

MODÉLISATION DES TRANSFORMATIONS DE PHASE À L'ÉTAT SOLIDE DANS LES ACIERS ET APPLICATION AU TRAITEMENT THERMIQUE PAR INDUCTION

THÈSE N° 1679 (1997)

PRÉSENTÉE AU DÉPARTEMENT DES MATÉRIAUX

ÉCOLE POLYTECHNIQUE FÉDÉRALE DE LAUSANNE

POUR L'OBTENTION DU GRADE DE DOCTEUR ÈS SCIENCES TECHNIQUES

PAR

Alain JACOT

Ingénieur en sciences des matériaux diplômé EPF
originaire du Locle (NE)

acceptée sur proposition du jury:

Prof. M. Rappaz, directeur de thèse
Dr S. Denis, corapporteur
Prof. R. Glardon, corapporteur
Dr D. Mari, corapporteur
Dr R. Reed, corapporteur

Lausanne, EPFL
1997

Résumé

La première partie de ce travail a consisté à développer et réunir des outils logiciels permettant de simuler le traitement thermique par induction et trempe au défilé de pièces 3D-axisymétriques. La thermique du procédé est décrite par une méthode d'éléments finis permettant de résoudre l'équation de diffusion de la chaleur avec un terme de radiation et le terme de source lié à l'effet Joule. Ce dernier provient des calculs électromagnétiques réalisés dans une formulation mixte éléments finis/éléments frontières. La description des transformations de phase est basée sur un principe d'additivité qui permet, à partir de diagrammes TTT tirés de la littérature, de calculer l'évolution des fractions volumiques des différentes phases (austénite, ferrite, perlite, bainite et martensite) et des duretés correspondantes.

Une attention particulière a été portée à la description du refroidissement opéré par la douche utilisée pour la trempe au défilé. Les coefficients de transfert à la surface de la pièce ont été déterminés par des méthodes inverses basées sur des mesures de la température au sein de la pièce. Des valeurs ont été obtenues pour différents débits d'aspersion et concentrations d'adjuvants. Cette partie préliminaire a été complétée par des mesures de la perméabilité magnétique de l'acier 42CrMo4 dont sont constituées les pièces traitées. Elle comprend également des essais dilatométriques effectués pour vérifier le principe d'additivité utilisé dans la simulation.

Le modèle a pu être appliqué avec succès à trois cas de complexité croissante : chauffage par induction d'une pièce cylindrique sans trempe, trempe au défilé d'une pièce cylindrique, trempe au défilé d'une pièce non cylindrique. Pour chaque cas, les résultats de la simulation ont été confrontés à l'expérience par des comparaisons sur la température, les profils de dureté et les microstructures.

Le second volet de ce travail a été consacré à l'étude des transformations de phase au chauffage dans les aciers de composition hypoeutectoïde. Dans cette partie, les transformations de phases ont été abordées à l'échelle de la microstructure selon une approche dite microscopique. Plusieurs modèles ont été développés pour décrire les différentes étapes de l'austénitisation : (i) dissolution de la perlite, (ii) transformation de la ferrite en austénite et homogénéisation, (iii) croissance du grain austénitique. Dans un premier temps, chaque étape a fait l'objet d'un modèle séparé.

La dissolution de la perlite a été décrite par un modèle d'éléments finis comprenant une procédure de déformation du maillage pour le traitement de la migration des interfaces. Le modèle permet de résoudre l'équation de diffusion du carbone dans l'austénite et de calculer le déplacement des interfaces en tenant compte de l'influence de la courbure sur l'équilibre thermodynamique. Il permet de prédire la vitesse de dissolution et la forme de l'interface pendant les états transitoires et stationnaires de la transformation. Le modèle a pu être appliqué avec succès à de faibles valeurs de surchauffe (de 0 à 3°C environ). L'apparition d'un régime de transformation différent aux surchauffes plus élevées a été discutée.

La transformation de la ferrite en austénite a été décrite par un modèle de volumes finis avec pseudo-suivi de front permettant de résoudre l'équation de diffusion du carbone dans un domaine mono-, bi- ou tridimensionnel constitué

de zones de ferrite et d'austénite. Il a permis de calculer la cinétique de transformation en fonction de la température et de la microstructure initiale. La comparaison entre les cinétiques de transformation calculées et déterminées expérimentalement a montré que le modèle décrit de manière satisfaisante le processus de dissolution de la ferrite, mais que les vitesses prédites sont légèrement plus faibles que les valeurs expérimentales. Cet effet a été attribué aux éléments d'alliage contenus dans l'acier Ck45 utilisé pour les échantillons. L'autre explication avancée est un effet stéréologique dû à la résolution de l'équation de diffusion dans une coupe plutôt que dans un domaine tridimensionnel. Cet effet a pu être vérifié par la comparaison de simulations en 2 et 3 dimensions.

La croissance du grain austénitique a été décrite par deux modèles basés respectivement sur une méthode de Monte Carlo et une approche mécanique. Une procédure permettant de calibrer les paramètres des modèles a été présentée et appliquée à l'acier Ck45. La valeur de l'exposant n de la loi $\bar{d} = K t^{1/n}$ (où \bar{d} est le diamètre moyen et t le temps) a été déterminée pour les deux modèles. Le modèle mécanique ($n=2$) s'est révélé parfaitement adapté à la description de la croissance de grain idéale. Cependant, le modèle de Monte Carlo ($n=2.3$) décrit mieux le comportement non idéal de l'acier Ck45. L'influence des impuretés devrait toutefois pouvoir être prise en compte dans les deux modèles si un meilleur accord est recherché.

Finalement, un modèle combiné réunissant les résultats obtenus pour les différentes étapes de la transformation a été présenté. Il a permis de montrer que l'hypothèse consistant à dissocier l'austénitisation en trois étapes est valable pour la plupart des conditions de traitement. Ce modèle constitue un premier pas vers une modélisation microscopique de l'ensemble du processus d'austénitisation.

Abstract

In the first part of this work a comprehensive model of the continuous hardening of 3D-axisymmetric steel components by induction heating has been developed. In the model, the Maxwell and heat flow equations are solved using a mixed numerical formulation : the inductor and the workpiece are enmeshed with finite elements (FE) but boundary elements (BE) are used for the solution of the electromagnetic equations in the ambient air. This method allows the inductor to be moved with respect to the workpiece without any remeshing procedure. The heat flow equation is solved for the workpiece using the same FE mesh. For the thermal boundary conditions, a net radiation method has been implemented to account for grey diffuse bodies and the viewing factors of the element facets are calculated using a "shooting" technique. These calculations have been coupled to a metallurgical model describing the solid state transformations that occur during both heating and cooling. From the local thermal history, the evolution of the various phase fractions are predicted from TTT-diagrams using an additivity principle. A micro-enthalpy method has been implemented in the heat flow calculations in order to account for the latent heat released by the various transformations. At each time step, the local properties of the material, in particular its magnetic permeability, are updated according to the new temperatures and magnetic field.

Special attention has been taken for the description of the boundary conditions associated with the water spraying below the inductor. The heat transfer coefficient has been deduced from the inverse modelling of temperatures measured at various locations of a test piece. This preliminary work has been complemented with measurements of the magnetic permeability of the 42CrMo4 steel from which the workpieces are made. This part of the study also includes dilatometric measurements for the verification of the additivity principle used in the simulation.

The model has been applied to three cases of increasing complexity : induction stream heating of a steel cylinder without quenching, stream quenching of a steel cylinder and, finally, stream quenching of a non-cylindrical workpiece. The results of the simulation have been compared with experimental cooling curves, microstructures and hardness profiles.

In the second part of this work, the phase transformations that occur in hypoeutectoid steels during heating have been investigated at the scale of the microstructure according to a microscopic approach. Several models have been developed in order to describe the various steps of the austenitisation process : (i) pearlite dissolution, (ii) transformation of ferrite into austenite and homogenization, (iii) grain growth in austenite. In a first approach, each step has been modeled separately.

The dissolution of pearlite has been described using a two-dimensional finite element model with a deforming mesh and a remeshing procedure. The diffusion equation has been solved in austenite (γ) for a typical domain representative of a periodic structure of ferrite (α) and cementite (θ) lamellae. The α/γ and θ/γ interfaces are allowed to move with respect to the local equilibrium condition, including curvature effects via the Gibbs-Thompson coefficient. The model has been used to predict the concentration field and the shape of the

interface at different stages of the pearlite dissolution. Maps representing the steady state dissolution rate as a function of the temperature and lamellae spacing have been obtained for small values of overheating. The appearance of a non-steady state regime at higher temperature has been discussed.

The transformation of ferrite into austenite has been described using a pseudo-front tracking finite volume approach for solving the diffusion equation in a 1D, 2D or 3D domain. At the start of the computation, the volume is made of ferritic particles and austenitic zones resulting from the pearlite dissolution. The model allows to calculate the kinetics of the phase transformation as a function of the temperature and the initial microstructure. Although the comparison of the transformation kinetics with experimental results was quite satisfactory, it appeared that the calculated kinetics were slightly slower. This effect has been attributed to the other alloying elements which are contained in the Ck45 steel used for the experiments. This discrepancy has also been explained by a stereological effect which is due to the calculation in a 2D section instead of a 3D domain as demonstrated by a comparison of 2D and 3D simulations.

The austenitic grain growth has been described with two models based respectively on a Monte Carlo technique and a mechanical approach. A methodology for obtaining a correspondence between the simulation time scale and real time has been presented and applied to the Ck45 steel. The value of the exponent n of the grain growth law $\bar{d} = K t^{1/n}$ (where \bar{d} is the mean diameter and t the time) has been determined for both models. The mechanical model ($n=2$) turned out to describe perfectly the case of normal grain growth as it occurs in liquid-gas systems. However the results of the Monte Carlo simulation ($n=2.3$) are in better agreement with the non-ideal behaviour of the Ck45 steel. The influence of the impurities and particles which are present in real materials should be taken into account in both models if a more quantitative agreement is to be obtained.

Finally, a combined model coupling the various steps of the austenitisation process has been proposed. It allowed to show that the assumption consisting in dividing the process in three separate steps is valid in most cases. This combined model is a first attempt for a comprehensive modelling of the austenitisation process.

Avant-propos

Ce travail de thèse a été réalisé au Laboratoire de Métallurgie Physique (LMPH) du département des matériaux de l'EPFL. Il a reçu le soutien financier de la Commission pour la Technologie et l'Innovation (CTI) et des sociétés AMYSA-Yverdon SA, Bobst SA et Calcom SA. Que ces sociétés et institutions reçoivent mes plus sincères remerciements pour leur précieuse participation.

Je tiens également à exprimer ma profonde reconnaissance à mon directeur de thèse, le Professeur Michel Rappaz, qui m'a offert la possibilité réaliser ce travail dans les meilleures conditions et qui m'a guidé durant quatre années avec une très grande compétence et un enthousiasme formidablement communicatif. Je le remercie également pour l'excellente ambiance de travail et la bonne humeur qu'il a réussi à instaurer dans son groupe.

Mes remerciements s'adressent également :

au Prof. W. Kurz, directeur du LMPH, qui m'a accueilli dans son laboratoire et dans lequel il a su faire régner à la fois des compétences scientifiques exceptionnelles et une atmosphère de travail détendue,

au Dr D. Mari, qui a largement contribué à l'aboutissement de ce travail par sa participation aux mesures, à de nombreuses discussions ainsi qu'à l'évaluation de ce document,

au Dr R. Reed, qui m'a reçu généreusement à l'Université de Cambridge dans le cadre d'une collaboration passionnante, mais également pour avoir accepté de faire partie du jury de thèse,

à Mme Dr. S. Denis, au Prof. R. Glardon et au Prof. H. Kausch pour avoir accepté de consacrer du temps à l'évaluation de ce travail,

au Prof. J. Rappaz, pour avoir initié les projets sur la modélisation du chauffage par induction à l'EPFL,

au Dr M. Swierkosz, pour l'aide apportée au couplage du module d'induction,

à J.-L. Desbiolles pour avoir répondu avec une patience sans limites à d'innombrables questions sur la programmation et l'univers Unix, mais aussi pour les nombreuses discussions sur la montagne et sa clairvoyance sur les questions d'actualité,

à Ch.-A. Gandin, Ph. Rousset et Ch. Charbon pour les discussions scientifiques, mais aussi pour leur amitié et les diverses activités partagées durant nos loisirs,

à X. Doré, pour les résultats de Thermo-Calc et le partage agréable de notre bureau,

à T. Jalanti et Ph. Rousset pour les nombreux dépannages de Macintosh,

à J. Stramke, B. Neal et l'atelier du DMX, pour la préparation des expériences, la métallographie et la fabrication des échantillons,

à S. Bourban et à tous mes collègues du LMPH pour l'ambiance exceptionnelle qui règne dans le laboratoire,

à mes parents qui m'ont soutenu et encouragé tout au long de mes études,

à Stéphanie qui m'a beaucoup aidé durant la période de rédaction,

et à tous ceux que j'oublie ...

TABLE DES MATIÈRES

1. Introduction	11
1.1 Généralités	11
1.2 Le traitement thermique par induction	11
1.3 Modélisation	13
1.4 Objectifs	14
2. Rappels théoriques et revue bibliographique	17
2.1 Décomposition de l'austénite	17
2.1.1 Phases et microstructures	17
2.1.2 Cinétique	25
2.1.3 Modélisation	28
2.2 Transformations de phase au chauffage	34
2.2.1 Phénoménologie	34
2.2.2 Cinétique	37
2.2.3 Modélisation	38
2.3 Croissance du grain austénitique	40
2.3.1 Mécanismes de croissance et modèles analytiques	40
2.3.2 Modèles numériques	43
2.4 Physique du procédé de traitement thermique par induction	46
2.4.1 Induction	46
2.4.2 Thermique	49
2.4.3 Transformations de phase	54
3. Approche macroscopique - étude du procédé de traitement thermique par induction et trempe au défilé	57
3.1 Description du logiciel de simulation	58
3.1.1 Module électromagnétique	59
3.1.2 Module métallurgique	60
3.1.3 Module de radiation	64
3.1.4 Couplage avec le logiciel 3-MOS	67
3.1.5 Méthodes inverses	71
3.2 Caractérisation des conditions aux limites	72
3.2.1 Montage expérimental	73
3.2.2 Mise en oeuvre de la méthode inverse	74
3.2.3 Résultats et discussion	76

3.3 Détermination des propriétés physiques	79
3.3.1 Mesure de la perméabilité magnétique de l'acier 42CrMo4	79
3.3.2 Cinétique des transformations de phase à l'état solide dans l'acier Ck45	81
3.4 Application à un cas de chauffage au défilé	84
3.4.1 Montage expérimental	84
3.4.2 Mise en oeuvre du modèle	85
3.4.3 Résultats et discussion	85
3.5 Application à la trempe au défilé d'une pièce cylindrique	86
3.5.1 Conditions expérimentales	86
3.5.2 Résultats et discussion	88
3.6 Application à la trempe au défilé d'une pièce industrielle non cylindrique	89
3.6.1 Montage et travail expérimental	89
3.6.2 Mise en oeuvre du modèle	91
3.6.3 Résultats et discussion	93
3.7 Conclusion du chapitre 3	99
4. Approche microscopique - étude de l'austénitisation d'un acier hypoeutectoïde	101
4.1 Dissolution de la perlite	102
4.1.1 Description du modèle	104
4.1.2 Validation numérique	108
4.1.3 Application à un alliage idéal	108
4.1.4 Application à l'alliage Fe-C	113
4.1.5 Conclusion	117
4.2 Dissolution de la ferrite	118
4.2.1 Description du modèle	119
4.2.2 Travail expérimental	123
4.2.3 Résultats de simulation	126
4.2.4 Comparaison et discussion	136
4.2.5 Conclusion	142
4.3 Croissance du grain austénitique	143
4.3.1 Description des modèles	144
4.3.2 Travail expérimental	147
4.3.3 Résultats de simulation	151
4.3.4 Calibrage des paramètres des modèles	158
4.3.5 Conclusion	163
4.4 Combinaison des modèles présentés au chapitre 4	163
4.4.1 Méthode	164
4.4.2 Résultats et discussion	165
4.5 Conclusion du chapitre 4	169

5.	Conclusion	171
6.	Références	173
7.	Annexes	179
7.1	Comparaison des règles d'additivité	179
7.2	Formule empirique donnant le coefficient de transfert de la douche de trempe au défilé	181
7.3	Données numériques de la modélisation du traitement thermique par induction	182
7.4	Solution analytique approximative de l'équation de diffusion stationnaire appliquée au cas de la dissolution de la perlite (modèle de Speich (1969))	188
7.5	Modèle de différences finies 1D	191
7.6	Données numériques du modèle de dissolution de la ferrite	193
7.7	Modélisation de la croissance du grain par un modèle mécanique. Justification de la relation 4.51	195
7.8	Micrographies utilisées pour déterminer l'évolution de la taille du grain austénitique dans l'acier Ck45	196
7.9	Méthode inverse utilisée pour convertir des cinétiques de croissance granulaire anisothermes en données isothermes	200
8.	Table des symboles	203
9.	Curriculum Vitae	207
10.	Publications	209

1. INTRODUCTION

1.1 Généralités

Le traitement thermique de l'acier est un art connu depuis l'époque de la Grèce antique. Dans l'Odyssée, Homère racontait déjà que des métallurgistes fabriquaient des armes résistantes en chauffant le fer à blanc puis en le plongeant dans l'eau.

De nos jours les traitements thermiques de l'acier sont devenus des procédés appliqués à très large échelle. Leur ampleur peut être comparée à la quantité d'acier produite annuellement dans le monde (500'000 tonnes), si l'on sait que la plupart des pièces fabriquées en acier faiblement ou fortement allié subissent un traitement thermique avant d'être mises en service.

