation martensitique est constante (pour une taille de grain donnée) et égale à Ms_0 tant que la proportion d'austénite transformée est inférieure à un seuil Z^s et que sa variation est une fonction linéaire de la quantité d'austénite transformée. Cette hypothèse semble relativement bien vérifiée expérimentalement [fig 2.3 - a]. Elle permet d'exclure Ms de toutes les relations de comportement autres que celle exprimant z et Z_4.

Avec $\boldsymbol{z}=\left\{Z_1, Z_2, Z_3\right\}$ que l'on distinguera bien de $Z=\left\{Z_i; i=1, p\right\}$ défini au § 2.1.

Finalement, et compte tenu des hypothèses **H2** et **H3** les relations définissant le modèle s'écrivent donc :

$$\dot{z}(t)=f\left(T, \dot{T}, \boldsymbol{z}, \mathrm{Ms}; d\right)=f\left(T, \dot{T}, \boldsymbol{z}; d\right)\frac{\left[T-Ms\right]^+}{T-Ms} \quad \text{avec } \boldsymbol{z}=\left\{Z_1, Z_2, Z_3\right\} \qquad \text{éq 2.3-2}$$

$$Z_4\left(T, \boldsymbol{z}, \mathrm{Ms}; d\right)=\left[1-\sum_{i=1}^{i=3} Z_i\right]\left\{1-\exp\left(\beta(d)\left[\mathrm{Ms}-T\right]^+\right)\right\} \qquad \text{éq 2.3-3}$$

et

$$Ms(t)=Ms_0(d)+A_M(d).\left[\sum_{i=1}^{i=3} Z_i-Z^s(d)\right]^+ \qquad \text{éq 2.3-4}$$

où : β est une caractéristique du matériau ($^\circ C^{-1}$) (éventuellement fonction de d) ;

et $\left[X\right]^+$ désigne la partie positive de X.

Enfin, comme il semble difficile de proposer une forme simple de dépendance du modèle vis-à-vis de ces variables, on a choisi de ne pas imposer de forme particulière aux fonctions d'évolution f_i [bib2]. La démarche pour calculer les vitesses d'évolution des variables métallurgiques utilise alors des techniques d'interpolation et repose sur le fait que toute histoire thermométallurgique expérimentalement connue (essai dilatométrique par exemple) est une solution particulière de l'équation différentielle d'évolution [éq 2.3-2].

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

3 Identification et mise en œuvre du modèle au refroidissement

3.1 Principe

L'identification du modèle et l'utilisation des données expérimentales que constituent les diagrammes TRC pour déterminer la valeur prise par la fonction f en un état thermo-métallurgique $(T, \dot{T}, z; d)$ donné sont fondées sur la constatation et l'hypothèse suivantes :

- les histoires thermo-métallurgiques figurant sur un diagramme TRC sont toutes des solutions particulières de l'équation différentielle [éq 2.3-2]. Elles permettent donc de calculer en chaque état thermodynamique rencontré expérimentalement et présent dans un diagramme TRC la valeur prise par la fonction f .
- la fonction f est régulière ; c'est-à-dire que si deux points E_k et E_j sont voisins $\left(E_k = \left\{T(t_K), \dot{T}(t_K), z(t_K); d(t_K)\right\}\right)$, leurs vitesses d'évolution en z sont également voisines soit :

$$E_k \approx E_j \Rightarrow f(E_k)\frac{[T-Ms]^+}{T-Ms} = \dot{z}(E_k) \approx f(E_j)\frac{[T-Ms]^+}{T-Ms} = \dot{z}(E_j) \ .$$

On détermine ensuite les vitesses de transformations structurales d'un état quelconque par interpolation parmi tous les "couples" $\left(E_k, f(E_k)\right)$ définis par les diagrammes TRC.

3.2 Intégration des données expérimentales au modèle

3.2.1 Principe

En général, un diagramme TRC définit dans un repère $[\ln(t) - T]$ les transformations structurales associées à une série d'histoires thermiques tracées sur ce diagramme [Figure 2.3-a]. L'intégration des données expérimentales consiste alors à relever pour chaque histoire de ces diagrammes les valeurs successives de $T, \dot{T}, z$ de telle sorte que pour n'importe quelle température T le modèle connaisse les valeurs prises par la fonction f en $(T, \dot{T}(T), z(T))$. Afin de pouvoir, à partir d'un nombre réduit de données numériques, reconstituer de façon continue les évolutions thermométallurgiques, on formule quelques hypothèses sur les évolutions thermiques et sur le comportement métallurgique des aciers.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

3.2.2 Règles d'interprétation des diagrammes TRC

Évolutions thermiques

Pour définir les histoires thermo-métallurgiques présentes dans un diagramme TRC il faut caractériser leurs évolutions thermiques. On peut remarquer que, dans un repère $\left[\ln(t)-T\right]$ et pour des températures inférieures à $820\ °C$, les histoires thermiques des diagrammes TRC peuvent, avec une assez bonne approximation, se déduire les unes des autres par une translation horizontale [Figure 2.3-a]. Il est donc possible de définir une histoire thermique $T^i(t)$ à partir de la donnée d'une courbe pilote $T_p(t)$ et de l'instant (en seconde) pour lequel cette histoire franchit l'isotherme 820 °C par :

$$t^i(T)=\exp\left\{\ln\left[tp(T)\right]+\ln\left[t^i(820)\right]-\ln\left[tp(820)\right]\right\} \qquad \text{éq 3.2.2-1}$$

où : $t^i(T)$ et $tp(t)$ désignent les fonctions réciproques de $T^i(t)$ et $T_p(t)$.

En fait, on dispose plus facilement d'informations relatives aux vitesses de refroidissement des histoires thermo-métallurgiques des diagrammes TRC qu'à des instants de franchissement de l'isotherme $820\,°C$. C'est en particulier le cas des aciers de soudage, dont les diagrammes TRC sont tracés dans un repère "vitesse de refroidissement à $700\,°C$ -température". Compte tenu de [éq 3.2.2-1], on peut alors exprimer l'instant de franchissement de l'isotherme $820\ °C$ en fonction de $T_p(t)$ et de $\dot{T}^i(700)$ et l'on obtient comme caractérisation de $T^i(t)$:

$$t^i(T)=\exp\left[F(T)-F(700)-\ln\left(\dot{T}^i(700)F'(700)\right)\right] \qquad \text{éq 3.2.2-2}$$

Avec $F(T)=\ln\left[tp(T)\right]$ et, en particulier $\dot{T}^i\left(t(T)\right)=\dfrac{1}{F'(T)t^i(T)}$

Concrètement, on interpole la fonction $F(T)$ par un polynôme de degré 5. Une évolution thermique expérimentale est donc complètement définie par la donnée des coefficients du polynôme caractérisant sa courbe pilote et par sa vitesse de refroidissement à $700\,°C$. La validation de cette méthode de paramétrisation des histoires thermiques "lues" sur les diagrammes TRC est présentée en [bib2]. Dans l'ensemble, et compte tenu des imprécisions relatives du tracé des diagrammes TRC, de la lecture de $T^i(t)$ et de la détermination de $\dot{T}^i(700)$, l'accord entre les histoires thermiques lues et recalculées semble très suffisant.