Le traitement thermique permet de faire apparaître et d'exploiter certaines propriétés de l'acier telles que dureté, résilience et résistance à la corrosion. En général, il consiste en une opération de chauffage suivie d'un refroidissement contrôlé faisant apparaître les propriétés recherchées. Les traitements thermiques sont généralement liés à des transformations de phase à l'état solide. C'est le cas notamment des traitements par austénitisation, trempe et revenu, qui sont souvent appliqués aux aciers au carbone ou faiblement alliés. Le procédé consiste à chauffer la pièce jusqu'à l'obtention de la phase austénitique du fer (cubique à face centrée), puis de la refroidir à température ambiante. La microstructure obtenue dépendra de la vitesse de refroidissement et de la trempabilité de l'acier. Pour des vitesses élevées, comme c'est le cas lorsque la pièce est trempée à l'eau, une phase métastable apparaît : la martensite. Cette structure est responsable de la dureté des pièces trempées mais aussi de leur fragilité. C'est pourquoi le traitement est généralement suivi d'un revenu permettant d'améliorer la résilience du produit.

1.2 Le traitement thermique par induction

Le chauffage par induction est un procédé permettant de chauffer des matériaux conducteurs par l'application d'un champ électromagnétique variable. Ce dernier est généré par un inducteur qui est placé autour de la pièce et dans lequel on fait circuler un courant alternatif. Les variations de flux magnétique induisent dans la pièce des courants de Foucault qui provoquent un échauffement par effet Joule. Comme les métaux sont en général de bons conducteurs électriques, le chauffage par induction est utilisé pour de nombreuses applications en métallurgie. On citera les procédés de soudage, brasage, refusion de zone et forgeage à chaud. Le chauffage par induction est également intéressant pour le traitement thermique car, comparé à des méthodes classiques en four, il présente les avantages d'offrir un haut rendement, de permettre des cadences de production élevées, tout en étant propre, silencieux et automatisable. Mais son avantage principal réside certainement dans la possibilité de contrôler la profondeur de pénétration par le réglage de la fréquence.

Le procédé de traitement thermique par induction et trempe au défilé consiste à déplacer verticalement la pièce à traiter à travers un système inducteur-douche (v. Fig. 1.1). Le chauffage réalisé par induction est calibré afin d'austénitiser la

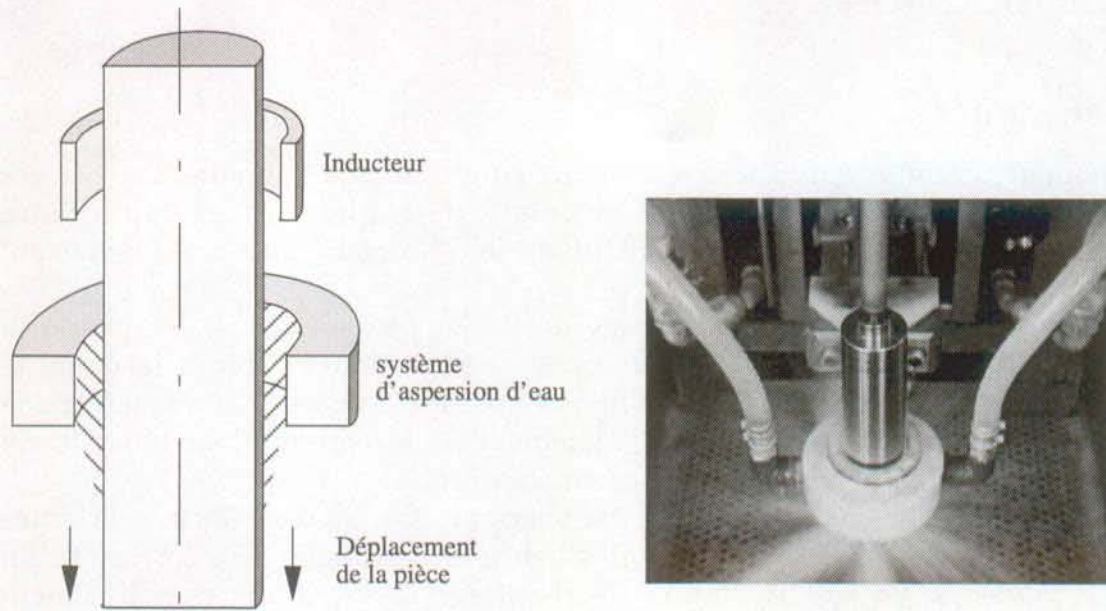


Fig. 1.1 : Procédé de traitement thermique par induction et trempe au défilé.

pièce sur la profondeur souhaitée. La douche située au-dessous de l'inducteur effectue la trempe dans la zone venant d'être chauffée. Ce procédé permet de traiter des pièces en continu tout en contrôlant la profondeur de trempe. Les propriétés initiales au coeur de la pièce sont en effet volontairement conservées afin de préserver une certaine ductilité au produit. Les phases obtenues dans une pièce en acier de type Ck45 traitée par induction sont illustrées à la figure 1.2. Pour des profondeurs croissantes, on trouvera successivement des zones de martensite, bainite, bainite + perlite et ferrite + perlite. Ces microstructures sont naturellement corrélées à l'évolution de la température locale au chauffage et au refroidissement.

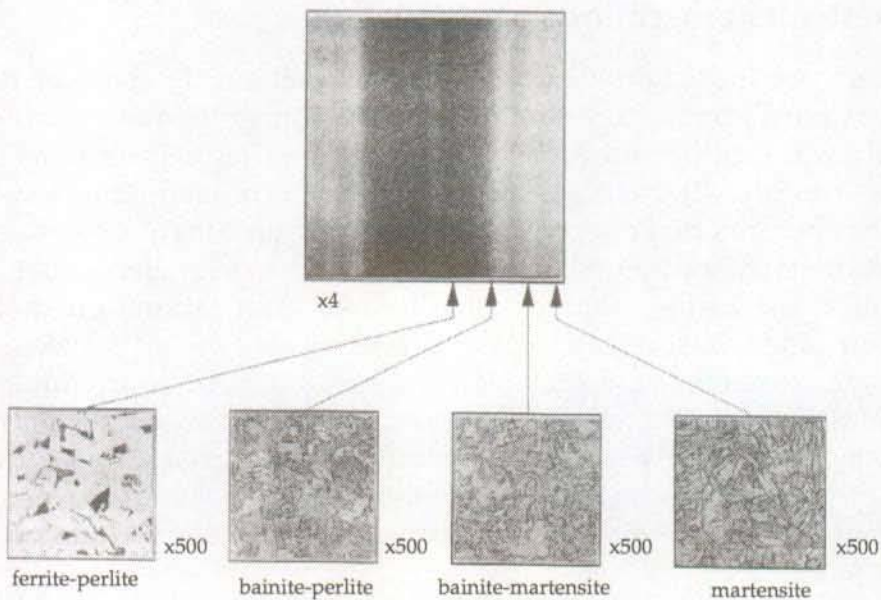


Fig. 1.2 : Microstructures observées dans une pièce traitée par induction et trempe au défilé (Totten, 1993).

L'optimisation du procédé de traitement thermique par induction est une tâche difficile car de nombreux paramètres entrent en jeu : géométrie de l'inducteur, puissance et fréquence du générateur, géométrie et débit de la douche, vitesse de défilé, etc. En pratique, la mise au point du procédé nécessite souvent la fabrication de plusieurs prototypes d'inducteurs et de nombreux essais avant l'obtention de conditions optimales. La modélisation numérique trouve ici un champ d'application intéressant en permettant de diminuer le nombre d'essais par des calculs préliminaires.

1.3 Modélisation

La simulation numérique dans le domaine des procédés a connu un essor spectaculaire ces dernières années. Son succès est expliqué par l'intérêt qu'offre la résolution des équations de conservation. Ces solutions permettent en effet de prédire certaines grandeurs physiques essentielles telles que le champ thermique, les vitesses d'écoulements, les contraintes et déformation et les phénomènes électromagnétiques dans une pièce lors d'une mise en oeuvre. A ces thèmes il faut encore ajouter la modélisation des microstructures qui joue un rôle prépondérant dans la prédiction des défauts, des textures et des propriétés mécaniques finales. La modélisation des microstructures est toutefois un problème difficile, car, contrairement aux phénomènes cités plus haut, il n'y a pas de loi ou d'équation de conservation permettant de décrire de manière générale les transformations de phase à l'échelle du procédé. En dépit de ces difficultés, des progrès importants ont été réalisés dans les domaines de la croissance du grain (Anderson, 1984; Kawasaki, 1990; Frost, 1988) de la recristallisation (Rollet, 1992; Pande, 1993; Yoshinaga, 1996), de la formation de structures de grains en solidification (Rappaz-M, 1989; Gandin, 1994) et de la croissance dendritique (Warren, 1995; Juric, 1996). Ces modèles sont basés sur des techniques aussi diverses que les automates cellulaires, les méthodes de Monte Carlo, les méthodes de champ de phase ou de suivi de front. Ils permettent de décrire le type de microstructure apparaissant en fonction des conditions de mise en oeuvre tout en offrant des images qui reproduisent la microstructure de manière réaliste. Les techniques de modélisation des microstructures développées pour le cas de la solidification ou de la recristallisation n'ont été appliquées que de manière très limitée au domaine du traitement thermique des aciers. Ceci peut s'expliquer par la complexité et le nombre important de transformations de phase pouvant apparaître au cours d'un cycle thermique. Les approches réalisées dans ce domaine sont toutefois nombreuses et de natures très différentes. Le type d'approche dépend essentiellement de l'échelle de la modélisation (taille du procédé ou échelle de la microstructure) et du nombre de transformations de phase que l'on souhaite prendre en compte.

Pour décrire les transformations de phase à l'échelle de la pièce, l'approche généralement utilisée consiste à décrire les microstructures en se basant sur des diagrammes TTT ou TRC¹ et sur la thermique locale donnée par une solution de l'équation de la chaleur pour l'ensemble de la pièce. Ces méthodes permettent de

¹ Le diagramme TTT (Temps Température Transformation) indique le temps de début et la durée d'une transformation isotherme en fonction de la température du traitement. Le diagramme TRC (Transformation en Refroidissement Continu) est son équivalent pour des conditions anisothermes.

prendre en compte l'ensemble des microstructures mais restent assez éloignées des mécanismes physiques de base.

Pour les transformations de phase diffusives, une approche alternative consiste à résoudre l'équation de diffusion dans un petit domaine représentatif de la microstructure. L'évolution des phases présentes est décrite en calculant l'avance des interfaces sur la base du bilan de soluté et du diagramme d'équilibre. Ces modèles ont été développés essentiellement en 1 dimension et appliqués à la transformation ferrite \rightarrow austénite au chauffage (Judd, 1968; Atkinson, 1995) et au refroidissement (Enomoto, 1992; Ågren, 1992), ainsi qu'à l'homogénéisation (Karlsson, 1975). Ces méthodes ont l'avantage de décrire les mécanismes physiques gouvernant la réaction, mais restent limitées à la description d'un type de transformation et à des domaines de taille restreinte.

Au cours de ce travail, les deux approches seront abordées de manière distincte. L'approche macroscopique sera développée pour décrire les microstructures et les différentes grandeurs physiques intervenant dans le procédé de traitement thermique par induction et trempe au défilé, alors que l'approche diffusive sera abordée dans le but de décrire les phénomènes qui ont lieu au chauffage dans un acier hypoeutectoïde.

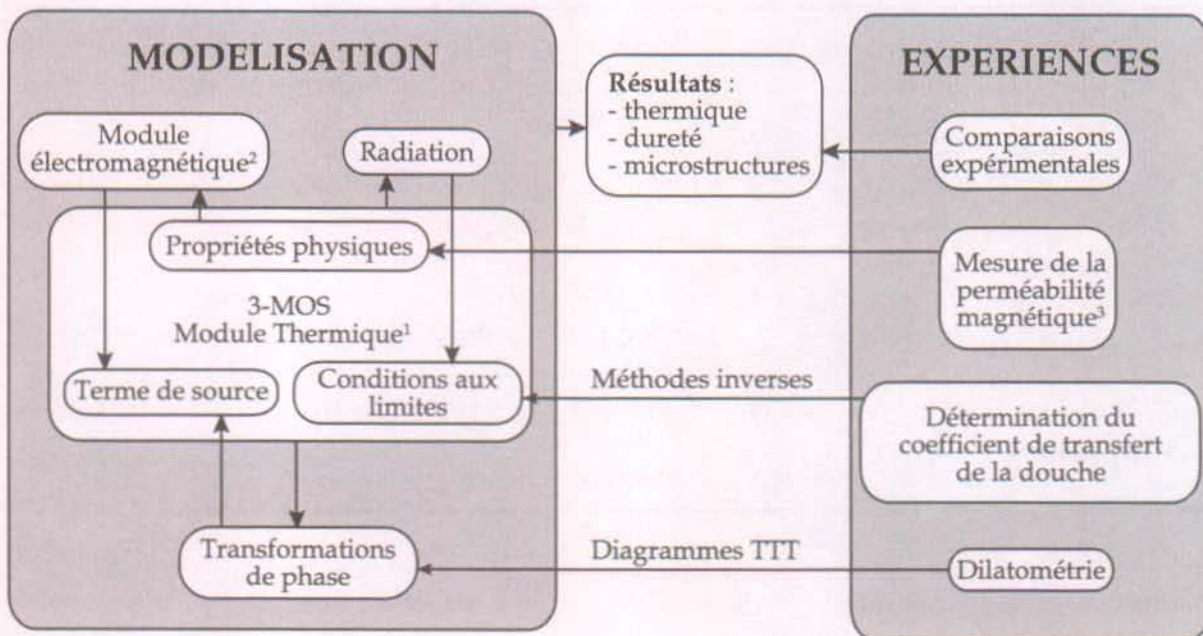
1.4 Objectifs

Le travail présenté ici s'inscrit dans le cadre des travaux entrepris au Laboratoire de Métallurgie Physique (LMPH) dans le domaine de la modélisation des microstructures et des transformations de phase. Il a été réalisé en collaboration avec le Département de Mathématiques de l'EPFL et avec les sociétés AMYSA Yverdon SA, Bobst SA et Calcom SA. Il se concentre sur les transformations de phase à l'état solide dans les aciers faiblement alliés. Le travail comporte deux volets constitués d'une approche macroscopique d'une part, et d'une approche microscopique d'autre part.

L'approche macroscopique consistait à développer des outils logiciels permettant de simuler numériquement le traitement thermique par induction et trempe au défilé. Le logiciel d'éléments finis 3-MOS (Micro-Macroscopic Modelling Of Solidification) développé au LMPH au cours de ces 10 dernières années (Thévoz, 1990) constitue le coeur du programme. Il permet de calculer les écoulements (équation de Navier-Stokes) et la diffusion thermique (équation de Fourier) en 2 dimensions pour des géométries cartésiennes ou axisymétriques. Seule la partie thermique en géométrie axisymétrique a été utilisée pour le cas traité. De nouveaux modules ont été développés et implémentés dans 3-MOS afin de prendre en compte les spécificités du traitement thermique par induction : un solveur électromagnétique développé au département de mathématiques de l'EPFL (Rappaz-J, 1995) pour calculer les courants induits et la chaleur dégagée par effet Joule, un module de radiation pour estimer les échanges radiatifs d'une pièce axisymétrique de profil quelconque et finalement, un module de transformations de phase pour décrire les microstructures obtenues au cours du traitement. Les objectifs du présent travail étaient de développer les modules de radiation et de transformations de phase, puis de réaliser l'implémentation et le couplage des différents modules dans 3-MOS. Des expériences étaient également au programme afin d'effectuer des comparaisons et de fournir certaines données

manquantes au calcul. La figure 1.3 illustre les relations entre les différents modules du logiciel ainsi que l'apport de la partie expérimentale.

Le deuxième volet du présent travail consistait à aborder les transformations de phase à l'état solide à l'échelle de la microstructure. Le choix s'est porté sur les transformations de phase au chauffage dans les aciers hypoeutectoïdes. Ce choix a été motivé par le petit nombre de travaux effectués dans ce domaine et par l'importance que revêt la phase de chauffage dans un traitement thermique. L'état de l'austénite à la fin du chauffage (taille du grain et distribution du carbone) conditionne en effet les cinétiques de transformation au cours du refroidissement et influence de ce fait la microstructure et les propriétés finales du produit.



1: Logiciel développé auparavant au LMPH.

2: Module développé séparément par Dr M. Swierkosz au Département de Mathématiques de l'EPFL.

3: Mesures réalisées par Prof. M.M. Radulescu, Tech. Univ. of Cluj-Napoca, Roumanie.

Fig. 1.3 : Structure du travail réalisé sur le procédé de traitement thermique par induction.

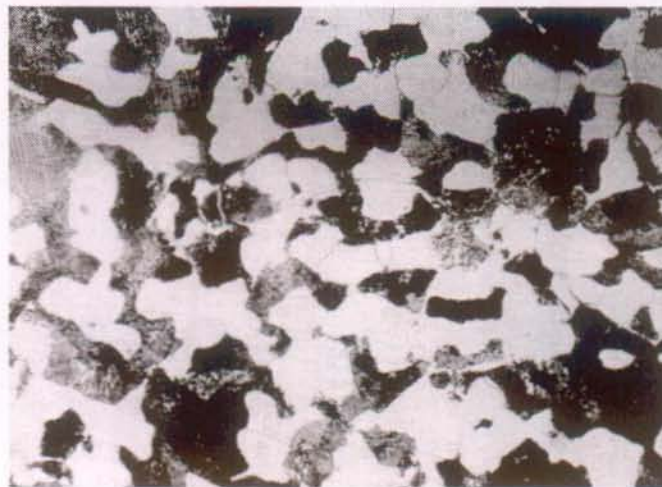


Fig. 1.4 : Microstructure ferrito-perlitique d'un acier hypoeutectoïde normalisé.

Les aciers hypoeutectoïdes, dans leur état normalisé, sont constitués à température ambiante d'une microstructure ferrito-perlitique (v. Fig. 1.4). Lorsqu'ils sont portés à haute température, différents phénomènes se produisent : transformation des zones perlitiques en austénite, dissolution de la ferrite proeutectoïde, homogénéisation du carbone en solution dans l'austénite et croissance du grain austénitique. Au cours de ce travail, plusieurs modèles ont été développés afin de décrire chacun de ces phénomènes. Le tableau 1.1 présente les techniques utilisées et leur application.

Phénomène modélisé	Méthode numérique	Dimension
Transformation de la perlite en austénite	<ul style="list-style-type: none"> Modèle diffusif d'éléments finis avec maillage déformant et remaillage 	2D
Transformation de la ferrite en austénite et homogénéisation de la concentration de carbone dans l'austénite	<ul style="list-style-type: none"> Modèle diffusif de différences finies avec suivi d'interface 	1D
	<ul style="list-style-type: none"> Modèle diffusif de volume finis avec pseudo-suivi de front 	2D/3D
Croissance du grain austénitique	<ul style="list-style-type: none"> Méthode de Monte Carlo 	2D
	<ul style="list-style-type: none"> Modèle mécanique 	2D

Tableau 1.1 : Modèles microscopiques développés pour décrire les transformations de phase et la croissance du grain austénitique lors du chauffage d'un acier hypoeutectoïde.

2. RAPPELS THÉORIQUES ET REVUE BIBLIOGRAPHIQUE

2.1 Décomposition de l'austénite

2.1.1 Phases et microstructures

Présentons tout d'abord le diagramme d'équilibre du système fer-carbone qui constitue certainement l'outil de base pour la description des transformations de phase dans les aciers non alliés et faiblement alliés. Dans l'étude des transformations de phase à l'état solide, on ne s'intéresse en général qu'à la partie inférieure du diagramme (Fig. 2.1) ignorant la réaction péritectique qui donne lieu, vers 1500°C, à la formation d'austénite (γ) à partir des phases δ et liquide. Le diagramme indique la présence d'une transformation allotropique du fer γ (cubique faces centrées) en fer α (cubique centré) à 912°C. Il indique également l'existence d'une réaction eutectoïde à 727°C où la cémentite (Fe_3C) est en équilibre avec de la ferrite et de l'austénite contenant respectivement 0.02%pds et 0.77%pds de carbone. Les lignes en traits interrompus correspondent à l'équilibre fer - graphite, légèrement plus stable mais en général pas réalisé dans les aciers.

La simplicité du diagramme d'équilibre pourrait laisser entendre que les transformations de phase à l'état solide dans les aciers non alliés se résument à une transformation eutectoïde, parfois précédée de la précipitation d'une phase primaire. Toutefois, les transformations de phase à l'état solide se déroulent généralement dans des conditions très éloignées de l'équilibre thermodynamique, donnant lieu à des phases et des microstructures très diverses. Nous allons brièvement passer en revue les principales structures et morphologies qui découlent de la décomposition de l'austénite, en montrant la variété des mécanismes qui peuvent opérer selon la teneur en carbone et la vitesse de refroidissement.

Ferrite

La ferrite est la phase cubique centré du fer (fer α). Elle peut se présenter sous différentes morphologies selon la teneur en éléments d'alliages, la vitesse de refroidissement et la taille du grain austénitique (Fig. 2.2). Des revues des différentes morphologies ont été présentées par Krauss (1995) et Wilson (1994). Les points principaux sont reportés ici.

Ferrite polygonale ou équiaxe (Fig. 2.2 (a))

Cette forme de ferrite primaire est observée dans les aciers à bas carbone comme dans les aciers hypoeutectoïdes. Elle se forme à des températures élevées ou à faible vitesse de refroidissement par germination aux joints de grains de l'austénite, de préférence sur les arêtes ou les coins. Pour cette raison, on parle parfois de ferrite allotriomorphe (en anglais : GBA pour "grain boundary allotriomorph"). Les grains de ferrite polygonale forment en général une interface possédant une relation d'orientation avec la matrice de l'un des grains de l'austénite, facilitant ainsi la germination. La croissance se fait ensuite par le déplacement de l'interface incohérente à l'intérieur de l'autre grain. L'énergie de déformation engendrée par la transformation est quasiment nulle et la densité de dislocations au sein de ce type de ferrite reste faible.

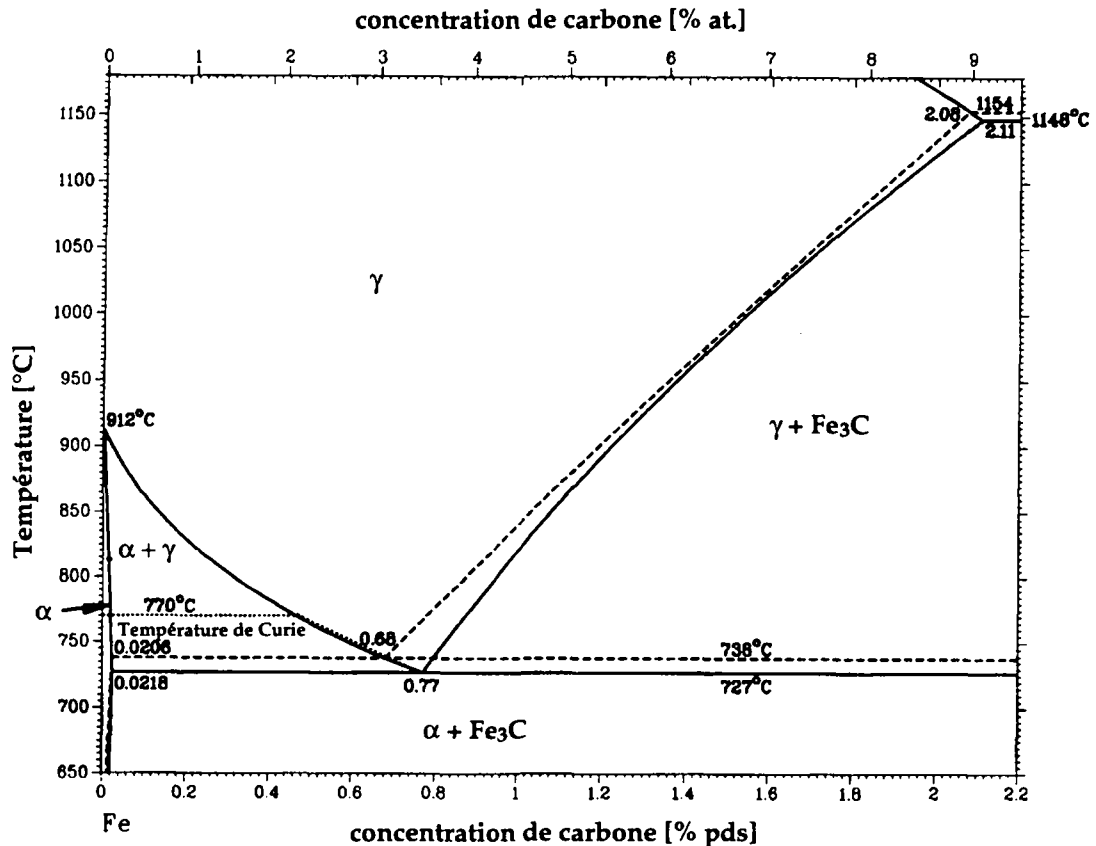


Fig. 2.1 : Diagramme d'équilibre du système fer-carbone. Adapté de (Massalski, 1986).

Ferrite de Widmanstätten (Fig. 2.2 (b))

A des vitesses de refroidissement légèrement supérieures, la morphologie sphéroïdale de la ferrite équiaxe ne permet pas une croissance assez rapide et fait place à la ferrite de Widmanstätten. Cette morphologie en aiguilles ou en plaques facilite le rejet d'éléments d'alliage. Elle se forme sur les allotriomorphes et se propage à l'intérieur des grains d'austénite. Cette structure est favorisée par un grain austénitique grossier et une vitesse de refroidissement rapide. On cherche généralement à l'éviter en raison de son effet négatif sur les propriétés mécaniques (diminution de la résistance et de la ténacité). Elle augmente la dureté du produit. L'addition d'éléments de microalliage modifie la proportion de ferrite de Widmanstätten : l'adjonction de titane favorise sa présence alors que le niobium la réduit (Bodnar, 1994).

Ferrite quasi-polygonale ou massive (Fig. 2.2 (c))

Dans les aciers à très bas carbone, il est possible par un refroidissement rapide de former de la ferrite sans changement de composition. Cette transformation se déroule par un mécanisme de diffusion à courte distance. Elle donne lieu à des grains de ferrite relativement grossiers présentant des interfaces irrégulières. Ce dernier phénomène est expliqué par un effet de drainage de soluté (Hillert, 1984). Cette morphologie est observée à des températures plus basses que la ferrite équiaxe. Elle se caractérise par une haute densité de dislocations et des propriétés mécaniques intéressantes.

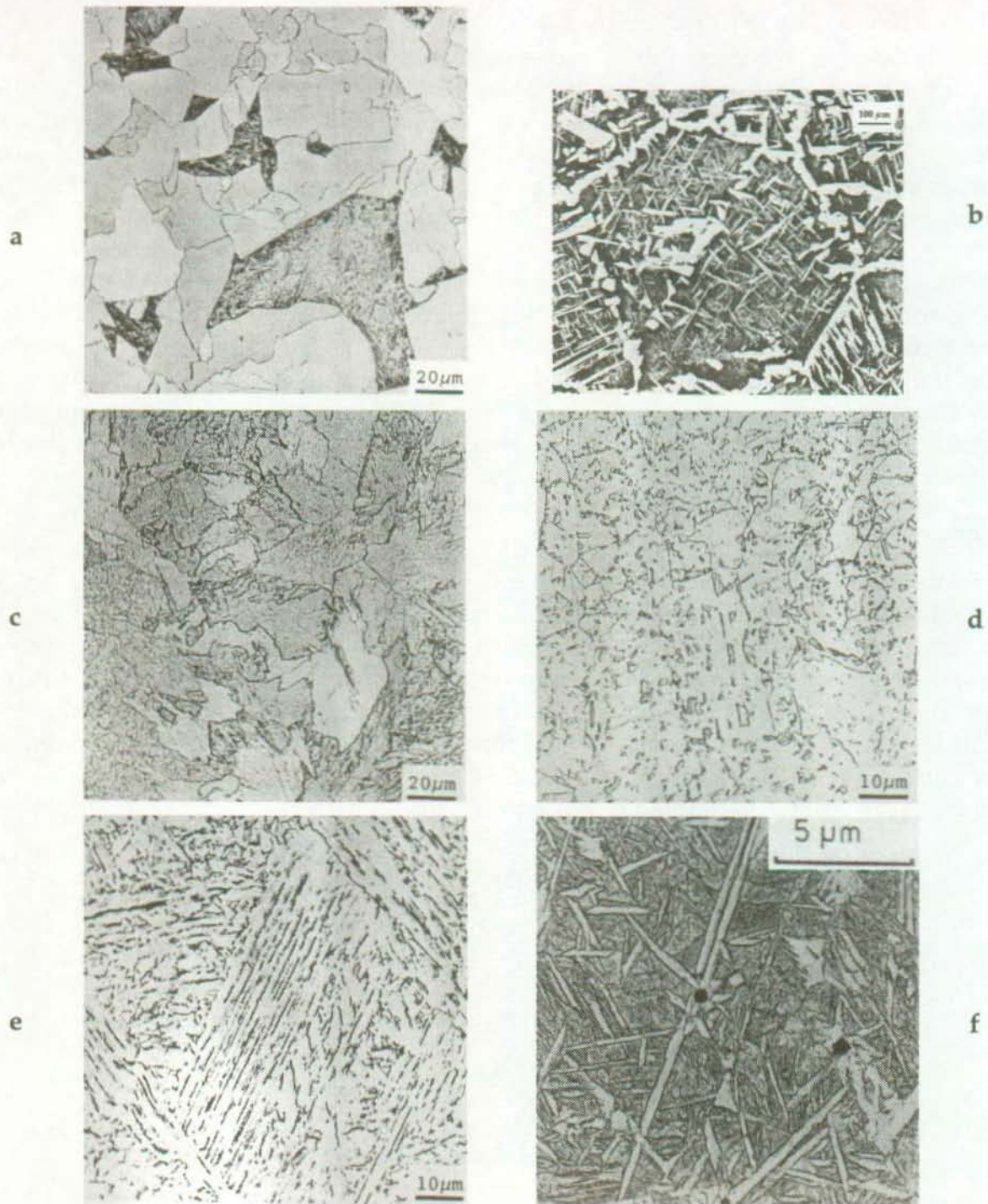


Fig. 2.2 : Micrographies optiques de microstructures ferritiques.

- a) Ferrite polygonale (grains clairs) dans un acier à bas carbone (0.06%C) transformé à 675°C (Krauss, 1995).
- b) Ferrite aux joints de grains (GBA), de Widmanstätten et aciculaire dans un acier 0.5%C austénitisé 1h à 1350°C puis refroidi à 300°C/h (Samuels, 1980).
- c) Ferrite quasi-polygonale dans un acier à carbone ultra-bas (0.005 C, 3 Mn) refroidi à 50°C/s (Krauss, 1995).
- d) Ferrite granulaire dans un acier à bas carbone (0.033 C 1.44 Mn) refroidi à 1°C/s (Krauss, 1995).
- e) Ferrite aciculaire dans un acier à bas carbone (0.06%C) transformé à 500°C (Krauss, 1995).
- f) Ferrite aciculaire observée dans un dépôt de soudure (Bhadeshia, 1992).

Ferrite bainitique ou aciculaire (Fig. 2.2 (e) et (f))

Dans les aciers à bas carbone, une surfusion de transformation élevée peut conduire à une ferrite sous forme de lattes parallèles emprisonnant de l'austénite résiduelle (Fig. 2.2 (e)). Cette structure est nommée ferrite bainitique ou aciculaire. Dans le domaine de la soudure, on appelle ferrite aciculaire les cristaux de ferrite formés sur des particules non métalliques à l'intérieur des grains (cf. Fig. 2.2 (f)). Ces morphologies sont recherchées pour leur propriétés mécaniques.

Ferrite granulaire (Fig. 2.2 (d))

La ferrite granulaire est très voisine de la ferrite aciculaire. Elle présente en effet une morphologie similaire en lattes avec également des inclusions d'austénite résiduelle. Mais, en raison de sa morphologie équiaxe, on considère qu'elle constitue une catégorie à part. Elle se forme à des températures légèrement plus élevées ou à des vitesses de refroidissement légèrement plus faibles que la ferrite aciculaire.

Perlite

Lorsque de l'austénite contenant environ 0.8%C est refroidie en dessous de la température eutectoïde, elle devient sursaturée par rapport aux phases α et Fe_3C . La transformation $\gamma \rightarrow \alpha + \text{Fe}_3\text{C}$ peut donc avoir lieu. Elle est appelée transformation eutectoïde en raison de sa similarité avec la solidification eutectique. En effet, la croissance des phases α et Fe_3C s'effectue de manière couplée par un échange de soluté et donne lieu à une microstructure lamellaire (Fig. 2.3). Cette microstructure est nommée perlite en raison de son aspect nacré sur les micrographies à faible grossissement.

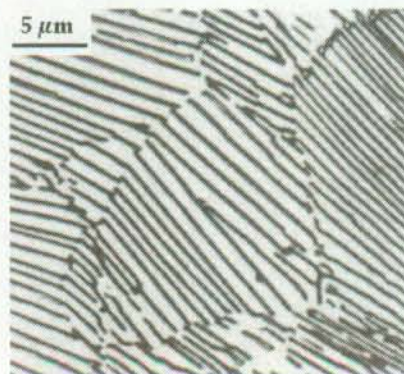


Fig. 2.3 : Colonies de perlite dans un acier eutectoïde transformé à 705°C (Samuels, 1980).

La germination de la perlite a lieu aux joints de grains de la phase austénitique. Selon la composition et la structure du joint de grain, la phase α ou la cémentite germe en premier, en formant généralement une interface semi-cohérente avec un des grains de la matrice. La croissance s'effectue alors à l'intérieur de l'autre grain par le déplacement de l'interface incohérente plus mobile. Dans le cas où un germe de cémentite apparaît en premier, la croissance provoquera un appauvrissement en carbone dans l'austénite proche du germe, ce qui permettra à la ferrite de germer à son tour. La croissance se déroule alors de manière coopérative en permettant à la cémentite d'incorporer le carbone rejeté par la ferrite. Ce mécanisme donne lieu à la croissance de perlite sous forme de colonies nodulaires conservant une géométrie sphérique jusqu'à la rencontre de voisins.

La théorie de la croissance couplée de la perlite a été décrite à l'origine par Zener (1947) qui a établi notamment une relation reliant la vitesse de croissance, v , à la température T :

$$v \sim D (A_1 - T)^2 = D \Delta T^2 \quad 2.1$$

où D est le coefficient de diffusion du carbone dans l'austénite et ΔT la surfusion, définie comme étant la différence entre la température eutectoïde A_1 et la température de l'interface.

Zener a présenté également une relation donnant l'espacement interlamellaire λ en fonction de T :

$$\lambda \sim \frac{1}{A_1 - T} \quad 2.2$$

La théorie basée à l'origine sur de simples considérations physiques a été formulée ultérieurement par Hillert (1957) de manière plus rigoureuse. Le formalisme de Hillert a ensuite été repris par Jackson et Hunt (1966) en l'appliquant à la solidification eutectique, ce qui leur a permis d'établir des relations entre λ , v et ΔT similaires aux équations 2.1 et 2.2. Cette dernière théorie est la plus utilisée à l'heure actuelle pour décrire les transformations eutectiques et eutectoïdes.

Toutefois, les espacements interlamellaires observés s'avèrent être supérieurs d'un facteur 2 au moins à ceux prédits par le critère de Jackson et Hunt de croissance à l'extremum (Puls, 1972). Cette déviation est attribuée au phénomène de diffusion accélérée aux interfaces et à la difficulté que peuvent rencontrer les lamelles à réaliser des branchements lors de la croissance d'un nodule. Une approche quantitative des mécanismes de branchement a été présentée par Magnin et Kurz (1987) pour l'eutectique Fe-C croissant à partir de la phase liquide.