Si on dispose des enregistrements des évolutions thermiques des diagrammes TRC, on peut définir chaque évolution thermique expérimentale en considérant qu'elle est sa propre courbe pilote. Par ailleurs, dans le cas où les essais dilatométriques définissant le diagramme TRC utilisé pour l'identification du modèle sont réalisés avec des vitesses de refroidissement constantes, on caractérise ces cinétiques de refroidissement uniquement par leurs vitesses de refroidissement à $700\,°C$ et une fonction F identiquement nulle.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

Températures de début et fin de transformation

Un diagramme TRC fournit, pour une série d'histoires thermiques connues, les proportions des différents constituants métallurgiques qui se sont formés lors du refroidissement ainsi que les températures pour lesquelles on observe sur une courbe dilatométrique une variation sensible du coefficient global de dilatation de l'éprouvette [Figure 2.1-a]. Ces températures sont alors considérées comme les températures de début et de fin des transformations. Plus précisément :

- les températures de début de transformation indiquées sur les diagrammes TRC correspondent à 1 % de constituant déjà formé ;
- les températures de fin de transformation correspondent à la proportion finale du constituant en cours de formation moins 1 %.

Cinétiques des transformations ferritiques, perlitiques et bainitiques

L'observation d'une courbe dilatométrique montre que, sauf au voisinage des températures de début et de fin de transformation, l'évolution de la déformation en fonction de la température est quasiment linéaire. Compte tenu de l'équation [éq 2.1-1] l'évolution de la quantité de phase transformée en fonction de la température n'est alors pas très éloignée d'une fonction affine et on suppose donc que :

- pour les transformations ferritiques, perlitiques et bainitiques, la vitesse de transformation est, entre les températures expérimentales de début et de fin de transformation, une fonction linéaire de la température ;
- les vitesses de ces transformations sont deux fois plus lentes en début (de 0 à 1 % de constituant transformé) et en fin de transformation (de $Z_{final}-1\%$ à Z_{final}) qu'entre les températures expérimentales de début et fin de transformation.

Transformations martensitiques

On suppose que les transformations martensitiques sont décrites par la loi de Koistinen-Marburger [éq 2.3-3] et l'équation phénoménologique [éq 2.3-4] exprimant Ms. On utilise alors chaque diagramme TRC pour déterminer les coefficients β, A et Z^s ainsi que la température Ms_0. Enfin, pour éviter que le modèle transforme systématiquement en martensite l'austénite restante lorsqu'on atteint la température Ms, on introduit un paramètre supplémentaire, appelé TPLM, caractérisant (par sa vitesse de refroidissement à $700\,°C$) la plus lente des cinétiques de refroidissement qui engendre une transformation martensitique. Plus précisément [Figure 3.2.2-a] :

- Ms_0 est considérée comme la température de début de transformation martensitique lorsque celle-ci est totale ;
- β est supposé constant et calculé de façon à vérifier, dans le cas d'une transformation martensitique totale :

$$Z_4(Mf)=0,99$$

où Mf est la température expérimentale de fin de transformation ;

- enfin, A et Z^s sont déterminés par régression linéaire à partir des histoires thermo-métallurgiques expérimentales conduisant à une transformation martensitique partielle.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

Mso = 415°C ; Mso - Mf = 185°C

d'où une valeur de β (supposée constante pour une taille de grain donnée) de -0.0249

A = -30,086

Zs = 0,38

et TPLM = -9°C/s

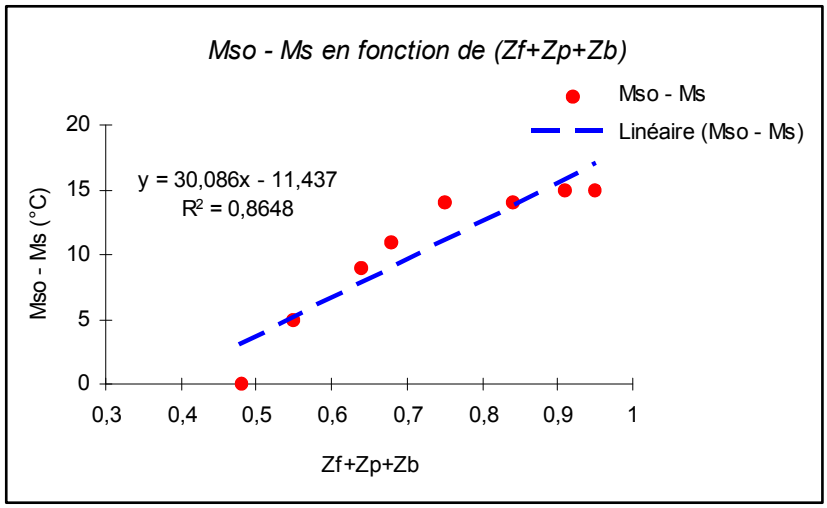


Figure 3.2.2-a : Évolution de $(Ms_0 - Ms)$ en fonction de $(Z1+Z2+Z3)$; pour l'acier 16MND5 austénitisé 5 minutes à $900\ °C$.

3.2.3 Effet de la taille de grain austénitique sur la cinétique des transformations au refroidissement.

Les transformations de phase procèdent par germination et croissance. L'étape de germination se fait essentiellement sur les joints de grain. La taille de grain de l'austénite joue donc un rôle important sur les transformations au refroidissement. Pour cette raison les diagrammes TRC sont établis pour des conditions d'austénitisation données et ne devraient en toute rigueur n'être utilisés que pour des conditions d'austénitisation similaires. Les résultats expérimentaux tendent à montrer que la taille de grain austénitique modifie plus les cinétiques de transformation que les température de début et de fin de transformations, ce qui se traduit relativement bien par une translation du diagramme TRC selon l'axe des temps. A chaque point M d'un diagramme TRC correspond le n-uplet $(T, \dot{T}, z)$. Translater le TRC selon l'axe des temps revient à multiplier $\dot{T}$ par un coefficient différent de l'unité (l'axe des temps est donné en échelle logarithmique) [bib15]. On définit donc une vitesse de refroidissement « efficace » $\dot{T}_{eff}$:

$$\dot{T}^{eff} = \dot{T} \cdot \exp(a(d - d_{ref}))$$

avec

d_{ref} : taille de grain austénitique de référence du diagramme TRC, homogène à une longeur.

a : coefficient matériau homogène à l'inverse d'une longueur.