Ferrite et perlite

Dans les aciers hypoeutectoïdes, si le refroidissement est modéré, la première phase à apparaître est la ferrite. On la qualifie alors de ferrite proeutectoïde. Selon la température ou la vitesse de refroidissement, elle peut adopter une morphologie polygonale (ferrite équiaxe) ou de Widmanstätten. Au cours de la croissance, l'austénite s'enrichit en carbone jusqu'à atteindre une concentration permettant la précipitation de la cémentite. La fraction de perlite obtenue à la fin de la transformation dépendra naturellement de la concentration nominale de l'acier, mais également de la température de maintien ou de la vitesse de refroidissement. En effet, une surfusion élevée réduit la quantité de phase primaire et favorise la croissance couplée. On peut donc obtenir une structure entièrement perlitique même pour des concentrations nominales éloignées de la concentration eutectoïde.

Martensite

Lorsque la vitesse de refroidissement dépasse une valeur critique (entre 100 et 1000°C/s selon la composition) l'austénite se transforme en martensite en dessous de la température M_s (Martensite start). Cette température se situe entre 300°C et 400°C pour les aciers au carbone et varie avec la composition et la taille de grain de l'austénite. Contrairement à la transformation eutectoïde, dont la cinétique est gouvernée par la diffusion, la transformation martensitique se

déroule sans diffusion avec des vitesses de croissance pouvant atteindre la vitesse du son dans les métaux.

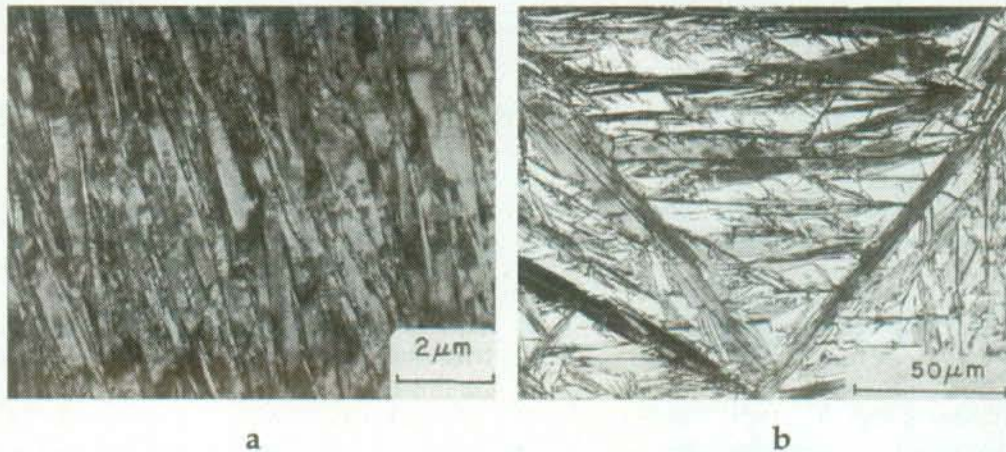


Fig. 2.4 : (a) Martensite en lattes dans un acier Fe-0.2%C (Micrographie MET). (b) Martensite en plaques et austénite résiduelle dans un acier Fe-1.9%C trempé à -150°C (Micrographie optique). D'après (Krauss, 1992).

Cristallographie

La martensite des aciers peut être vue comme une phase du fer possédant une structure cubique centré, mais présentant une distorsion due à la présence d'atomes de carbone sur des sites octaédriques. La maille présente une symétrie tétragonale, avec des paramètres a et c dépendant de la teneur en carbone. La phase martensitique peut donc être considérée comme une sorte de ferrite sursaturée en carbone. Elle est désignée par le symbole α' pour cette raison.

En 1924, Bain a montré que la maille de la phase α' pouvait être obtenue à partir de la maille d'austénite par une légère déformation de cisaillement qui ne fait intervenir que de faibles déplacements d'atomes. Ce mécanisme est fondamental dans la transformation martensitique. Il permet d'expliquer notamment la rapidité avec laquelle la transformation s'opère et les effets de relief observés à la surface du métal après la transformation.

Toutefois, une deuxième déformation du réseau cristallin est nécessaire pour accommoder les déformations de cisaillement sur des distances importantes. Elle est obtenue par la formation de macles et de dislocations et respecte la condition de déformation plane. Cette condition signifie que l'interface α'/γ entre la martensite et la phase mère est un plan qui a la particularité de ne pas se déformer au cours de la transformation. Ce plan d'accolement ne correspond généralement pas à un plan d'indices simples de la matrice. Les indices dépendent de la composition de l'acier et sont parfois irrationnels. La martensite formée possède en général des plans et des directions denses qui sont parallèles à des plans et directions denses de la matrice. Citons pour les cas des aciers au carbone la relation d'orientation de Kurdjumov - Sachs :

$$(011)\alpha' // (111)\gamma, [-1,1,-1]\alpha' // [1,0,-1]\gamma$$

Germination

La croissance de la martensite est si rapide que la transformation est principalement contrôlée par la germination. L'approche généralement utilisée pour décrire la germination consiste à considérer un germe de forme lenticulaire

et de calculer la variation d'enthalpie libre engendrée par la transformation en fonction des dimensions du germe. Le bilan comprend le terme volumique donnant le gain d'énergie lié au changement de phase, une contribution de surface et un terme lié à la déformation du réseau provoquée par le germe. On peut montrer que la contribution de l'énergie de surface ne joue qu'un rôle mineur dans la germination. L'énergie d'activation à vaincre pour la germination provient donc essentiellement du terme de déformation. Des expériences sur des petites particules ont montré que les surfaces libres et les joints de grains ne constituent pas des sites préférentiels pour la germination. Elles ont mis en évidence également un mécanisme de germination hétérogène lié à la présence de dislocations.

Morphologie et croissance

Dans les aciers faiblement alliés et pour des températures de transformation moyennes, la martensite se présente sous forme de lattes. Celles-ci possèdent une épaisseur d'environ $0.1 \mu\text{m}$ et sont empilées parallèlement sous la forme de paquets (Fig. 2.4 (a)). Raghavan (1972) a observé que la croissance de la martensite en lattes était liée à la présence d'une forte densité de dislocations. Le déplacement des dislocations le long des plans perpendiculaires au front de croissance permettrait l'avance de l'interface. Leur germination aurait lieu à l'avant du front grâce à la déformation associée à la transformation. Ce mécanisme autocatalytique serait responsable de la rapidité de la croissance et expliquerait pourquoi la progression des lattes est interrompue par la présence d'un joint de grain ou d'une surface libre.

Dans les aciers à forte teneur en carbone ($>1.2\% \text{pds}$), la martensite apparaît à des températures plus basses (M_s diminue en effet si la concentration en carbone augmente). La croissance a lieu alors par un mécanisme de maclage conduisant à une morphologie en plaques (Fig. 2.4 (b)).

De manière générale, le choix d'une morphologie en plaques ou en lattes, est effectué afin d'accommoder au mieux les déformations engendrées par les différences volumiques entre la phase mère et la martensite.

Aspects cinétiques

Généralement lors d'une trempe à une température inférieure à M_s , la transformation martensitique se manifeste de façon quasi instantanée, mais reste incomplète même lors d'un maintien isotherme prolongé. De l'austénite résiduelle est alors observée entre les lattes ou plaques de martensite. Cependant, la transformation se poursuit si la température est abaissée. Koistinen et Marburger (1959) ont établi une relation empirique donnant le taux de martensite, f_m , en fonction de la température de transformation T :

$$f_m(T) = 1 - \exp[-\alpha_m (M_s - T)] \quad 2.3$$

où α_m est une constante valant environ 0.011 K^{-1} pour un acier non allié contenant $0.4\% \text{C}$. Cette relation est limitée aux martensites dites "athermiques", dont la proportion dépend de la température uniquement. Certains alliages présentent une transformation martensitique dont l'avancement dépend également du temps. On parle alors de martensite isotherme.

Bainite

Les transformations à l'état solide sont généralement réparties en deux groupes distincts, les transformations diffusives qui se déroulent par germination et croissance et les transformations martensitiques qui ont lieu sans diffusion et avec des déplacements inférieurs aux distances interatomiques. La transformation bainitique échappe à cette classification ou plutôt constitue une transition entre ces deux groupes en présentant des points communs avec chacun d'eux. Malgré les nombreux travaux et articles de revue (Bhadeshia, 1990; Bhadeshia, 1992; Aaronson, 1990; Hillert, 1995; Reynolds 1990), la bainite reste un domaine relativement mal connu et sujet à controverses. La difficulté réside déjà dans sa définition. On peut citer l'approche cinétique de Hehemann (1956) qui s'appuie sur l'existence dans le diagramme TTT d'une courbe en C indépendante de celle de la perlite. Cette courbe débute à une température B_s nettement plus faible que la température eutectoïde et se termine généralement à la température de formation de la martensite, M_s . Elle apparaît distinctement dans les aciers faiblement alliés, ce qui tendrait à montrer l'existence d'un mécanisme de transformation différent de celui de la transformation perlitique. Par la suite, il a été montré que, lors d'un maintien isotherme à des températures inférieures à B_s , les mécanismes de transformation et les morphologies obtenues peuvent être très divers (Shiflet, 1990; Goldenstein, 1990; Reynolds, 1990; Aaronson, 1990), et qu'il n'est donc pas possible de relier la cinétique globale donnée par le diagramme TTT à un phénomène unique que l'on pourrait définir comme étant la transformation bainitique. La définition cinétique tend donc à être abandonnée au profit d'une approche microstructurale consistant à définir la bainite à partir des morphologies observées et du mode de croissance. Selon Aaronson (1990), la bainite peut-être définie comme étant le produit d'une décomposition eutectoïde non lamellaire et non coopérative. Elle apparaît généralement comme un mélange non lamellaire de ferrite et de carbures. Cette définition permet d'englober les diverses morphologies de bainite dont la nomenclature a été répertoriée par Reynolds (1991). Parmi ces morphologies, nous retiendrons, pour le cas des aciers dont la teneur en carbone est supérieure à 0.2% environ, la distinction entre bainite inférieure et supérieure. Celle-ci est basée sur la répartition des carbures dans la ferrite : sous forme de plaquettes entre les lattes de ferrite pour le cas de la bainite supérieure et sous forme de plaquettes englobées dans la phase ferritique pour la bainite inférieure (Fig. 2.5). La température à laquelle ces morphologies sont observées (élevée pour la bainite supérieure et faible pour la bainite inférieure) est à l'origine de cette terminologie.

Une autre question encore très controversée à l'heure actuelle concerne le mode de croissance de la bainite. Selon certains auteurs (Bhadeshia, 1990), la transformation se déroulerait par un mécanisme de cisaillement menant à la formation de ferrite sursaturée. Ce mécanisme dislocatif expliquerait la morphologie en plaques ou en lattes et les déformations observées en surface. L'interface serait glissile, comme dans le cas de la transformation martensitique. D'autres auteurs (Reynolds, 1990; Hillert, 1995) pensent que la croissance se fait par un mécanisme diffusif au moyen d'une interface α/γ sessile. Les observations montrent en effet que les éléments interstitiels diffusent et que la phase austénitique se trouve enrichie en carbone au voisinage de l'interface (Stark, 1990). Si la diffusion du carbone au cours de la transformation bainitique est généralement admise, la question de l'existence d'un équilibre local à l'interface

reste entière. Des mesures montrent que les éléments substitutionnels diffusent peu au cours de l'avance de l'interface (Aaronson, 1966). On les retrouverait en effet dans la phase ferritique en même concentration que dans la phase austénitique. L'hypothèse d'une croissance en conditions de para-équilibre (équilibre local pour le carbone et profil plat pour les autres espèces) avait été formulée en 1947 déjà (Hultgren, 1947). Mais il semble que des effets de drainage d'éléments substitutionnels peuvent opérer et agir sur la cinétique de croissance de la bainite (Hillert, 1994). Ce phénomène expliquerait l'observation d'une transformation incomplète suivie de la formation de perlite pour certains types d'aciers (Aaronson, 1990).

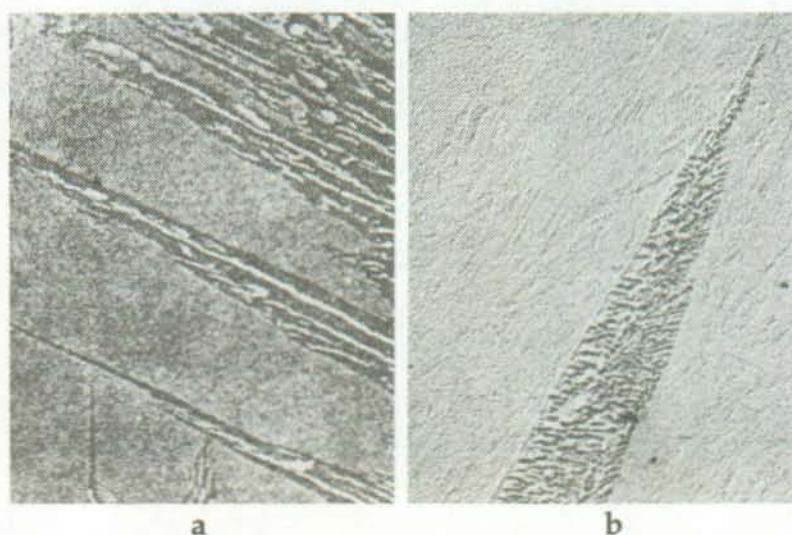


Fig. 2.5 : Bainite supérieure (a) et inférieure (b) (Porter, 1981).

2.1.2 Cinétique

Cinétique isotherme

En pratique, la décomposition de l'austénite se déroule généralement dans des conditions très éloignées de l'équilibre thermodynamique rendant les informations contenues dans le diagramme d'équilibre inutilisables pour prédire les phases et les proportions obtenues après un traitement thermique. Une approche cinétique s'est donc rapidement avérée nécessaire.

En 1930, Davenport et Bain (Davenport, 1930) ont présenté les premiers diagrammes TTT, (Temps, Température, Transformation) qui ont pour objet d'indiquer les temps de début (1%) et de fin de transformation (99%) en fonction de la température de transformation. Ils furent obtenus par dilatométrie et observations métallographiques sur des échantillons austénitisés puis trempés dans des bains isothermes de sels fondus.

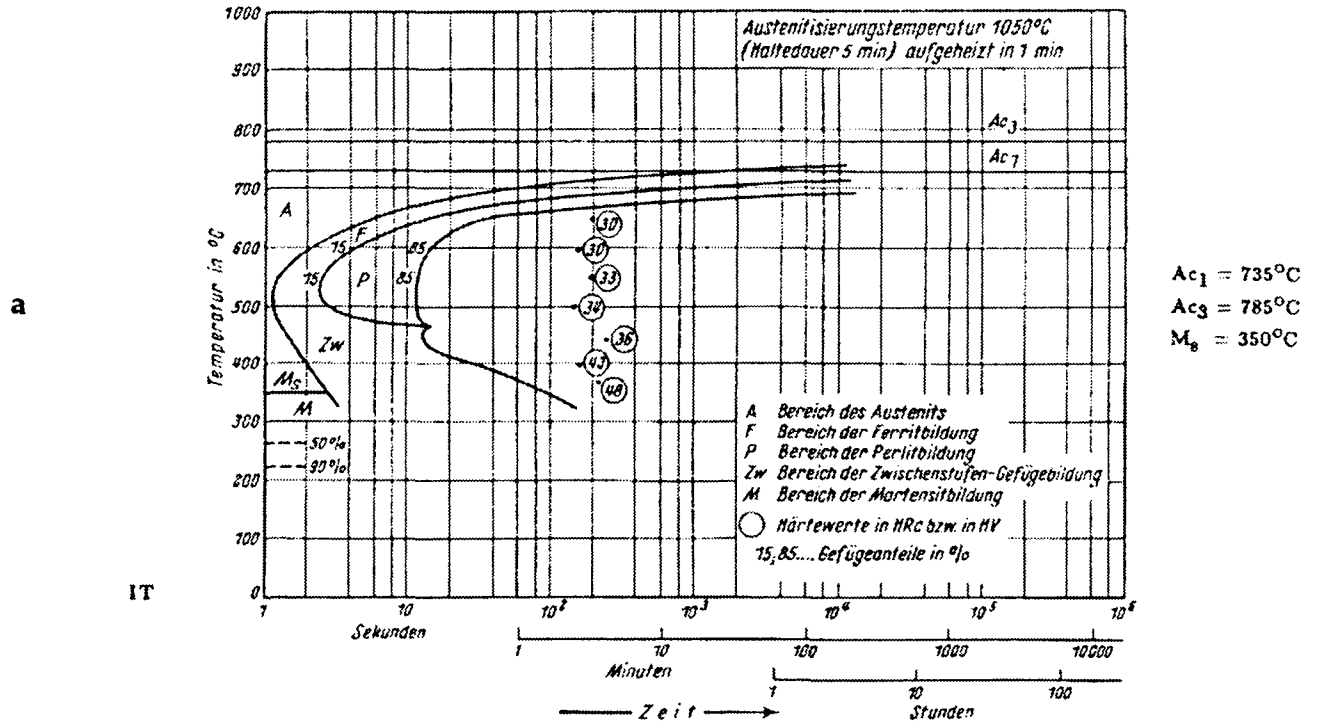
Par la suite, cette approche s'est généralisée et a donné lieu à l'édition d'atlas répertoriant les diagrammes pour la plupart des nuances d'aciers (Boyer, 1977). Un exemple est donné à la figure 2.6 (a).