La loi d'évolution retenu s'écrit donc :

$$\dot{z}(t) = f(T, \dot{T}_{eff}, z, \mathrm{Ms}) = f(T, \dot{T}_{eff}, z) \frac{[T - Ms]^+}{T - Ms} \text{ avec } z = \{Z_1, Z_2, Z_3\} .$$

Cette écriture a l'avantage de limiter l'interpolation à un seul diagramme TRC, de référence.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

Remarques :

Hypothèse : la germination et la croissance de la martensite sont considérées comme instantanées et la densité des sites de nucléation a peu d'influence sur cette transformation. L'effet de la taille de grain ne concerne donc pas l'évolution de la phase martensitique et porte ici uniquement sur l'évolution des phases férritique, perlitique et bainitique.

3.2.4 Saisie des diagrammes TRC

Compte tenu des hypothèses précédentes, la saisie des données expérimentales contenues dans les diagrammes TRC comprend donc :

- pour le diagramme TRC :
  - la valeur de la taille de grain austénitique d_{ref} du diagramme et qui sera la taille de grain de référence,
  - le coefficient de translation a pour la prise en compte de l'effet de la taille de grain austénitique,
  - la température de début de transformation martensitique totale Ms_0 ,
  - la valeur du coefficient de la loi de Koistinen-Marburger,
  - la valeur des coefficients A et Z^s intervenant dans l'équation [éq 2.3-4],
  - les valeurs des six coefficients du polynôme de degré cinq interpolant la fonction $\ln\left[tp\left(T\right)\right]$ (si l'on connaît explicitement les histoires thermiques, chacune d'elles est considérée comme étant sa propre courbe pilote et la définition de ses six coefficients est à renouveler pour chaque histoire) ;

- pour chaque histoire thermique d'un diagramme TRC :
  - la vitesse de refroidissement à $700\,°C$,
  - les proportions finales de ferrite, perlite et bainite $\left(Zff\,,Zfp\,,Zfb\right)$,
  - les températures de début de chaque transformation $\left(Tdf\,,Tdp\,,Tdb\right)$,
  - et les températures de fin de chaque transformation $\left(Tff\,,Tfp\,,Tfb\right)$.

La saisie d'un diagramme TRC est réalisable par un programme de saisie (disponible disponible avec le cas-test `mtlp100a` dans le fichier `mtlp100a.66` ; le fichier contient du Fortran qu'il est nécessaire de compiler). C'est une opération simple et rapide (environ une heure pour la saisie d'une cinquantaine d'histoires).

Le résultat de cette procédure de saisie des diagrammes TRC (cf. [§An1]) est directement insérable dans un fichier de commande de *Code_Aster* en tant que commande `DEFI_TRC`, commande qui contient donc les données identifiant le comportement métallurgique de l'acier.
La définition complète des modèles de comportement métallurgique (valeurs des paramètres Ar_3 température "quasi statique" de transformation ferritique, de Ms0, et la définition complète du modèle au chauffage et de croissance de grain austénitique) est réalisée au sein de la commande `DEFI_MATERIAU` sous le mot clé facteur `META_ACIER`.

Un exemple de la procédure de saisie est présenté en annexe [§An1].

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

3.3 Évaluation de la fonction d'évolution à partir des données expérimentales

3.3.1 Évaluation de la fonction d'évolution pour les histoires expérimentales

Compte tenu des hypothèses concernant l'évolution des transformations structurales associées aux histoires thermo-métallurgiques H_i d'un diagramme TRC, on dispose donc d'un ensemble de solutions particulières paramétrées par d_{ref} de l'équation différentielle (pour $T^3 Ms$) :

$$\dot{z}(t)=f\left(T,\dot{T},z;d_{ref}\right)$$

qui permettent pour tout état thermo-métallurgique $E_k=\left\{T,\dot{T},z;d_{ref}\right\}$ d'une histoire expérimentale H_i de calculer :

$$\dot{z}\left(E_k(t)\right)=f\left(E_k\right)$$

En effet :

$$\dot{z}\left(E_k(t)\right)=\frac{dz}{dT}\left(E_k\right)\dot{T}\left(E_k\right)$$

or, compte tenu des hypothèses de linéarité sur les évolutions de $Z_i(t)$ entre deux états consécutifs E_k^i et E_k^{i+1} d'une même histoire discrétisée :

$$\frac{dz}{dT}\left(E_k\right)=\frac{z\left(E_{k^i}\right)-z\left(E_{k^{i+1}}\right)}{T\left(E_{k^i}\right)-T\left(E_{k^{i+1}}\right)}$$

où $\dot{T}\left(E_k\right)$ peut être estimée par dérivation de l'expression analytique retenue pour représenter $T_i(t)$.

Ainsi, on peut, pour toute température T, connaître les valeurs prises par la fonction f en les états thermo-métallurgiques $E_i=\left\{T,\dot{T}_i(T),z_i(T);d_{ref}\right\}$ où l'indice i fait référence aux histoires connues expérimentalement.

3.3.2 Calcul de l'avancement des transformations pour un état quelconque

Il s'agit, connaissant $T,\dot{T},z,Ms$ et d à un instant t donné, de déterminer les valeurs des variables métallurgiques à l'instant $\left(t+\Delta t\right)$ suivant. Plus précisément :

- Si $T(t)\geq Ar_3$ ou si $\dot{T}>0$,

  le modèle de transformation métallurgique au refroidissement est inactif [§4.4].

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

- Si $Ar_3 > T(t) \geq Ms(t)$,

  $$\dot{z}(t) = f(T, \dot{T}, z; d) = f(T, \dot{T}_{eff}, z; d_{ref}) \text{ et } z(t+\Delta t) = z(t) + \dot{z}(t)\Delta t$$

  puis :

  $$Ms(t+\Delta t) = Ms_0 + A\left[\sum_{i=1}^{i=3} Z_i(t+\Delta t) - Z^s\right]^+$$

  et, si $T(t+\Delta t) \geq Ms(t+\Delta t) : Z_4(t+\Delta t) = Z_4(t)$

  ou, sinon :

  $$Z_4(t+\Delta t) = \left[1 - \sum_{i=1}^{i=3} Z_i(t+\Delta t)\right]\left\{1 - \exp\left(\beta\left[Ms(t+\Delta t) - T(t+\Delta t)\right]^+\right)\right\}$$