Modèles

La mesure de la fraction volumique de phase transformée en fonction du temps lors d'une transformation isotherme montre en général une courbe d'allure sigmoïdale. Cette forme résulte des mécanismes de germination, de croissance et

Ck 45 0.44% C - 0.66% Mn (SAE 1042)

Composition: 0.44% C - 0.66% Mn - 0.22% Si - 0.022% P -
0.029% S - 0.15% Cr - 0.02% V Austenitized at 1050°C
(1922°F)



Ck 45 0.44% C - 0.66% Mn (SAE 1042)

Composition: 0.44% C - 0.66% Mn - 0.22% Si - 0.022% P -
0.029% S - 0.15% Cr - 0.02% V Austenitized at 880°C (1616°F)

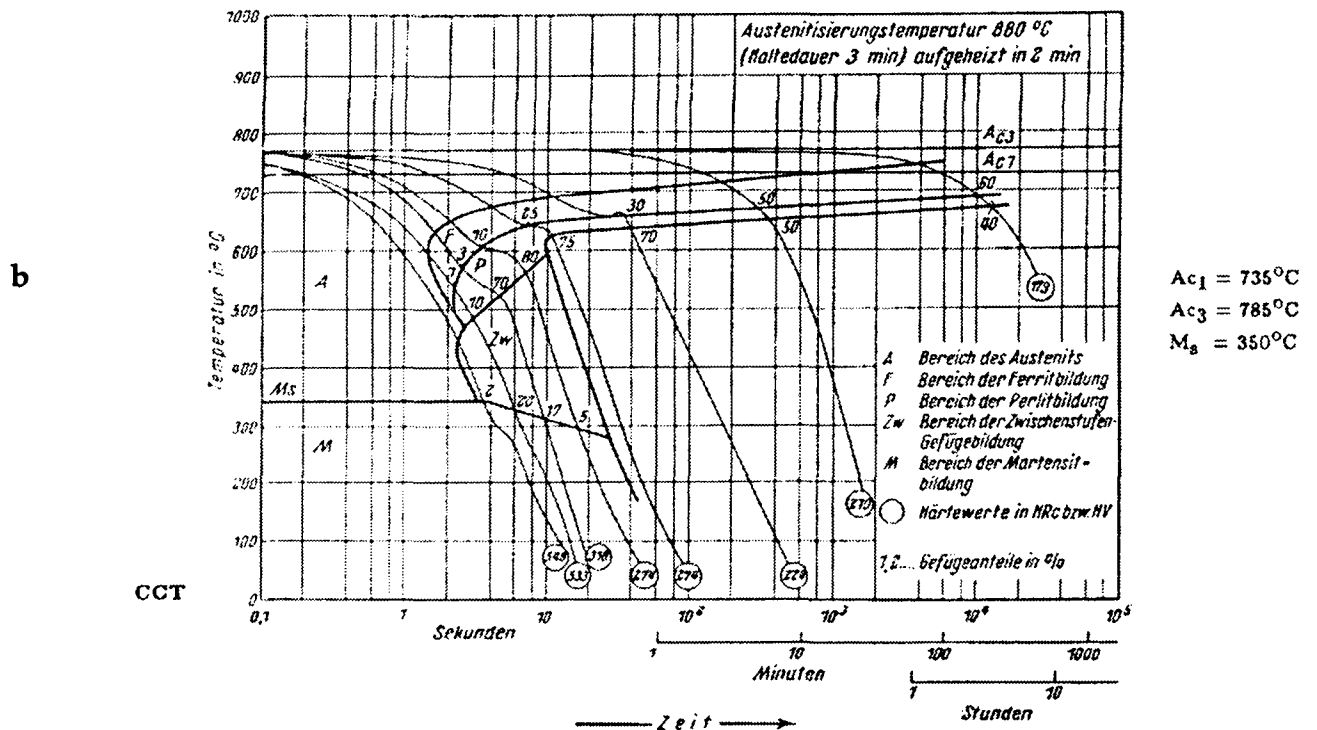


Fig. 2.6 : Diagrammes TTT (a) et TRC (b) de l'acier Ck45 (Boyer, 1977).

de rencontre des nodules de la nouvelle phase. Johnson et Mehl (1939) ont établi une relation permettant de décrire la cinétique isotherme d'une telle transformation. Les hypothèses utilisées sont les suivantes : germination aléatoire dans le volume, croissance sphérique, taux de germination I et vitesse de croissance v constants au cours de la transformation. Ils ont obtenu l'expression :

$$f = 1 - \exp\left(-\frac{\pi}{3} I v^3 t^4\right) \quad 2.4$$

où f est la fraction volumique de la phase formée au temps t .

Avrami (1940) a obtenu la même relation en introduisant la notion de volumes étendus. En 1956, Cahn (1956a) a repris le développement d'Avrami pour l'appliquer au cas de la germination aux joints de grains. En supposant que les sites de germination sont immédiatement saturés, il a obtenu les relations suivantes :

$$f = 1 - \exp(-2 S v t) \quad \text{germination sur les faces des joints de grains} \quad 2.5$$

$$f = 1 - \exp(-\pi L v^2 t^2) \quad \text{germination sur les arêtes des joints de grains} \quad 2.6$$

$$f = 1 - \exp\left(-\frac{4\pi}{3} C v^3 t^3\right) \quad \text{germination sur les sommets des joints de grains} \quad 2.7$$

où S , L et C sont respectivement la surface des joints de grains, la longueur d'arêtes et le nombre de sommets par unité de volume. La dernière relation est d'un intérêt général car elle décrit la cinétique d'une transformation de phase par germination et croissance pour le cas où les sites de germination sont répartis aléatoirement dans le volume et activés simultanément.

De manière générale, la cinétique isotherme des transformations de phase peut être décrite par une relation du type :

$$f = 1 - \exp(-b t^n) \quad 2.8$$

où b est un coefficient dépendant de la température et n un paramètre représentatif des mécanismes de germination.

Umamoto (1981) a introduit dans la relation 2.8 l'influence de la taille de grain sur la cinétique de transformation :

$$f = 1 - \exp\left(-b \frac{t^n}{d^m}\right) \quad 2.9$$

où d est la taille du grain austénitique et m un coefficient dépendant de l'acier et de la phase (perlite ou bainite).

Cinétique anisotherme

En pratique, pour des raisons techniques et économiques surtout, les transformations de phase interviennent le plus souvent au cours d'un refroidissement continu. Cette observation est à l'origine du diagramme TRC (Transformation en Refroidissement Continu), qui est construit en superposant des courbes de début et de fin de transformation sur une famille de courbes de refroidissement (Fig. 2.6 (b)). Comme pour les diagrammes TTT, ils sont répertoriés dans des atlas et disponibles pour la plupart des aciers.

Grange et Kiefer (1941) ont mis au point une méthode empirique permettant d'utiliser des données isothermes (diagramme TTT) pour estimer le début d'une transformation anisotherme. Considérons une courbe de refroidissement continu interceptant la courbe de début de transformation du diagramme TTT, décrite par la fonction $\tau_s(T)$, en un temps t_1 et une température T_1 (v. Fig. 2.7). La méthode prédit alors un début de transformation en un temps t_2 et à une température T_2 donnés par la relation :

$$\tau_s\left(\frac{T_1 + T_2}{2}\right) = t_2 - t_1 \quad 2.10$$

Cette méthode revient à considérer que la transformation démarre lorsque le temps écoulé depuis l'intersection avec la courbe TTT est égal au temps d'incubation en condition isotherme à une température égale à la moyenne arithmétique entre la température de démarrage T_2 et la température d'intersection T_1 .

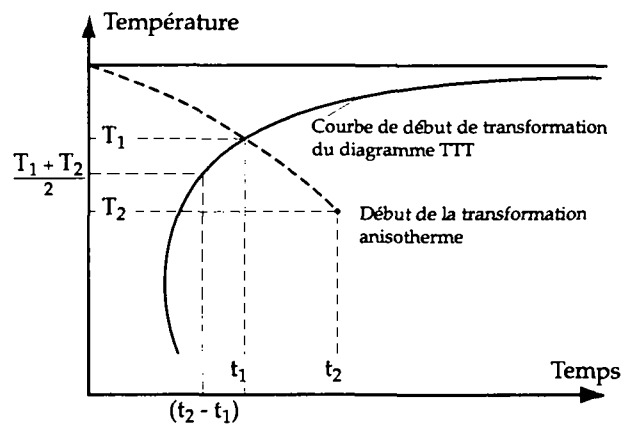


Fig. 2.7 : Illustration de la méthode de Grange et Kiefer pour prédire le début d'une transformation en refroidissement continu à partir de données isothermes.

2.1.3 Modélisation

La cinétique de décomposition de l'austénite a été abordée par diverses approches. Certaines sont basées sur un grand nombre de mesures et tentent de reproduire la cinétique à l'aide de fonctions ajustées (modèles empiriques). D'autres s'appuient sur une règle d'additivité permettant d'utiliser des données isothermes (diagramme TTT) pour calculer les cinétiques en refroidissement continu. Plus proches de la physique, on trouvera des modèles phénoménologiques décrivant les mécanismes de germination et croissance et finalement des modèles diffusifs résolvant les équations fondamentales à l'échelle d'une particule.

Modèles empiriques

Maynier (1978) a construit un modèle utilisant une base de données comprenant 341 diagrammes TRC pour différentes nuances d'aciers. Le modèle fournit une série de vitesses de refroidissement délimitant l'apparition de différentes microstructures (100% martensite, Martensite + bainite, ferrite + perlite). Ces vitesses critiques sont obtenues au moyen d'une formule empirique faisant intervenir un paramètre d'austénitisation et la composition de l'acier.

Lee et Bhadeshia (1993) ont présenté un modèle empirique permettant de calculer le diagramme TTT d'aciers faiblement alliés. Le modèle fondé sur des données expérimentales permet de représenter les diagrammes TTT d'une large variété d'aciers à l'aide de relations mathématiques simples.

Modèles basés sur une règle d'additivité

De nombreux modèles décrivant les transformations de phase lors d'un refroidissement continu sont basés sur des cinétiques isothermes et utilisent une règle d'additivité. Cette règle consiste à considérer la transformation anisotherme comme une succession de transformations isothermes sur des intervalles de temps très courts. La vitesse des transformations isothermes est alors supposée indépendante de l'histoire thermique et n'être fonction que de la température actuelle et de la fraction de phase déjà atteinte.

Scheil (1935) a présenté une règle d'additivité permettant de calculer la température de début de transformation lors d'un refroidissement continu. Il considère que le temps passé à une température donnée, divisé par le temps nécessaire pour faire débuter la transformation à cette température, représente une fraction d'incubation. La transformation démarre lorsque la somme des fractions d'incubation atteint l'unité :

$$\sum_{i=1}^N \frac{\Delta t_i}{\tau_s(T_i)} = 1 \quad \text{ou} \quad 2.11$$

$$\int_0^t \frac{dt}{\tau_s(T(t))} = 1 \quad 2.12$$

où N est un nombre de paliers isothermes, alors que Δt_i et T_i sont respectivement la durée et la température du palier i . Comme pour l'approche de Grange et Kiefer, le temps correspondant au début de la transformation isotherme est désigné par $\tau_s(T)$.

Umemoto (1983) a étendu le concept proposé par Scheil pour décrire la cinétique anisotherme de la transformation perlitique. Il a formulé que, lors d'un refroidissement selon un chemin connu $T(t)$, la fraction volumique f de la phase transformée est atteinte lorsque la condition suivante est satisfaite :

$$\int_0^t \frac{dt}{\tau_f(T(t))} = 1 \quad 2.13$$

où $\tau_f(T)$ est le temps nécessaire pour atteindre la fraction f par une transformation isotherme à la température T . Le temps τ_f est calculé à partir d'une relation de type Avrami-Johnson-Mehl (éq. 2.8) :

$$f = 1 - \exp(-b(T) \tau_f^n) \quad 2.14$$

$$\tau_f = \left[\frac{1}{b(T)} \text{Ln} \left(\frac{1}{1-f} \right) \right]^{1/n} \quad 2.15$$

où n est pris constant et b dépendant de la température uniquement. En substituant dans l'équation 2.14 et en intégrant, il obtient :

$$f = 1 - \exp \left\{ - \left[\int_0^t b^{1/n} [T(t)] dt \right]^n \right\} \quad 2.16$$

Cette dernière relation permet donc de calculer la cinétique de transformation associée à une histoire thermique quelconque $T(t)$, sous les conditions précitées (n constant et $b(T)$ connu).

Une approche différente a été initialement développée par Gergely (1972) puis complétée par Hildenwall (1978). Le principe consiste à décomposer la courbe de refroidissement en petits paliers isothermes (Fig. 2.8 (a)). La cinétique sur les paliers est calculée avec l'équation 2.8 en utilisant les coefficients $b(T)$ et $n(T)$ déduits du diagramme TTT. Afin d'assurer la continuité de l'avancement de la transformation entre les différents paliers, la notion de temps fictif doit être introduite. Le temps fictif, t_i^* , au palier i est déduit de l'équation 2.8 en utilisant la fraction de phase obtenue au palier précédent, f_{i-1} :

$$t_i^* = \left[\frac{1}{b(T_i)} \text{Ln} \left(\frac{1}{1 - f_{i-1}} \right) \right]^{1/n(T_i)} \quad 2.17$$

La nouvelle fraction de phase est déterminée en ajoutant le pas de temps (durée du palier) au temps fictif t_i^* . La fraction transformée à la fin du palier est alors simplement donnée par :

$$f_i = 1 - \exp \left[-b(T_i) \left(t_i^* + \Delta t \right)^{n(T_i)} \right] \quad 2.18$$

Le principe est illustré schématiquement à la figure 2.8 où les courbes sigmoïdales $f(t)$ sont représentées pour deux paliers successifs.

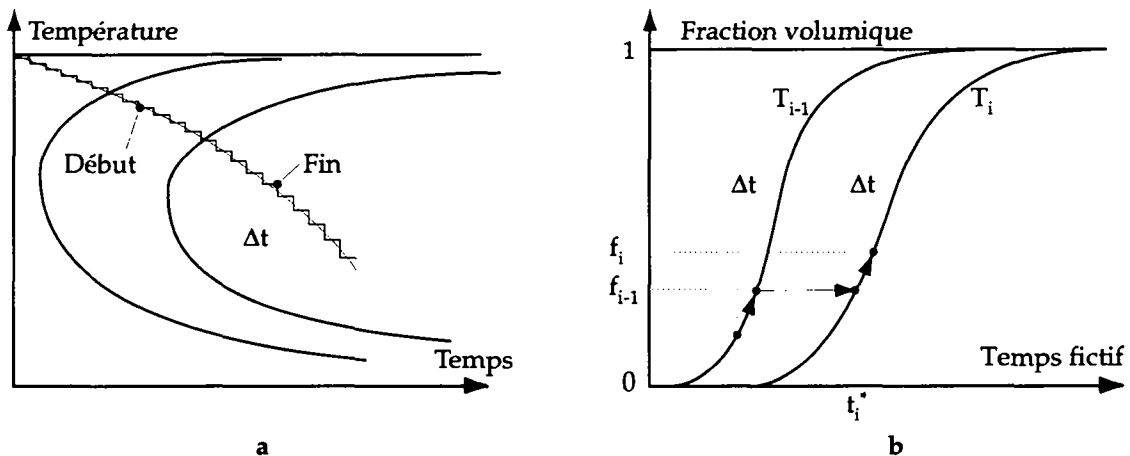


Fig. 2.8 : Représentation schématique du principe d'additivité utilisant le temps fictif.

Cette méthode a ensuite été reprise dans le cadre de modélisations numériques des transformations de phase à l'état solide dans les aciers par Agarwal et Brimacombe (1981) pour décrire la transformation perlitique, par Fernandes (1985) pour décrire la décomposition de l'austénite dans des aciers hypoeutectoïde et eutectoïde et par Farias (1991) pour décrire les transformations de phase au chauffage et au refroidissement dans des éprouvettes soumises à des cycles thermiques rapides. Le principe d'additivité est généralement implémenté dans

un modèle d'éléments finis prédisant le champ thermique et parfois les contraintes résiduelles (Denis, 1987; Hakan Gür, 1996). Les comparaisons avec les cinétiques expérimentales montrent en général un accord satisfaisant.

Après avoir mis en évidence certaines limites du principe d'additivité, Leblond (1984) a proposé un nouveau modèle pour décrire la cinétique d'une transformation de phase dans le cas d'une thermique quelconque de chauffage ou de refroidissement. Son modèle est fondé sur une relation de relaxation de la forme :

$$\dot{f} = \frac{f_{eq}(T) - f}{\tau(T)} \quad 2.19$$

où $f_{eq}(T)$ est la fraction d'équilibre de la phase à former (1 si la transformation peut être complète à la température T) et $\tau(T)$ un temps caractéristique de transformation à la température T. Même si l'équation 2.19 ne possède pas de véritable fondement physique, elle semble décrire les cinétiques de façon satisfaisante et permet d'incorporer aisément, par le biais du paramètre τ , l'influence de la taille du grain austénitique (Leblond (1985)).

Comparaison des règles d'additivité

Agarwal et Brimacombe (1981) ont montré que la technique utilisant le temps fictif (équations 2.17 et 2.18) prédit les même temps de début de transformation que le principe d'accumulation des fractions d'incubation présenté par Scheil (éq. 2.12). De même, il est possible d'établir une condition d'équivalence pour le modèle de Umemoto (éqs. 2.13 à 2.16) et la méthode du temps fictif. Le développement mathématique figurant dans l'annexe 7.1 montre que les deux techniques sont strictement équivalentes si le paramètre n est pris constant. Il est montré également en annexe que le modèle de Leblond (éq. 2.19) est un cas particulier de la règle d'additivité correspondant aux conditions $n = 1$ et $\tau = 1/b$.

Validité du principe d'additivité

Une condition de validité du principe d'additivité avait déjà été donnée par Avrami qui a introduit le concept de réaction isocinétique (Avrami, 1940). Une réaction isocinétique possède un rapport entre la vitesse de croissance v , et le taux de germination I , qui est constant quel que soit la température. Avrami a montré que, dans ces conditions, les cinétiques isothermes peuvent être utilisées pour calculer une cinétique anisotherme.