- Si $T(t) < Ms(t)$

  $$z(t+\Delta t) = z(t) ; Ms(t+\Delta t) = Ms(t)$$

  et

  $$Z_4(t+\Delta t) = \left[1 - \sum_{i=1}^{i=3} Z_i(t+\Delta t)\right]\left\{1 - \exp\left(\beta(d^c)\left[Ms(t+\Delta t) - T(t+\Delta t)\right]^+\right)\right\} .$$

Dans le cas où $Ar_3 > T(t) \geq Ms(t)$, on détermine (grâce à l'hypothèse de régularité de f) la valeur prise par f en $(T, \dot{T}, z; d)$ à partir de la connaissance pour toute température T des valeurs prises par f en les états thermo-métallurgiques $E_i\left\{T, \dot{T}_i(T), z_i(T); d_{ref}(T)\right\}$ des histoires connues expérimentalement, où $\dot{T}_i(T)$ est la vitesse de refroidissement pour l'histoire H_i à la température T (obtenue par interpolation). Plus précisément, on va déterminer une approximation linéaire de f au voisinage de $(T, \dot{T}, z; d)$. f est une fonction de $\mathbb{R}^5$ (car la dépendance par rapport au paramètre d est incluse dans la modification éventuelle de la vitesse de refroidissement courante [§ 3.2.3]) dans $\mathbb{R}$, déterminer une approximation linéaire de f au voisinage de $(T, \dot{T}, z; d)$ revient à déterminer l'équation d'un hyperplan dans $\mathbb{R}^6$ et donc de disposer de la valeur prise par f en six points $\left\{E_i, f(E_i)\right\}$ « proches » de $(T, \dot{T}, z; d)$.

Concrètement, les étapes de cette interpolation des valeurs de f en $(T, \dot{T}, z; d)$ sont les suivantes :

- on calcule une température « efficace » $\dot{T}_{eff}$ permettant de tenir compte de l'effet de la taille de grain austénitique si elle est différente de celle du diagramme, et on cherche alors la valeur prise par f en $(T, \dot{T}_{eff}, z; d_{ref})$

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

- on calcule pour toutes les histoires expérimentales H_i connues les valeurs prises par la fonction f en les états thermo-métallurgiques suivants (afin de connaître un ensemble de valeurs de f dans un voisinage de $\left(T, \dot{T}_{eff}, z; d_{ref}\right)$ assez dense en température) :

$$E_i^1(t)=\left\{T, \dot{T}_i(T), z_i(T); d_{ref}(T)\right\}$$

$$E_i^2(t)=\left\{T+5\,°C, \dot{T}_i(T+5\,°C), z_i(T+5\,°C); d_{ref}(T+5\,°C)\right\};$$

$$E_i^3(t)=\left\{T-5\,°C, \dot{T}_i(T-5\,°C), z_i(T-5\,°C); d_{ref}(T-5\,°C)\right\};$$

- on détermine les six plus proches voisins de $E(t)=\left\{T(t), \dot{T}_{eff}(t), z(t); d_{ref}(t)\right\}$ parmi tous les $E_i^j(t)\,(j=1,3)$ définissant le comportement métallurgique du matériau au voisinage de la température $T(t)$ en minimisant la distance de $E(t)$ à chacun des $E_i^j(t)$;
- on calcule les coordonnées barycentriques de $E(t)$ par rapport à ses plus proches voisins $E^v(t)\,(v=1,6)$. Pour cela, on résout le système linéaire associé à ce calcul au sens des moindres carrés et en choisissant la solution de norme minimale dans le cas où son déterminant est nul (c'est le cas lorsque les plus proches voisins appartiennent à une variété affine de dimension inférieure à six - [R6.03.01]) ;
- on ne retient que les voisins $E^w(t)\,(w\leq 6)$ tels que toutes les coordonnées barycentriques λ_w de $E(t)$ soient positives (afin que $E(t)$ soit situé à l'intérieur du polyèdre convexe s'appuyant sur ces points) ;
- on calcule alors :

$$\dot{z}\left(E_k(t)\right)=f\left(E_k\right)=\lambda_w . f\left[E^w(t)\right] / \sum_w \lambda_w \quad ;$$

- enfin, on calcule z au pas de temps suivant $z(t+\Delta t)$ selon le schéma explicite suivant :

$$z(t+\Delta t)=z(t)+\dot{z}(t)\Delta t$$

Remarque :

La définition d'une distance utilisée dans le critère de proximité n'est pas évidente, compte tenu du caractère non adimensionnel de l'espace des $\left\{T, \dot{T}, z, d\right\}$. Actuellement, la recherche des plus proches voisins s'effectue en adimensionnalisant simplement chacune des variables mais on pourrait envisager d'introduire des coefficients de pondération dans chaque "direction" (T, $\dot{T}$ ou z) afin de rendre compte d'un rôle prépondérant joué par telle ou telle variable.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

4 Modèle de comportement métallurgique au chauffage

4.1 Hypothèses

Lors du chauffage, la seule transformation susceptible de se produire est la transformation en austénite, dont on suppose la vitesse indépendante de la vitesse de chauffage. Par ailleurs, on suppose également que l'ensemble des phases ferritique, perlitique, bainitique et martensitique se transforment de façon identique en austénite. Ces hypothèses sont généralement communes à l'ensemble des modèles d'austénitisation [bib9], [bib10] et [bib11]. Par conséquent le modèle retenu est de la forme :

$$\dot{z}_\gamma = f\left(T, z_\gamma\right) .$$

On rappelle que le modèle de transformation métallurgique proposé par Leblond et Devaux et implanté dans le code Sysweld [bib11] est de la forme (pour les transformations au chauffage et au refroidissement) :

$$\dot{Z}\left(T, Z\right) = \lambda \frac{Z_{eq}\left(T\right) - Z}{\tau\left(T\right)}$$

où, pour la transformation austénitique, le paramètre λ est pris constant.

Les éléments de comparaison à l'expérience présentés en [bib11], [bib12] et [bib13] montrent que, moyennant l'identification des fonctions $Z_{eq}\left(T\right)$ et $\tau\left(T\right)$ à partir d'essais à différentes vitesses de chauffage, ce modèle permet une description tout à fait satisfaisante de la transformation austénitique des aciers. Néanmoins, il semble que l'identification de la fonction $\tau\left(T\right)$ reste difficile [bib4].