Cahn (1956b) a réexaminé la condition de validité et en a conclu qu'une réaction est additive si la vitesse de transformation ne dépend que de la température et de la fraction transformée; c'est-à-dire si :

$$\frac{df}{dt} = F(T, f) \quad 2.20$$

où F est une fonction quelconque. Cette condition est par exemple satisfaite dans le cas d'une germination instantanée d'un nombre donné de sites suivie d'une croissance dont la vitesse dépend de la température uniquement.

Christian (1975) a proposé un critère plus restrictif que l'équation 2.20 en montrant que l'additivité s'applique seulement si :

$$\frac{df}{dt} = F(T)/G(f) \quad 2.21$$

où F et G sont des fonctions quelconques. Christian souligne que cette relation est rarement satisfaite dans les cas réels, car la densité de grains varie avec la température. De plus, lors d'un changement brutal de température de transformation, la vitesse de croissance va varier progressivement en raison des mécanismes de diffusion qui la gouvernent. Malgré ces restrictions, la règle d'additivité est largement utilisée et permet d'estimer les cinétiques de réaction de manière satisfaisante.

Modèles phénoménologiques

Bien que fort utiles pour la pratique, les modèles basés sur un principe d'additivité ont l'inconvénient d'être assez éloignés de la physique des transformations de phase. Les phénomènes physiques tels que la germination et la croissance sont noyés dans la relation d'Avrami qui décrit une cinétique globale au moyen de paramètres ajustés.

Des modèles plus proches de la physique ont été développés très tôt. Kirkaldy (1973) a présenté un des premiers modèles calculant l'évolution structurale en refroidissement continu. Le modèle permet de prédire les proportions de perlite et de martensite dans une pièce en acier eutectoïde pour un essai Jominy. Il est fondé sur l'intégration de lois de germination et de croissance et utilise la méthode de Grange et Kiefer pour déduire le temps de début de transformation en condition anisotherme.

Bhadeshia (1985, 1989) a présenté un modèle phénoménologique prédisant les proportions de ferrite allotriomorphe, de Widmanstätten et aciculaire dans les cordons de soudures. Le modèle utilise la règle d'additivité de Scheil (éq. 2.11) pour estimer le début de la transformation. Les proportions des constituants sont calculées en intégrant une relation donnant la taille d'une particule en fonction du temps. Des hypothèses géométriques sont nécessaires pour quantifier les phénomènes d'empiétement des particules et introduire l'influence de la taille du grain austénitique.

Suehiro (1990) a développé un modèle phénoménologique utilisant implicitement le principe d'additivité dans le but de calculer les cinétiques de transformation de phase dans un acier hypoeutectoïde lors du laminage à chaud. Le modèle est fondé sur la relation d'Avrami différenciée dont la variable t a été éliminée en utilisant l'expression originale. En prenant :

$$n = 4 \quad \text{et} \quad b = -\frac{\pi}{3} I v^3, \quad 2.22$$

il obtient :

$$\frac{df}{dt} = 4 \left(\frac{\pi}{3}\right)^{1/4} I^{1/4} v^{3/4} (1-f) \left[\text{Ln} \left(\frac{1}{1-f} \right) \right]^{3/4} \quad 2.23$$

où I et v sont respectivement le taux de germination et la vitesse de croissance.

Le modèle présente l'avantage de faire apparaître les grandeurs physiques I(T) et v(T) données par la relation de la théorie classique de germination et de la croissance. Il n'utilise qu'un jeu limité de paramètres facilement déductibles d'expérience isothermes et prend en compte l'influence de la déformation. Le modèle est couplé à un calcul de thermique par éléments finis.

Umamoto (1992) a également développé un modèle basé sur des lois de germination et de croissance. Il utilise une base de données thermodynamiques

donnant l'enthalpie libre des phases en fonction de la composition. Le modèle s'applique à une grande variété d'aciers et permet de prédire les proportions de diverses microstructures (ferrite polygonale, perlite, ferrite de Widmanstätten, bainite, martensite). Cependant, il contient un grand nombre de paramètres et plusieurs hypothèses sur la morphologie des grains et des précipités ainsi que sur les conditions de germination.

Modèles diffusifs

Une autre approche consiste à aborder la cinétique des transformations de phase en résolvant l'équation de diffusion sur un domaine biphasé.

Enomoto (1992) a présenté un modèle calculant la cinétique de formation de la ferrite proeutectoïde. Un calcul de la diffusion du carbone et d'éléments substitutionnels est effectué sur la base d'une solution analytique. Il permet de décrire la vitesse de migration de l'interface α/γ . Les concentrations à l'interface sont déduites du diagramme d'équilibre, en utilisant soit l'hypothèse d'équilibre local (équilibre thermodynamique à l'interface) soit l'hypothèse de para-équilibre (équilibre thermodynamique à l'interface pour le carbone, mais pas de partage pour les éléments d'alliage). Une loi de germination permet de prendre en compte les temps d'incubation.

Ågren (1992) a présenté une approche similaire, mais en résolvant numériquement l'équation de Fick sur un domaine monodimensionnel. Le modèle est couplé à une base de données thermodynamiques (CALPHAD) et fondé sur l'hypothèse d'équilibre local. Il peut être appliqué à diverses transformations de phase diffusives, telles que la croissance de ferrite équiaxe, la dissolution de la cémentite au chauffage ou la dissolution des carbures $M_{23}C_6$ dans les aciers austénitiques.

Silalahi (1995) a développé également un modèle numérique de diffusion, mais permettant de décrire l'avance d'une interface dans des conditions hors équilibre local. Le modèle prédit des vitesses de croissance plus lentes que celles obtenues avec les modèles basés sur l'hypothèse d'équilibre local, mais en bon accord avec les mesures dilatométriques.

Le problème a également été résolu pour un domaine bidimensionnel par Spanos (1994) pour le cas d'une croissance d'un précipité par un mécanisme de marches. Les calculs fournissent l'évolution de la forme du précipité et du champ de diffusion en fonction de différentes lois de germination pour les marches.

L'approche diffusive ne résout toutefois pas la question de la germination qui est généralement prise en compte par une loi empirique ou parfois simplement ignorée. L'autre principale limitation ou difficulté de ces méthodes est la description de la morphologie. Les modèles monodimensionnels font l'hypothèse d'une géométrie plane, cylindrique ou sphérique alors que les modèles bidimensionnels sont plus généraux, mais plus difficiles à formuler car la forme de l'interface libre doit également être décrite. Des solutions ont toutefois été proposées dans le domaine de la solidification pour calculer des morphologies dendritiques (Warren, 1995; Juric, 1996). Ces techniques pourraient également être appliquées aux transformations de phase à l'état solide, mais les questions des contraintes-déformations, de la relation d'orientation aux interfaces et de l'anisotropie rendent le problème plus complexe encore. Néanmoins, ce genre d'approches en 2 et 3 dimensions, couplées au diagramme d'équilibre

d'alliages multi-composés, constitue probablement l'avenir de la modélisation des transformations de phase à l'état solide.

2.2 Transformations de phase au chauffage

2.2.1 Phénoménologie

Lorsque l'on chauffe un acier faiblement allié à des températures supérieures à 727°C environ, les phases stables ou métastables à basse température disparaissent au profit de la phase austénitique. Les mécanismes et les cinétiques de formation de l'austénite dépendent non seulement des phases présentes mais aussi de leur morphologie, de leur composition et de l'échelle de la microstructure. Nous nous limiterons ici au cas de la formation d'austénite à partir d'agrégats de ferrite et de cémentite.

Ferrite

Dans les structures entièrement ferritiques (fer pur), l'austénite se forme préférentiellement aux joints de grains. Les mécanismes de germination et croissance ont été étudiés par Speich (1969) qui a montré que la germination avait lieu aux interfaces α/α . La transformation $\alpha \rightarrow \gamma$ dans le fer est une transformation massive. La température à laquelle elle a lieu n'est que très faiblement influencée par la vitesse de chauffe. Il faut en effet appliquer des vitesses de chauffe supérieures à 10'000°C/s pour observer un décalage significatif (Brooks, 1992).

Ferrite et carbures sphéroïdisés

Les aciers hypo- ou hypereutectoïdes présentent parfois une structure composée de carbures de forme sphéroïdale dispersés dans une matrice ferritique. Cette structure est obtenue par un revenu de maturation (par exemple maintien à 700°C pendant 10h). La formation de l'austénite au chauffage dans ce type de structure débute par la germination de la phase austénitique aux interfaces carbure/ferrite (Roberts, 1943). Des observations au microscope électronique sur des échantillons trempés en cours de transformation ont montré que la germination avait lieu préférentiellement aux jonctions entre les joints de grains α/α et les carbures (Speich, 1969). La phase γ se développe alors le long de l'interface carbure/ferrite pour entourer le carbure partiellement ou complètement. La transformation est ensuite gouvernée par la cinétique de diffusion du carbone dans la couche d'austénite.

Hillert (1971) distingue cinq mécanismes de croissance de l'austénite dans les structures à cémentite sphéroïdisée. Le mécanisme adopté dépend de la teneur en carbone de l'acier. A faible concentration, la cinétique est dictée par la diffusion du carbone dans la couche d'austénite qui est rapidement formée autour de la particule après germination (Fig. 2.9 (a)). Comme les particules de carbures sont éloignées les unes des autres, l'interaction entre les particules peut être négligée. A des concentrations supérieures, la transformation est influencée par des carbures proches qui contribuent à un léger enrichissement de la ferrite par un mécanisme de dissolution (Fig. 2.9 (b)). A plus forte concentration, les particules de cémentite sont très rapprochées, si bien que les couches d'austénite forment rapidement une zone austénitique compacte (Fig. 2.9 (c) et (d)). A haute

température, la ferrite peut se transformer en austénite sans diffusion du carbone. La transformation se résume alors à une dissolution de particules de cémentite dans une matrice austénitique (Fig. 2.9 (e)).

Judd et Paxton (1968) ont mesuré par métallographie quantitative les cinétiques d'austénitisation d'un alliage Fe-C et d'un acier au manganèse sphéroïdisé. Ils ont observé un taux de germination et une vitesse de croissance réduits en présence de Manganèse.

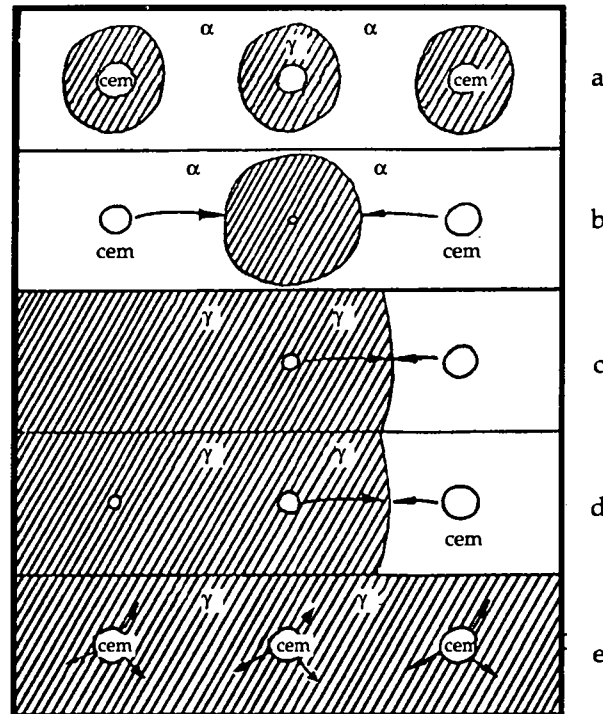


Fig. 2.9 : Mécanismes de dissolution de la cémentite. D'après (Hillert, 1971).

Perlite lamellaire

Les aciers eutectoïdes refroidis à des vitesses modérées présentent une structure perlitique, constituée de colonies de lamelles alternées de α et Fe_3C . Chaque colonie provient d'un germe ayant donné lieu à une croissance couplée. La germination de l'austénite au chauffage dans de telles structures a lieu à l'intersection des colonies de perlite (Roberts, 1943; Garcia, 1981). Speich et Szirmai (1969) ont également montré que la germination à l'intérieur d'une colonie est rare, malgré l'importante aire d'interface entre α et Fe_3C .

La croissance de l'austénite est ensuite essentiellement dictée par la diffusion du carbone dans l'austénite. A basse température, la diffusion aux interfaces peut influencer la cinétique de dissolution. Roberts (1943) et Speich (1969) ont mesuré la vitesse de croissance des nodules d'austénite dans une structure perlitique. La vitesse de dissolution dépend du coefficient de diffusion du carbone dans l'austénite et de la distance caractéristique de diffusion qui est proportionnelle à l'espacement interlamellaire. La cinétique de transformation est donc fortement dépendante de la microstructure initiale.

Ferrite et perlite

L'austénitisation dans les aciers hypoeutectoïdes contenant de la perlite lamellaire débute, comme pour les cas des aciers eutectoïdes, par la germination de nodules d'austénite aux interfaces entre les colonies. Garcia et Deardo (1981) ont observé que la germination peut aussi avoir lieu à l'interface entre les colonies de perlite et les grains de ferrite proeutectoïde.

Étant les moins stables de la structure, les régions perlitiques sont les premières à disparaître au profit de l'austénite. Cette étape se déroule à des vitesses relativement élevées car les distances de diffusion, caractérisées par l'espacement interlamellaire, sont en général très faibles. La dissolution de la ferrite proeutectoïde intervient dans une seconde étape par la croissance des nodules d'austénite provenant des anciennes colonies de perlite. Dans cette seconde étape, la cinétique devient beaucoup plus lente car les distances de diffusion sont nettement plus élevées.

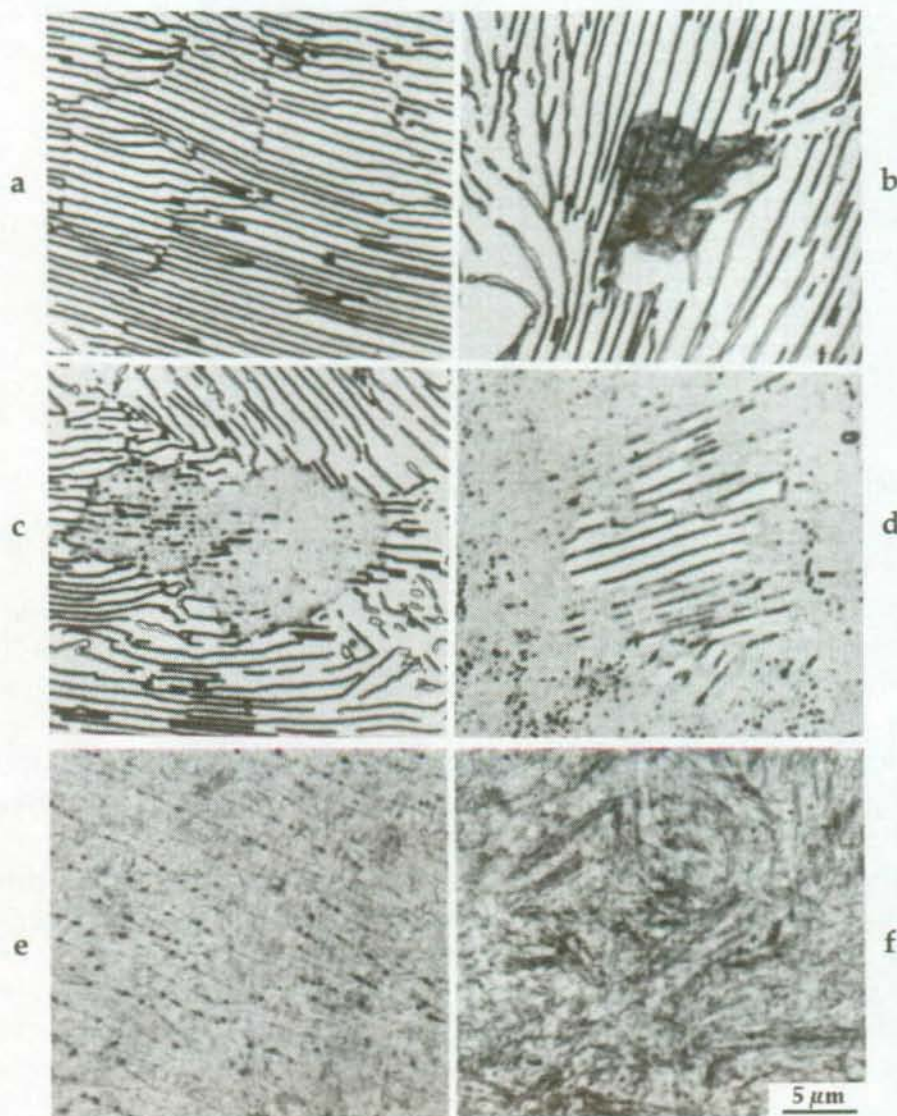


Fig. 2.10 : Austénitisation d'une microstructure perlitique maintenue à 730°C puis trempée à l'eau. Après 20 s (a), 25 s (b), 26 s (c), 30 s (d), 60 s (e), et 300 s (f) (Samuels, 1980).

Homogénéisation

La figure 2.10 montre la formation d'austénite dans la structure perlitique d'un acier eutectoïde maintenu à 730°C (Samuels, 1980). Ces micrographies optiques ont été obtenues après une trempe à l'eau et un recuit 200°C. On peut observer la germination d'un nodule à l'interface entre les colonies (Fig. 2.10 (b) et (c)) et sa progression au cours du temps (Fig. 2.10 (c), (d) et (e)). Il faut remarquer également la présence de carbures non dissous qui subsistent longtemps après la fin de la transformation (Fig. 2.10 (e) et (f)). Cette dernière observation montre que l'homogénéisation d'une telle structure nécessite un temps de maintien plus important que celui nécessaire à la seule transformation. La figure 2.11 indique les temps nécessaires pour obtenir une austénite homogène en fonction de la température de maintien. On s'aperçoit que si 100 s environ suffisent pour réaliser la transformation à 740°C, il faut prolonger le traitement à 10'000 s environ pour terminer la dissolution des derniers carbures et à un temps encore beaucoup plus long pour homogénéiser l'austénite.