Dans *Code_Aster*, le modèle de transformation austénitique est de la forme :

$$\dot{z}_\gamma\left(T, z_\gamma\right) = \frac{Z_{eq}\left(T\right) - z_\gamma}{\tau\left(T\right)}$$

mais avec une forme simple pour la fonction $\tau\left(T\right)$, afin de garder un ensemble de modèles métallurgiques d'identification facile et rapide.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

4.2 Forme du modèle retenu

Sous sa forme continue, le modèle retenu est tel que :

$$\dot{z}_\gamma(T, z_\gamma) = \frac{Z_{eq}(T) - z_\gamma}{\tau(T)} \qquad \text{éq 4.2-1}$$

où :
- z_γ désigne la proportion d'austénite ;
- $Z_{eq}(T)$ est la fonction (avec Ac_1 et Ac_3 constantes positives) :

$$Z_{eq}(T) = \begin{cases} 0 & \text{si } T \le Ac_1 \\ \dfrac{T - Ac_1}{Ac_3 - Ac_1} & \text{si } Ac_1 \le T \le Ac_3 \\ 1 & \text{si } T \ge Ac_3 \end{cases} \qquad \text{éq 4.2-2}$$

- $\tau(T)$ est la fonction (avec τ_1 et τ_3 constantes positives) :

$$\tau(T) = \begin{cases} \tau_1 & \text{si } T \le Ac_1 \\ \tau_1 + \dfrac{T - Ac_1}{Ac_3 - Ac_1}(t_3 - t_1) & \text{si } Ac_1 \le T \le Ac_3 \\ \tau_3 & \text{si } T \ge Ac_3 \end{cases} \qquad \text{éq 4.2-3}$$

Remarque 1 : définition de la fonction $Z_{eq}(T)$

La définition de la fonction $Z_{eq}(T)$ est identique à celle donnée par Leblond et Devaux en [bib11] et [bib12]. Elle correspond à l'évolution du taux d'austénite transformée pour des vitesses de chauffage très faibles. En effet, à T fixée, $Z_{eq}(T)$ est la solution asymptotique vers laquelle tend la solution de l'équation différentielle [éq 4.2-1] avec la constante de temps $\tau(T)$. Pour des vitesses de chauffage faibles, la solution asymptotique peut être considérée comme atteinte à chaque instant et $Z_{eq}(T)$ correspond donc à l'évolution du taux d'austénite transformée lors d'évolutions "quasi-statiques". La fonction $Z_{eq}(T)$ est donc entièrement définie par la donnée de Ac_1 et Ac_3 qui se fait sous les mots clés simples `AC1` et `AC3` sous le mot clé facteur `META_ACIER` de la commande `DEFI_MATERIAU`.

Remarque 2 : forme de la fonction $\tau(T)$

Dans le modèle proposé par Leblond et Devaux, la forme de la fonction n'est $\tau(T)$ pas précisée et cette fonction est identifiée de façon à obtenir un accord satisfaisant entre les températures de début et de fin de transformation expérimentales et calculées. Afin d'obtenir un modèle d'identification simple et rapide nous avons choisi une forme simple pour la fonction $\tau(T)$. Plus précisément, pour pouvoir intégrer l'équation d'évolution [éq 4.2-1] on a tout d'abord considéré le cas où la fonction $\tau(T)$ est constante. Dans ce cas, on peut alors proposer deux possibilités d'identification simple de cette fonction τ constante. La première possibilité consiste à identifier une valeur τ_1 de τ permettant de décrire correctement le début des transformations alors que la seconde consiste à identifier une valeur τ_3 de τ permettant de décrire correctement la fin des transformations. On a alors testé le modèle obtenu avec une fonction $\tau(T)$ affine définie à partir des valeurs τ_1 et τ_3 définies ci-dessus. Les résultats obtenus étant tout à fait satisfaisants et comparables à ceux obtenus avec le modèle disponible dans Sysweld, on a choisi d'introduire dans Code_Aster un modèle où la fonction $\tau(T)$ est affine et est définie par τ_1 et τ_3 qui sont renseignés avec `AC1` et `AC3`.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

4.3 Intégration de l'équation d'évolution

Dans *Code_Aster,* on a choisi d'intégrer l'équation d'évolution [éq 4.2-1] exactement en z_γ et explicitement en $\dot{T}$ et τ sur chaque pas de temps (i.e. en considérant $\dot{T}$ et τ constantes sur le pas et égales à leurs valeurs en début de pas de temps). On obtient alors :

$$z_\gamma(t+\Delta t)=\frac{-\tau(t)\dot{T}(t)}{Ac_3-Ac_1}+Z_{eq}(t+\Delta t)-\left\{-\frac{\tau(t)\dot{T}(t)}{Ac_3-Ac_1}+Z_{eq}(t)-z_\gamma(t)\right\}\exp\left[-\frac{\Delta t}{\tau(t)}\right].$$

L'évolution conséquente des proportions de tous les autres constituants métallurgiques est alors définie par :

$$Z_i(t+\Delta t)=Z_i(t).\left(1-\frac{z_\gamma(t+\Delta t)-z_\gamma(t)}{1-z_\gamma(t)}\right).$$

Autrement dit, chacune des phases présentes est transformée en austénite à concurrence de sa proportion en début de pas de temps.

4.4 Évolution de la taille de grain austénitique au chauffage

Une fois austénisé, l'acier voit sa taille de grain augmenter plus ou moins rapidement en fonction de la température, mais cette croissance a toujours lieu puisque l'austénite apparaît avec une taille de grain nulle . La croissance de grain austénitique est un processus thermiquement activé. Le modèle de croissance choisi est celui de Grey et Higgins, adapté pour traiter le matériau en cours de transformation [bib15] :

Modèle de croissance :

$$\frac{d}{dt}(d)=\frac{1}{\lambda}\left(\frac{1}{d}-\frac{1}{d_{\lim}}\right)$$

Croissance en cours de transformation, l'austénite apparaissant avec une taille de grain nulle :

$$\frac{d}{dt}(d)=\frac{1}{\lambda}\left(\frac{1}{d}-\frac{1}{d_{\lim}}\right)-\frac{dz/dt}{z}d$$

avec

$$\lambda=\lambda_0\cdot\exp\left(\frac{Q_{app}}{RT}\right)$$

$$d_{\lim}=d_{10}\exp\left(-\frac{W_{app}}{RT}\right)$$

avec

z : proportion de la phase austénitique
d : diamètre de grain austénitique homogène à une longueur
$d_{\lim}$: taille de grain limite, dépendant de d_{10} paramètre matériau homogène à une longueur
Q_{app} et W_{app} : paramètres matériaux homogènes à des énergies d'activation ($J.mol^{-1}$)
R : constante des gaz parfaits ($8.314 J.K^{-1}.mol^{-1}$)
d_{10} : paramètre matériau homogène à des secondes par unité de longueur

Remarques :

Les paramètres matériaux sont à renseigner sous le mot-clé `META_ACIER` *de* `DEFI_MATERIAU`*.*

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

4.4.1 Traitement numérique

Le calcul de la taille de grain est effectué après le calcul de proportion de phase et l'intégration de l'équation d'évolution est faite suivant un schéma implicite en D. D'où :

$$\Delta d = \frac{1}{\lambda}\left(\frac{1}{d} - \frac{1}{d_{\lim}}\right)\cdot \Delta t - \frac{\Delta z}{z^{+}}\cdot d$$

$$d = d^{-} + \Delta d = d^{-} + \frac{1}{\lambda}\left(\frac{1}{d} - \frac{1}{D_{\lim}}\right)\cdot \Delta t - \frac{\Delta z}{z^{+}}\cdot d$$

On résout une équation du second degré en D.

4.5 Sens de l'évolution métallurgique

Dans un calcul de structure, certaines zones peuvent subir un échauffement pendant que d'autres se refroidissent. De plus, sous certaines conditions, une transformation austénitique initiée lors du chauffage peut se poursuivre au début du refroidissement. Il n'existe donc pas, à proprement parler, un modèle de transformation austénitique et un modèle de transformation au refroidissement mais un seul modèle de transformations métallurgiques qui selon la température considérée et le signe de la vitesse d'évolution thermique est décrit soit par le modèle de décomposition de l'austénite, soit par le modèle de formation de l'austénite.

En ce qui concerne le modèle introduit dans *Code_Aster*, le sens de l'évolution métallurgique (c'est-à-dire formation ou décomposition de l'austénite) est déterminé comme suit :

$T(t+\Delta t)$	$< Ac_1$	$\in [Ac_1 ; Ar_3]$	$> Ar_3$
$\dot{T}(t) > 0$		AUST	
$\dot{T}(t) = 0$	REFR	si $\mathbf{z}_\gamma \geq Z_{eq} \rightarrow$ REFR si $\mathbf{z}_\gamma < Z_{eq} \rightarrow$ AUST	AUST
$\dot{T}(t) < 0$		REFR	AUST

où REFR signifie que l'évolution métallurgique est déterminée par le modèle de décomposition de l'austénite et où AUST signifie que l'évolution métallurgique est déterminée par le modèle de formation de l'austénite.

Remarque :

AR3 est également une caractéristique du comportement métallurgique au refroidissement déjà définie par le modèle de transformation au refroidissement.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

5 Identification du modèle au chauffage

5.1 Détermination de la fonction Zeq (T)

$Z_{eq}(T)$ peut être considérée comme la solution quasi statique de l'équation différentielle [éq 4.2-1] et on choisit de la définir (comme en [bib11]) par la relation [éq 4.2-2].

Dans cette expression, les températures Ac_1 et Ac_3 sont les températures quasi statiques "théoriques" de début et de fin de transformation austénitique qui correspondent à un taux d'austénite formé encore égal à zéro ou déjà égal à un.
En fait, ces températures sont difficiles à déterminer expérimentalement et on considère généralement que les températures quasi statiques de début et fin de transformation austénitique déterminées expérimentalement correspondent, respectivement, à 5 et 95 % d'austénite formée. Autrement dit, si l'on note Ac'_1 et Ac'_3 ces températures, elles vérifient :

$$Z_{eq}(Ac'_1)=0,05 \text{ et } Z_{eq}(Ac'_3)=0,95 \qquad \text{éq 5.1-1}$$

Pour déterminer Ac'_1 et Ac'_3 on peut utiliser des essais de dilatométrie à faible vitesse de chauffage ou appliquer des formules de la littérature reliant les températures quasi statiques de début et de fin de transformation austénitique à la composition des aciers. En général ces températures sont également indiquées sur les diagrammes TRC utilisés pour l'identification du modèle de transformation au refroidissement ou peuvent être estimées à l'aide de formules connaissant la composition de l'acier [bib4].

Enfin, connaissant Ac'_1 et Ac'_3, on peut alors déterminer les températures Ac_1 et Ac_3 définissant la fonction $Z_{eq}(T)$ à partir des deux équations [éq 5.1-1] ci-dessus. Un exemple complet d'identification du modèle de transformation austénitique est présenté en [bib4].

5.2 Détermination de la fonction TAU (T)

De manière générale, il n'est pas aisé de dégager un moyen d'identification simple et rapide de la fonction $\tau(T)$. C'est la raison pour laquelle on propose d'adopter pour cette fonction la forme simplifiée ci-dessous [éq 5.2-1]. Si $Ac_1 \le T \le Ac_3$:

$$\tau(T)=\tau_1+\frac{T-Ac_1}{Ac_3-Ac_1}(\tau_3-\tau_1) \qquad \text{éq 5.2-1}$$

où τ_1 et τ_3 sont des constantes positives.

Pour la phase d'identification, on considère en premier lieu le cas particulier où τ est constante entre Ac_1 et Ac_3. On propose alors deux types d'identification permettant de déterminer soit une valeur τ_1 de τ cohérente avec les températures expérimentales de début de transformation, soit une valeur τ_3 de τ cohérente avec les températures expérimentales de fin de transformation.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

On présente en [bib4] les résultats obtenus par ces deux identifications et on montre (sans autre forme de justification théorique) que la fonction $\tau(T)$ affine définie avec les valeurs τ_1 et τ_3 précédemment déterminées permet d'obtenir un accord avec l'expérience tout à fait comparable à celui obtenu avec le modèle de Leblond.

5.2.1 Identification de TAU_3 à partir de AC'3

Pour $\dot{T}$ et τ constantes et la condition initiale $z_y(Ac_1)=0$, la solution de l'équation d'évolution [éq 4.2-1] est (tant que $Z'_{eq}(T)$ est constante, c'est-à-dire tant que $T \leq Ac_3$) :

$$z_y(T)=Z_{eq}(T)-\tau.Z'_{eq}(T).\dot{T}.\left(1-\exp\left[\frac{Ac_1-T}{\tau.\dot{T}}\right]\right)$$

En particulier, on a donc, pour $T=Ac_3$:

$$0,95=Z_{eq}(Ac'_3)-\tau.Z'_{eq}(T).\dot{T}.\left(1-\exp\left[\frac{Ac_1-Ac'_3}{\tau.\dot{T}}\right]\right)$$

Un essai de dilatométrie à vitesse de chauffage constante (et non très faible) permet alors de déterminer la valeur τ_3 de τ permettant de réaliser l'accord entre les valeurs expérimentales et calculées de Ac'_3. On présente en [bib4] des comparaisons entre expérience et calcul obtenues en identifiant ainsi la fonction τ considérée comme constante.

5.2.2 Identification de TAU_1 à partir de AC'1

De la même façon que précédemment, on peut également écrire, pour $T=Ac'_1$:

$$0,05=Z_{eq}(Ac'_1)-\tau.Z'_{eq}(T).\dot{T}.\left(1-\exp\left[\frac{Ac_1-Ac'_1}{\tau.\dot{T}}\right]\right) \qquad \text{éq 5.2.2-1}$$

Là encore, disposant d'un essai à vitesse de chauffage constante, l'équation [éq 5.2.2-1] permet de déterminer une valeur τ_1 de τ permettant d'obtenir un bon accord sur les températures Ac'_1 calculées et expérimentales.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

6 Modèle de calcul de dureté

Les calculs métallurgiques peuvent être complétés par un calcul de dureté de “trempe” associé à la structure métallurgique.