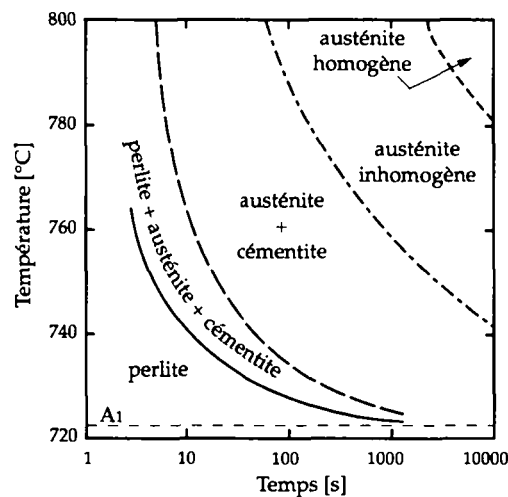


Fig. 2.11 : Diagramme TTA (Temps Température Austénitisation) d'un acier eutectoïde. D'après (Roberts, 1943).

2.2.2 Cinétique

Dans une étude classique du processus d'austénitisation des aciers eutectoïdes, Roberts et Mehl (1943) ont établi les premiers diagrammes TTA (Temps Température Austénitisation), équivalents des diagrammes TTT au chauffage. Rose et Strassburg (1956) ont effectué des mesures similaires sur des aciers hypoeutectoïdes en conditions isotherme et anisotherme. Par la suite, en effectuant des mesures dilatométriques en chauffage rapide, Orlich *et al* (1954) ont publié l'"Atlas zur Wärmebehandlung der Stähle" qui regroupe des diagrammes TTA d'un grand nombre d'aciers.

Comme pour les diagrammes au refroidissement, les diagrammes TTA contiennent deux courbes indiquant les temps de début et de fin de transformation pour un maintien isotherme (Fig. 2.11). Les courbes présentent toutefois une forme différente : en forme de demi-C plutôt qu'en C. L'augmentation conjuguée de la diffusivité et de la force motrice avec la température explique la forme en demi-C et l'absence de maximum pour la cinétique de transformation.

Les diagrammes TTA des aciers hypoeutectoïdes contiennent généralement une ligne supplémentaire indiquant la fin de la dissolution de la perlite. Surovtsev et Yarovoi (1984) ont montré par des mesures dilatométriques que la formation d'austénite lors d'un chauffage continu présente parfois un arrêt entre la fin de la dissolution de la perlite et le début de dissolution de la ferrite proeutectoïde.

Les diagrammes TTA contiennent également des indications importantes pour l'homogénéisation de l'austénite. La mise en solution des carbures joue en effet un rôle important sur les propriétés finales. Sa cinétique parfois très lente doit donc être prise en compte dans le choix des paramètres d'austénitisation.

2.2.3 Modélisation

Parmi les modèles décrivant les transformations de phase au chauffage, on retrouve les types d'approches utilisés pour la décomposition de l'austénite. Toutefois, les mécanismes de transformation étant plus simples, en raison de l'absence de transformation sans diffusion et morphologies compliquées, l'approche diffusive a été souvent choisie et les modèles empiriques abandonnés. On trouve cependant plusieurs modèles basés sur une règle d'additivité. Ces derniers sont souvent incorporés dans un logiciel de simulation des traitements thermiques.

Modèles basés sur une règle d'additivité

Denis et Farias (1992) ont établi un modèle mathématique permettant de prédire l'évolution structurale dans une pièce soumise à un cycle thermique rapide. La méthode est basée sur la règle d'additivité présentée au paragraphe 2.1.3 (éqs. 2.17 et 2.18). Le modèle décrit séparément les deux étapes d'austénitisation dans les aciers hypoeutectoïdes en utilisant des lois de Johnson-Mehl-Avrami différentes pour la dissolution de la perlite et la transformation de la ferrite. Il prend en compte les inhomogénéités de concentration et la taille du grain austénitique à la fin du chauffage. Le modèle prédit également les fractions de phase et duretés obtenues lors du refroidissement en fonction de l'état à haute température. Le modèle est couplé à un solveur thermique pour des géométries cylindriques. Le modèle de Leblond et Devaux, basé sur l'équation 2.19, s'applique également au chauffage. Il prédit en outre l'évolution de la taille du grain austénitique.

Modèles diffusifs

L'approche diffusive a souvent été choisie pour décrire le processus d'austénitisation. Cette démarche est justifiée par le fait que la cinétique de croissance de la transformation est principalement dictée par la diffusion du carbone dans l'austénite.

L'approche de Brandt (Brandt-WH, 1945), développée pour décrire la cinétique de croissance couplée de la perlite a été reprise par Speich *et al* (1969) pour être appliquée au cas de la dissolution au chauffage. Le modèle qui est décrit en détail dans l'annexe 7.4 est basé sur une solution de premier ordre de l'équation de diffusion bidimensionnelle stationnaire avec terme de transport. Faisant l'hypothèse de l'équilibre local à l'interface et négligeant les effets de courbure, les auteurs obtiennent une solution pour la vitesse de croissance en fonction de la température et de l'espacement interlamellaire. Le modèle prédit toutefois une cinétique de dissolution considérablement plus basse que les valeurs

expérimentales. Dans la même publication, les auteurs présentent un modèle plus simple fondé sur des ordres de grandeurs uniquement. Ils aboutissent à la relation :

$$v = \frac{4 (c_{\gamma/\theta} - c_{\gamma/\alpha}) D}{\pi (c_{\alpha/\gamma} - c_{\gamma/\alpha}) \lambda} \quad 2.24$$

où v est la vitesse de croissance, D le coefficient de diffusion du carbone dans l'austénite, λ l'espacement interlamellaire et $c_{\alpha/\gamma}$, $c_{\gamma/\alpha}$ et $c_{\gamma/\theta}$ les concentrations dans la ferrite à l'interface α/γ et dans l'austénite aux interfaces γ/α et γ/θ respectivement. Ce modèle fournit un meilleur accord expérimental.

Judd et Paxton (1968) ont développé un modèle décrivant la cinétique isotherme de l'austénitisation dans les aciers à bas carbone de structure initiale globulitique. Le modèle suppose un équilibre local à l'interface, l'absence de diffusion dans la ferrite et un arrangement géométrique régulier des carbures. Ces hypothèses permettent d'utiliser une solution analytique de l'équation de diffusion pour calculer la vitesse d'avance de l'interface. Des mesures par analyse d'images effectuées sur des échantillons trempés en cours de transformation montrent des résultats en bon accord avec le modèle. Toutefois, des écarts sont observés dans les aciers contenant du manganèse. Les auteurs les expliquent par un phénomène de partition du manganèse à l'interface qui a pour effet de ralentir la vitesse de croissance.

Hillert *et al.* (1971) ont mené une approche similaire en s'intéressant aux aciers multicomposés de structure initiale globulaire. Une solution analytique pour des géométries simplifiées, couplée au diagramme de phase binaire ou ternaire permet d'estimer la vitesse de dissolution des carbures. Les auteurs en concluent que l'hypothèse d'équilibre local semble vérifiée même en présence d'éléments d'alliage.

Karlsson (1972) a développé un modèle similaire pour le cas de structures globulitique et lamellaire. Le profil de concentration dans l'austénite est obtenu par une solution analytique de l'équation de Fick. La position de l'interface est considérée comme étant le point où la concentration vaut $c_{\gamma/\alpha}$, donnée par la ligne $(\alpha+\gamma)/\gamma$ du diagramme d'équilibre. Les paramètres microstructuraux tels que la taille moyenne des zones perlitiques dans les aciers hypoeutectoïdes et la distance libre moyenne les séparant ont été mesurés expérimentalement et utilisés dans le modèle. Les comparaisons expérimentales indiquent que le modèle prédit des cinétiques légèrement trop rapides.

Inoue (1987) a présenté un modèle décrivant la dissolution de la perlite lamellaire. Le modèle résout par une méthode de différences finies l'équation de diffusion non stationnaire en 2 dimensions. Le domaine est constitué de 3 zones (ferrite, cémentite et austénite). La condition de flux à l'interface n'est toutefois pas directement prise en compte. La position de l'interface est en effet déduite à partir d'une iso-concentration uniquement. Les résultats se présentent sous la forme de champs de concentration à différents stades de la transformation. Il permet de prédire également l'homogénéisation de l'austénite après la transformation.

Akbay, Reed et Atkinson, (Akbay, 1994; Atkinson, 1995) ont mené une approche similaire à celle de Hillert et de Karlsson en résolvant numériquement et analytiquement l'équation de diffusion monodimensionnelle pour des alliages binaires (Akbay, 1994) et ternaires (Atkinson, 1995). La résolution de l'équation non stationnaire et l'utilisation de coefficients de diffusion dépendant de la

température et de la concentration locale (modèle binaire uniquement) permettent de lever plusieurs hypothèses des modèles antérieures et d'obtenir des cinétiques réalistes. Les résultats sont présentés sous la forme de diagrammes TTA en condition de chauffage continu. Ils montrent l'influence des éléments d'alliage.

2.3 Croissance du grain austénitique

2.3.1 Mécanismes de croissance et modèles analytiques

La croissance du grain austénitique joue un rôle prépondérant dans le traitement thermique des aciers. En effet, le maintien à une température d'austénitisation, qui constitue généralement la première étape du traitement, conduit, après la formation d'austénite, à un grossissement du grain dont la taille finale aura une influence importante sur les proportions et les morphologies des phases obtenues après refroidissement.

L'évolution de la taille du grain dans les structures polycristallines est un vaste sujet qui a fait l'objet de plusieurs articles de revues et conférences internationales (Atkinson, 1988; Glazier, 1992; Pande, 1993; Yoshinaga, 1996). Nous nous limiterons ici à présenter les mécanismes de base ainsi que quelques modèles analytiques et numériques représentatifs des différentes approches réalisées jusqu'à aujourd'hui.

Nous ne parlerons que de la croissance dite "normale" qui est définie par une faible largeur de la distribution de la taille du grain et par la conservation de la forme de la distribution au cours de l'évolution. La croissance "anormale" se caractérise quant à elle par le développement de quelques très gros grains aux dépens des plus petits.

La force motrice de la croissance du grain est l'énergie de surface associée aux joints de grains que le système tend à diminuer. En 1952, Burke et Turnbull ont réalisé une première approche quantitative du phénomène en considérant la migration des interfaces pour un grain isolé. Le modèle est basé sur quatre hypothèses :

- la tension de surface γ est indépendante de la taille du grain, des orientations cristallographiques et du temps,
- le rayon de courbure des interfaces est proportionnel à la taille du grain, R ,
- la seule force agissant sur l'interface est l'effet de courbure donné par γ/R ,
- l'évolution de la taille moyenne des grains, $d\bar{R}/dt$, est proportionnelle à la force moyenne agissant sur l'interface.

Ces hypothèses conduisent à l'équation différentielle :

$$\frac{d\bar{R}}{dt} = \mu \frac{\gamma}{\bar{R}} \quad 2.25$$

où μ est un coefficient de mobilité de l'interface.

La résolution donne la relation :

$$\bar{R}^2(t) - \bar{R}^2(0) = \mu \gamma t \quad 2.26$$

En prenant $\bar{R}(t) \gg \bar{R}(0)$, on obtient :

$$\bar{R} = K t^{1/n} \quad 2.27$$

où K est un facteur de proportionnalité et $n = 2$ l'exposant de la loi de croissance. De nombreux efforts ont été réalisés pour déterminer expérimentalement l'exposant de croissance n en mesurant l'évolution de la taille du grain dans des métaux ou des céramiques très purs (voir tableau 2.1). Il en ressort que les valeurs expérimentales sont généralement supérieures à 2.

Métal	Paramètre n	Référence
Al	4	Gordon (1965)
Fe	2.5*	Hu (1974)
Pb	2.5	Bolling (1958)
Pb	2.4	Drolet (1968)
Sn	2.3	Drolet (1968)
Sn	2	Holmes (1959)

Tableau 2.1 : paramètre n de la croissance de grains déterminé expérimentalement à partir de mesures isothermes sur différents métaux purifiés par refusion de zone. L'astérisque indique que le paramètre n varie avec la température de l'expérience. D'après (Anderson, 1984).

A la même époque, Smith (1952) a abordé la question sous un angle différent en considérant que la croissance du grain résulte de l'interaction de contraintes topologiques de remplissage de l'espace et d'effets de tension de surface. La contrainte topologique peut être exprimée par la relation d'Euler qui relie le nombre de cellules C (grains dans les structures 3D), le nombre de faces F (nombre de joints de grains en 3D ou nombre de grains en 2D), le nombre d'arêtes A et le nombre de sommets S :

$$F - A + S = 1 \quad (2D) \quad 2.28$$

$$-C + F - A + S = 1 \quad (3D) \quad 2.29$$

La tension de surface impose un équilibre mécanique aux sommets, résultant en des angles de 120° entre les trois arêtes issues de chaque sommet dans une structure bidimensionnelle et en des angles de 109.5° dans les structures tridimensionnelles. Cette condition impose une courbure aux joints de grains afin de satisfaire l'équilibre à chaque sommet. La structure évoluera par la migration des interfaces en direction de leur centre de courbure. Par ailleurs, des transformations topologiques sont nécessaires pour poursuivre l'évolution. En deux dimensions, elles se résument à l'échange de voisins et à la disparition de grains à trois arêtes (v. Fig. 2.12).

La croissance de grain a également été abordée en cherchant à décrire l'évolution de la distribution de taille $F(R,t)$ au cours du temps. Feltham (1957) a fait l'hypothèse d'une distribution log-normale et invariante pour R/\bar{R} et a obtenu une relation pour la vitesse de croissance $d\bar{R}/dt$ qui est approximativement proportionnelle à la courbure. Il débouche ainsi sur la relation parabolique (2.27) avec $n = 2$. Hillert (1965) a développé un modèle similaire basé sur une relation

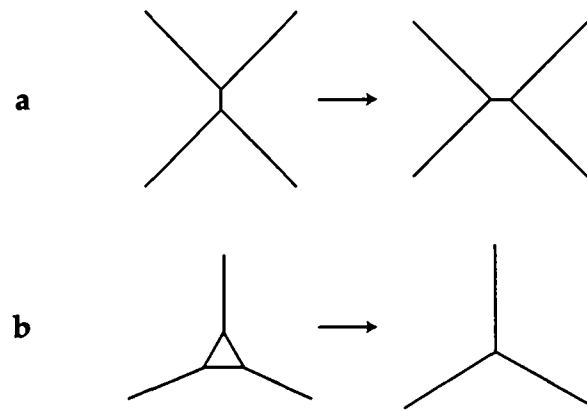


Fig. 2.12 : Changements topologiques fondamentaux pendant la croissance du grain dans une structure bidimensionnelle : échange de voisins (a) et suppression d'un grain à trois faces (b).

donnant la vitesse de croissance ou de décroissance d'un grain en fonction de sa taille R :

$$\frac{dR}{dt} = \alpha \mu \gamma \left(\frac{1}{R_c} - \frac{1}{R} \right) \quad 2.30$$

où α est un facteur géométrique et R_c un rayon critique de la microstructure. Un grain de rayon R croît si $R > R_c$ et décroît sinon. La résolution conduit à une distribution plus resserrée que la fonction log - normale, mais également à une loi de croissance avec un exposant n égal à 2.

Lücke et Abbruzzese (Brandt-R, 1996; Abbruzzese, 1992; Lücke, 1992) ont repris le modèle statistique de Hillert en lui donnant un fondement topologique et en introduisant une résolution numérique de l'équation de continuité pour $F(R,t)$. Le modèle permet de calculer l'évolution de $F(R,t)$ pour diverses distributions initiales. Il peut prédire certaines propriétés topologiques telles que le nombre moyen de faces, d'arêtes et de sommets. La cinétique de croissance obtenue correspond à la loi parabolique (2.27) avec un exposant n égal à 2.

Louat (1974) a abordé la question de la croissance du grain en considérant que le mouvement des interfaces est un processus aléatoire. Cette hypothèse mène à l'équation suivante pour la distribution F :

$$\frac{\partial F}{\partial t} = \frac{D}{2} \frac{\partial^2 F}{\partial R^2} \quad 2.31$$

où D est un coefficient de diffusion.

La résolution conduit à une distribution de Rayleigh et un exposant de la loi de croissance égal à 2 également. Le fondement physique du modèle reste cependant peu clair et l'effet de la tension de surface n'est pas directement pris en compte.

Reprenant l'idée de Louat concernant l'aspect stochastique du mouvement des interfaces, Pande (1987) a présenté un modèle comportant une composante déterministe et une composante stochastique. La vitesse de croissance est donnée par la relation :

$$\frac{dR}{dt} = -\frac{k}{R} + L(t) \quad 2.32$$

où k est une constante positive et $L(t)$ une fonction de bruit représentant l'aspect stochastique.

Hillert (1965) a présenté une approche topologique de la croissance de grain en montrant la similarité entre l'évolution d'un défaut dans la structure de grains (par exemple un grain à cinq arêtes dans une structure bidimensionnelle) et le mouvement des dislocations dans un métal. Le modèle conduit également à une loi de croissance avec un exposant n égal à 2.

Il faut encore signaler le modèle de Rhines et Craig (1974) basé sur deux notions nouvelles : la constante de balayage θ_{RC} et le gradient structural σ_{RC} . θ_{RC} est défini comme étant le nombre de grains éliminés lorsque l'ensemble des interfaces a balayé un volume égal au volume du système considéré. Selon les auteurs, cette grandeur serait constante dans un système conservant la forme de la distribution de taille au cours de la croissance. D'après un modèle monodimensionnel sphérique, θ_{RC} est estimé à 4.