Le modèle choisi utilise l’hypothèse selon laquelle la dureté d’un point matériel polyphasé est bien représentée par une loi de mélange linéaire des microduretés des constituants (ici phases austénite, ferrite, perlite, bainite et martensite). Les microduretés sont prises comme étant des constantes du matériau et de la phase considérée.

Le modèle s’écrit alors : $HV = \sum_k z_k HV_k$

HV : dureté (ici Vickers par exemple) du point polyphasé,
z_k : proportion de la phase k ,
HV_k : dureté de la phase k .

Bien qu’assez simple, ce modèle donne des résultats très corrects [bib14].

Dans *Code_Aster* le calcul de dureté se fait par l’intermédiaire de l’opérateur de post-traitement CALC_META ; option ‘DURT_ELGA’ pour les calculs de dureté aux points de Gauss et option ‘DURT_ELNO’ pour les calculs aux nœuds par éléments.

Les duretés des différentes phases métallurgiques sont des données matériaux fournies par l’utilisateur sous le mot-clé facteur DURT_META de l’opérateur DEFI_MATERIAU.

```
DURT_META     (
                  F1_DURT : HVf
                  F2_DURT : HVp
                  F3_DURT : HVf
                  F4_DURT : HVf
                  C_DURT : HV      )
```


Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

7 Bibliographie

1) WAECKEL F. : Eléments de métallurgie pour l'étude des transformations structurales dans les aciers. Note Interne EDF-DER, HI-71/8075, mars 1993.

2) WAECKEL F. : Une loi de comportement thermo-métallurgique des aciers pour le calcul mécanique des structures. Thèse de Doctorat ès Mécanique, Ensam Paris, mars 1994.

3) ANDRIEUX S., WAECKEL F. : Un modèle de comportement métallurgique des aciers au refroidissement. Note interne EDF-DER, HI-74/94/072/0, octobre 1994.

4) WAECKEL F. : Modélisation de la transformation austénitique dans le *Code_Aster*. Note interne EDF-DER HI-74/95/017/0, juillet 1995.

5) WAECKEL F., DUPAS P. : Comparaison des modèles de comportement métallurgiques implantés dans le *Code_Aster* et dans sysweld. Note interne EDF-DER, HI-74/94/076/0 et HT-26/94/033/A, mars 1995.

6) MARIGO J.J. : Le comportement thermo-mécanique des milieux simples à variables mémoratrices : I Généralités et premiers exemples. Note Interne EDF-DER HI/5147-07, 1985.

7) KOISTINEN DP, MARBURGER RE : A general equation prescribing extent of austenite - martensite transformation in pure Fe-C alloys and plain carbon steels. Acta Metallurgica, vol.7, pp. 59-60, 1959.

8) AEBY-GAUTIER E. : Transformations perlitique et martensitique sous contrainte de traction dans les aciers.Thèse de Doctorat ès Sciences Physiques, Institut National Polytechnique de Lorraine, 1985.

9) DENIS S. FARIAIS D. SIMON : A, Mathematical model coupling phase transformations and temperature evolutions in steels. ISIJ International, vol.32, n° 3, 1992, pp. 316-325.

10) GIUSTI J. : Contraintes et déformations résiduelles d'origine thermique. Application au soudage et à la trempe des aciers. Thèse de Doctorat d'Etat ès Science Physique. Université Paris 6, 1981.

11) LEBLOND JB, DEVAUX JC : A new kinetic model for anisothermal metallurgical transformation in steels including effect of austenitic grain size, 1984. Acta Metallurgica, vol.32, n° 1, pp. 137-146.

12) J.C. DEVAUX : Etudes des contraintes d'origine thermique dans les zones affectées par la chaleur lors d'une opération de soudage.Contrat D.G.R.S.T., n° 79.1095, Compte rendu de fin de recherche.

13) LEBLOND J.B., MOTTET G., DEVAUX J., DEVAUX J.C : 1985. Mathematical models of anisothermal phase transformation in steels and predicted plastic behaviour. Materials Science and Technology, vol.1, n° 10 october 1985, pp. 815-822.

14) RAZAKANAIVO A. : Introduction d'un modèle de calcul de dureté dans le *Code_Aster*. Compte rendu MMN, 97/005, Janvier 1997.

15) MARTINEZ M. : Jonction 16MND5-Inconel 690-316LN par soudage-diffusion, élaboration et calcul des contraintes résiduelles de procédé. Thèse de Doctorat Mines de Paris, 12/ 1999.

8 Description des versions du document

Version Aster	Auteur(s) Organisme(s)	Description des modifications

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

5	F.WAECKEL, A.RAZAKANAIVO EDF-R&D/AMA	ajout du calcul de la dureté

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

Annexe 1

On présente ci-dessous un exemple de la procédure de saisie d'une histoire thermo-métallurgique expérimentale (à vitesse de refroidissement non constante). On montre tout d'abord les informations fournies par l'utilisateur au logiciel de saisie : vitesse de refroidissement à $700\ °C$, composition à l'ambiante, températures expérimentales de début et de fin de transformation, …. Ces informations sont inscrites en caractères gras et italiques ; les températures sont indiquées en $°C$ et les vitesses de refroidissement en $°C/s$. L'ensemble des états thermo-métallurgiques définissant cette histoire expérimentale et leur stockage informatique sont ensuite présentés et la figure [Annexe1-a] représente, toujours pour cette histoire et en fonction de la température, l'évolution métallurgique supposée solution de l'équation différentielle [éq 2.3-2] ainsi que le rappel des données fournies lors de la saisie.

SAISIE DES TRC

SAISIE DES HISTOIRES THERMOMETALLURGIQUES DONT ON A
LA CONNAISSANCE EXPERIMENTALE POUR UN ACIER DONNE

Entrez le nom de l'acier (8 caractères alphabétiques maxi)
trcacier
Entrez la valeur de la température Ar_3
836
Entrer la valeur de la température en dessous de laquelle toutes les transformations sont finies
200
LE TRC EST CARACTERISE PAR :
1 - Le nombre d'histoires qui le compose ;
2 - Les coefficients A, B, C, D, E, F du polynôme : A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4 + FT^5 définissant la courbe pilote de refroidissement F(T) telle que :

t(T) = exp {F(T) - F(700) - ln [Tp(700) F'(700)1}

où : Tp est la dérivée de $T(t)$ et F' celle de F ;

3 - La valeur de la taille de grain austénitique dref du diagramme;

ATTENTION ! LA PREMIERE HISTOIRE SAISIE DOIT ÊTRE LA PLUS LENTE ;
C'EST-A-DIRE LA PLUS PROCHE DE L'EQUILIBRE THERMODYNAMIQUE
Entrez le nombre d'ensembles que vous voulez saisir ?
1
ATTENTION ! vous allez saisir 1
ensemble(s) d'histoires thermo-métallurgiques (OK = 0 ; Non = 1)
0
Entrez le nombre d'histoires de l'ensemble 1
1
Entrez la valeur des coefficients A, B, C, D, E, F et de d
8.563 -0.0276 1.22D-4 -2.955D-7 3.492D-10 -1.517D-13 11D-6
ATTENTION ! la proportion minimale significative pour un constituant à l'ambiante est de 0.03
Histoire numéro 1
Entrez la valeur de Tpoint 700
-0.00542
Entrez les proportions finales de ferrite, perlite et bainite $(Zff, Zfp et Zfb)$ pour l'histoire 1
0.764 0.199 0.037
Entrée des températures de début et de fin de transformation pour l'histoire 1
Entrez les températures de début et de fin de transformation ferritique Tdf et Tff
792 657.5

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

Entrez les températures de début et de fin de transformation perlitique Tdp et Tfp
657.5 615
Entrez les températures de début et de fin de transformation bainitique Tdb et Tfb
490 420
VALIDEZ-VOUS L'HISTOIRE NUMÉRO ? (OUI = 1 NON = 0) 1
TPOINT A 700 DEGRES
-5.420D-03

Zff	Tdf	Tff
7.640D-1	7.920D+2	6.575D+2
Zfp	Tdp	Tfp
1.990D-01	6.575D+2	6.150D+2
Zfb	Tdb	Tfb
3.700D-02	4.900D+2	4.200D+2

1
DEFINITION du coefficient de translation utilisé pour calculer $\dot{T}_{eff}$, modélisant l'influence de la taille de grain sur le cinétique de transforamtion :

$$\dot{T}^{eff} = \dot{T} \cdot \exp(a(d - d_{ref}))$$

On définit donc la valeur de a .
Entrez la valeur du coefficient de translation a pour l'effet taille de grain :
11200.

DEFINITION DE LA VARIATION DE MS EN FONCTION DE $Zf + Zp + Zb$
On considère que la transformation martensitique est décrite par la loi de Koistinen-Marburger :

$$Z_4(t) = \left[1 - \sum_{i=1}^{i=3} Z_i\right]\left\{1 - \exp\left(\beta\left[\mathrm{Ms} - T\right]^{+}\right)\right\}$$

dans laquelle la température de début de transformation martensitique Ms est, au-delà d'un certain seuil, fonction de $Zf + Zp + Zb$:

$$Ms(t) = Ms_0 + A\left[\sum_{i=1}^{i=3} Z_i - Z^s\right]^{+} \quad .$$

On définit donc les valeurs de Ms_0 et β . ainsi que les valeurs de Z^S et A.
Entrez le nombre de lois de variation de Ms en fonction de Zf + Zp + Zb que vous voulez saisir
1
Entrez la valeur du seuil Z^S et de A pour la loi 1
ainsi que la valeur, TPLM, de la vitesse de refroidissement à 700 °C de l'histoire la plus lente conduisant à une transformation martensitique partielle et de □
0.47 -32.76 -3,497 14.06
Validez-vous la loi telle que (OUI = 1 NON = 0) : Z^S = 0.47
AM = - 32.76
TPLM = - 3,497
= 14.06
1

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

Exemple de procédure de saisie des diagrammes TRC

```
tracier = DEFI_TRC(
 HIST_EXP =
_F(VALE=                    (-5.420D-03      1.100D+01     8.563D+00     -2.760D-02
                             1.220D-04     -2.955D-07     3.492D-10     -1.517D-13
                             0.000D+00      0.000D+00     0.000D+00      8.360D+02
                             0.000D+00      0.000D+00     0.000D+00      7.956D+02
                             1.000D-02      0.000D+00     0.000D+00      7.920D+02
                             7.277D-01      0.000D+00     0.000D+00      6.622D+02
                             7.540D-01      1.000D-02     0.000D+00      6.575D+02
                             7.640D-01      2.523D-02     0.000D+00      6.539D+02
                             7.640D-01      1.890D-01     0.000D+00      6.150D+02
                             7.640D-01      1.990D-01     0.000D+00      6.103D+02
                             7.640D-01      1.990D-01     0.000D+00      5.665D+02
                             7.640D-01      1.990D-01     1.000D-02      4.900D+02
                             7.640D-01      1.990D-01     2.700D-02      4.250D+02
                             7.640D-01      1.990D-01     3.700D-02      3.485D+02),
      ),),
      TEMP_MS = _F(P = 1.100D+01
                   SEUIL = 4.700D-01
                   AKM = -3.276D+01
                   BKM.= 1.406D+01
                   TPLM = -3.497D+00 ),

      GRAIN_AUST = _F (DREF = 11.D-6
                       A = 11200.),

        );
```

Résultat de l'opération de saisie ci-dessus fournissant en langage de commande *Aster* la définition d'un comportement métallurgique au refroidissement.

Visualisation des points saisis et calculés pour une histoire d'un TRC

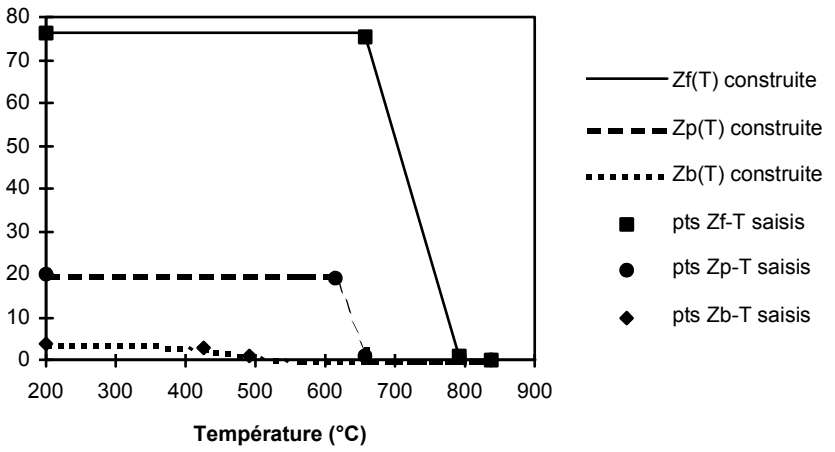


Figure Annexe1-a : Exemple d'histoire thermo-métallurgique issue d'un TRC et intégrée au modèle

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)