Le gradient structural σ_{RC} est défini quant à lui comme une grandeur adimensionnelle mettant en rapport la courbure des interfaces (définie par les rayons de courbures principaux r_1 et r_2), la surface spécifique, S_V , et la densité de grains N_V :

$$\sigma_{RC} = \frac{S_V}{N_V} \int_{S_V} \frac{1}{2} \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) dS_V \quad 2.33$$

Les auteurs ont déterminé σ_{RC} expérimentalement et constaté qu'il restait constant au cours de la croissance. Ils ont alors établi un modèle cinétique basé sur l'hypothèse que σ_{RC} et θ_{RC} sont constants. Ils obtiennent une relation linéaire pour l'évolution du volume moyen \bar{V} :

$$\bar{V} = \bar{V}_0 + \frac{\theta_{RC} \mu \gamma \sigma_{RC}}{S_V} t \quad 2.34$$

où μ est la mobilité de l'interface et γ la tension de surface. Cette expression est équivalente à la relation cinétique (2.27) avec un coefficient n égal à 3. Le modèle est donc en contradiction avec les travaux précédents. Cependant, Kurtz et Carpay (1980) ont repris ultérieurement l'approche de Rhines et Craig et ont obtenu une cinétique parabolique. Une comparaison détaillée des deux modèles fait toutefois encore défaut.

2.3.2 Modèles numériques

Selon Glazier (1992), les modèles numériques de la croissance de grain peuvent être répartis en quatre classes : simulations directes, modèles de vertex, modèles de Potts et méthodes de champ moyen. Un aperçu des trois premières méthodes est présenté ici, de même qu'une nouvelle approche basée sur les diagrammes de Laguerre.

Méthodes directes

Nous appelons ici méthodes directes ou modèles mécaniques, les approches basées sur une équation de mouvement des interfaces (contrairement à la définition de Atkinson (1988) qui englobe l'ensemble des modèles à l'exception des approches statistiques).

Frost *et al* (1988, 1990, 1993) ont développé une méthode directe bidimensionnelle basée sur la discrétisation des interfaces par une série de points séparant les points

triples (vertex). Les interfaces sont déplacées en utilisant une relation qui relie la vitesse v à la courbure locale K :

$$v = \mu \gamma K n \quad 2.36$$

où n est le vecteur unitaire normal à l'interface. Dans une seconde étape, les points triples sont également déplacés afin de satisfaire l'équilibre mécanique. Des angles de 120° sont imposés entre les tangentes aux extrémités des joints de grains. Le modèle prend en compte les changements topologiques, qui se résument à l'échange de voisins et la disparition des grains à trois arêtes dont la surface est inférieure à une valeur critique (v. Fig. 2.12). Des modèles similaires ont été développés par Weaire *et al* (1991) pour décrire la croissance des domaines magnétiques sous l'application d'un champ, ainsi que par Kermode (1990) pour décrire l'évolution de structures de bulles de savon.

Modèles de vertex

Les premiers modèles de vertex (Fullman, 1952; Soares, 1985) suivent une approche similaire à celle des méthodes directes. Le problème est cependant simplifié en considérant uniquement les points triples (vertex) et en admettant que ceux-ci sont reliés par des interfaces droites. L'évolution est alors dictée par la force agissant sur un point triple. La direction de la force, n_{F_i} , est définie par la position des trois voisins :

$$n_{F_i} = \sum_{\text{voisins } j} (x_i - x_j) / |x_i - x_j| \quad 2.37$$

où les vecteurs x_i et x_j repèrent respectivement la position du vertex et de ses voisins. La vitesse avec laquelle le vertex est déplacé est obtenue à partir de la tension de surface γ et d'un coefficient de mobilité M^1 :

$$v_i = M \gamma n_{F_i} \quad 2.38$$

La méthode présente l'avantage d'une simplicité de formulation et d'une résolution peu gourmande en temps de calcul. L'algorithme s'étend aisément à 3 dimensions. Cependant, l'influence de la courbure n'est pas prise en compte directement dans le modèle. Elle intervient seulement au niveau des angles entre les segments reliant les points triples, qui diffèrent de 120° (2D) ou 109.5° (3D) si les interfaces sont courbes. Cette approximation peut conduire à des déviations par rapport à des modèles plus physiques tels que les méthodes directes.

Par la suite, le modèle a été modifié afin d'introduire la courbure des interfaces (Marsh, 1993). Celles-ci sont supposées être des arcs de cercle dont la courbure définit leur vitesse de migration. Le déplacement d'un vertex est alors calculé en pondérant les vitesses de migration des interfaces voisines.

Des modèles plus sophistiqués ont été présentés par Kawasaki et ses collaborateurs (Kawasaki, 1990; Fuchizaki, 1996). La formulation est basée sur une fonction d'énergie de dissipation. La résolution d'un système d'équations permet de déduire les vitesses de chaque vertex. Le modèle qui est plus général que ceux de Fullman et Soares prend en compte la courbure des interfaces.

¹ Contrairement à la mobilité μ définie précédemment, dont l'unité est le $[m^3N^{-1}s^{-1}]$, la mobilité M définie ici se mesure en $[m^2N^{-1}s^{-1}]$.

Méthode de Monte Carlo

Les modèles de Monte Carlo s'appuient sur les travaux de Potts sur la réorientation des domaines magnétiques par alignement des spins. L'approche est à l'origine atomistique car il s'agit de décrire les sauts d'atomes entre deux grains voisins.

Le principe présenté pour la première fois par Anderson *et al* (1984) consiste à décrire la microstructure par un réseau de cellules carrées ou hexagonales. Chaque cellule possède un nombre S compris entre 1 et Q et correspondant à une identification du grain auquel elle appartient. Q est choisi suffisamment grand pour que la rencontre de grains de même orientation soit relativement rare. Le but consiste à réduire l'énergie d'interface, ces dernières étant définies par les frontières entre les cellules d'indices S différents. Mathématiquement, il s'agit de minimiser le Hamiltonien :

$$H = \frac{J}{2} \sum_{\text{cellules } i} \sum_{\text{voisins } j} (1 - \delta_{S_i S_j}) \quad 2.39$$

où J est un paramètre représentant l'énergie de surface, δ le symbole de Kronecker et S_i et S_j les indices des cellules i et j . La minimisation est effectuée par un processus stochastique qui consiste à choisir une cellule i aléatoirement dans le système ainsi qu'une nouvelle orientation S_i' également prise au hasard parmi les $(Q-1)$ orientations restantes. La transition d'indice $S_i \rightarrow S_i'$ est alors effectuée avec une probabilité W dépendant de la différence d'énergie associée aux deux états :

$$W = \begin{cases} \exp(-\Delta G/RT) & \Delta G > 0 \\ 1 & \Delta G \leq 0 \end{cases} \quad \text{avec} \quad 2.40$$

$$\Delta G = \frac{J}{2} \sum_{\text{voisins } j} (1 - \delta_{S_i' S_j}) - \frac{J}{2} \sum_{\text{voisins } j} (1 - \delta_{S_i S_j}) \quad 2.41$$

L'unité de temps est le pas de Monte Carlo (MCS) défini comme étant N tirs aléatoires de cellules, où N est le nombre total de cellules dans le système.

La méthode prédit un exposant de croissance $n = 2.44$ constant après une transitoire initiale. Selon Anderson (1984), la déviation de l'exposant de croissance par rapport à la valeur 2 prédite par les modèles analytiques proviendrait du mécanisme de déplacement des interfaces par "sauts discrets" et refléterait la nature aléatoire du processus. Le modèle rejoindrait ainsi la théorie de Louat sur la nature stochastique de la croissance du grain. Les auteurs présentent des exposants de croissance expérimentaux en accord avec celui du modèle, mais comportant une dispersion relativement importante (valeurs entre 2 et 4).

La méthode a été appliquée à de nombreuses situations et par de nombreux chercheurs. En effet, elle a permis de décrire les distributions de taille (Srolovitz, 1984a), l'effet de la présence de particules d'une seconde phase (Srolovitz, 1984b), l'effet de l'anisotropie de l'énergie de surface (Grest, 1985; Rollet, 1989), la croissance anormale (Grest, 1985; Grest, 1990), la recristallisation statique (Rollet, 1990; Pezzee, 1994), la recristallisation dynamique (Rollet, 1992; Peczak, 1993), et la croissance granulaire dans les zones affectées thermiquement

en soudure (Radhakrishnan, 1995b). Le modèle, développé à l'origine en 2 dimensions, a été également étendu en 3 dimensions (Doherty, 1990; Grest, 1990). La méthode de Monte Carlo comporte toutefois l'inconvénient de posséder des échelles d'espace et de temps arbitraires. Cependant, Radhakrishnan (1995b) a présenté clairement une procédure permettant de calibrer les paramètres du modèle.

Modèle de Laguerre

Liebling et al. (Xue, 1996) ont développé une approche différente basée sur les diagrammes de Laguerre. Le principe consiste à définir une famille de sites dits pondérés représentant des centres de grains. Un site pondéré est défini par le couple (s_i, w_i) où s_i est le vecteur des coordonnées et w_i un facteur de pondération correspondant à la surface du grain. La cellule de Laguerre $L(S_i)$ associée au site S_i est définie par la condition :

$$L(S_i) = \left\{ x \in \mathbb{R}^3 : d^2(x, s_i) - w_i \leq d^2(x, s_j) - w_j, \text{ pour } j \neq i \forall i, j \in \{1, \dots, N\} \right\} \quad 2.42$$

où $d^2(x, s_i)$ est la distance entre le point x et le site i , et N le nombre total de sites.

En trois dimensions, la cellule de Laguerre associée à un site prend la forme d'un polyèdre. Elle correspond à la tessellation de Voronoi, si l'on prend des facteurs de pondération égaux pour tous les sites. L'ensemble des cellules de Laguerre forme le diagramme de Laguerre représentatif de la structure polygranulaire.

L'évolution de la structure est décrite en déplaçant les sites générateurs du diagramme de Laguerre et en modifiant leur facteur de pondération. La vitesse appliquée à un site dépend des forces agissant sur les sommets de la cellule de Laguerre associée. La force est déterminée à partir du gradient d'enthalpie libre en ces points. L'avantage de la méthode réside dans la facilité à traiter les modifications topologiques, l'absence d'anisotropie due à un réseau et la rapidité d'exécution.

2.4 Physique du procédé de traitement thermique par induction

La modélisation du procédé de traitement thermique par induction nécessite la prise en compte de nombreux phénomènes physiques. Nous allons présenter ici quelques notions de base et quelques lois physiques dans les domaines de l'induction, de la thermique et des transformations de phase, qui sont les principaux aspects à considérer dans un modèle.

2.4.1 Induction

Principe de base

Le principe de base du chauffage par induction consiste à appliquer une tension alternative à un inducteur à l'intérieur duquel on place la pièce à chauffer. Considérons le cas d'un inducteur constitué de spires circulaires horizontales chauffant une pièce cylindrique placée verticalement (Fig. 2.13). Le champ magnétique H généré par le courant circulant dans les spires présente des lignes de force fermées autour des spires, avec un sens donné par la "règle de la main droite". Le champ pénétrant dans la pièce est orienté principalement selon l'axe

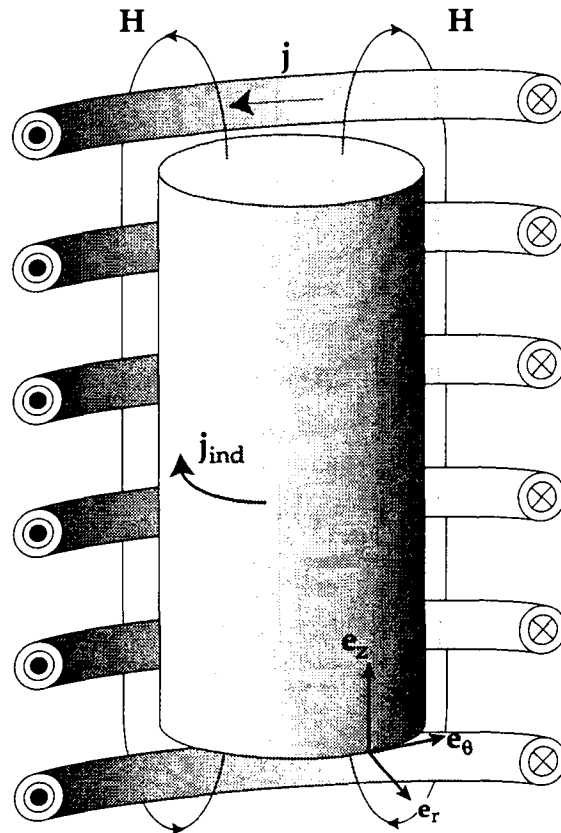


Fig. 2.13 : Chauffage par induction d'une pièce cylindrique.

vertical et génère des courants induits horizontaux, j_{ind} , dont le sens est donné par la loi de Lenz et donc opposé au courant circulant dans l'inducteur.

Le problème peut naturellement être décrit par les équations de Maxwell. Les trois relations utiles dans ce cas sont :

$$\operatorname{div} \mathbf{B} = 0 \quad 2.43$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = - \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad 2.44$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = \mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad 2.45$$

où \mathbf{H} est le champ magnétique, \mathbf{B} le champ d'induction magnétique, \mathbf{E} le champ électrique, \mathbf{j} la densité de courant, et \mathbf{D} le champ de déplacement électrique.

Distribution du champ magnétique des courants induits

Les distributions du champ magnétique \mathbf{H} et de la densité de courant \mathbf{j} induit dans la pièce cylindrique peuvent être établies à partir des équations 2.44 et 2.45. En considérant un champ magnétique vertical (situation d'un très long inducteur) dans le repère cylindrique $(\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\theta, \mathbf{e}_z)$ et en négligeant les courants displacifs, la relation 2.45 devient :

$$j_\theta = - \frac{\partial H_z}{\partial r} \quad 2.46$$

$$j_r = j_z = 0 \quad 2.47$$

La relation 2.44 dans le repère cylindrique s'écrit :

$$\frac{1}{r} \frac{\partial(rE_\theta)}{\partial r} = - \frac{\partial B_z}{\partial t} \quad 2.48$$

Introduisons la relation :

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H} = \mu_0 (\mathbf{H} + \mathbf{M}) = \mu_0 \mu_r \mathbf{H} \quad 2.49$$

où \mathbf{M} est l'aimantation, μ la perméabilité magnétique, μ_0 la perméabilité magnétique du vide ($4\pi \cdot 10^{-7}$ V s A⁻¹ m⁻¹) et μ_r la perméabilité magnétique relative. Considérons un signal sinusoïdal de fréquence angulaire ω :

$$\mathbf{H} = H_0 e^{i\omega t} \quad 2.50$$

Le membre de droite de l'équation 2.48 peut alors s'écrire sous la forme suivante :

$$\frac{\partial B_z}{\partial t} = i \omega \mu H_z \quad 2.51$$

La loi d'Ohm :

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E} \quad 2.52$$

où σ est la conductivité électrique de la pièce, et la relation 2.51 permettent de réécrire l'équation 2.48 :

$$\frac{j_\theta}{r} + \frac{\partial j_\theta}{\partial r} = -i\omega\sigma\mu H_z \quad 2.53$$

En substituant j_θ dans l'équation 2.53 à l'aide de la relation 2.46 et de sa dérivée par rapport à r , on obtient finalement l'équation différentielle hyperbolique suivante (équation d'onde) :

$$\frac{1}{r} \frac{\partial H_z}{\partial r} + \frac{\partial^2 H_z}{\partial r^2} = i\omega\sigma\mu H_z \quad 2.54$$

Sa résolution nécessite l'utilisation des fonctions de Bessel que nous n'introduisons pas ici. Pour plus de détails, on se référera à l'ouvrage de Davies (1990). Le calcul peut toutefois être effectué aisément dans le cas où la profondeur de pénétration est faible par rapport au rayon de la pièce. L'équation 2.54 devient alors :

$$\frac{\partial^2 H_z}{\partial r^2} = i\omega\sigma\mu H_z \quad 2.55$$

Elle admet pour solution :

$$H_z = H_{0z} e^{i\left(\omega t + \frac{r-R}{\delta}\right)} e^{-\left(\frac{r-R}{\delta}\right)} \quad 2.56$$

où R est le rayon de la pièce, H_{0z} le champ magnétique à la surface de la pièce ($r=R$) et δ la profondeur de pénétration donnée par :

$$\delta = \sqrt{\frac{2}{\mu \sigma \omega}} \quad 2.57$$

La première exponentielle fait apparaître le déphasage de l'onde alors que la seconde est une composante d'atténuation. La profondeur de pénétration, δ , correspond à la profondeur à laquelle le champ magnétique n'est plus que 37% ($1/e$) de la valeur en surface.

La distribution des courants induits obéit à une loi similaire à celle du champ magnétique. Elle présente donc un maximum situé à la surface et tend vers zéro exponentiellement en direction du centre de la pièce. Dans le cas de géométries cylindriques, les distributions de H et de j sont également de type exponentiel mais avec des profondeurs de pénétration légèrement différentes.

On déduit de (2.57) que les hautes fréquences conduisent à de faibles profondeurs de pénétration. Cette situation est exploitée dans les procédés de traitement de surface où l'on cherche à maintenir les propriétés initiales au coeur de la pièce.

Rendement

Le rendement théorique η du chauffage par induction peut être estimé avec la relation (Davies, 1990) :

$$\eta = \frac{1}{1 + \sqrt{\frac{\sigma}{\sigma_i \mu_r}}} \quad 2.58$$

où σ_i est la conductivité électrique de l'inducteur. On peut en déduire que le rendement est maximum lorsque la résistivité électrique et la perméabilité magnétique de la pièce sont élevées et lorsque le matériau de l'inducteur est un bon conducteur électrique. Les pièces ferromagnétiques (μ_r généralement supérieur à 1000) offrent donc des rendements intéressants. Cette relation doit cependant être utilisée avec prudence car elle a été établie au moyen de nombreuses hypothèses, dont celle d'un inducteur mono-spire possédant un diamètre égal à celui de la pièce. En outre, le rendement prédit ne peut être approché qu'au-delà d'une fréquence critique correspondant à une profondeur de pénétration égale à la moitié du rayon de la pièce. Pour des fréquences inférieures, les courants induits de part et d'autre de la pièce tendent à s'annuler, réduisant le rendement du procédé. Pour estimer le rendement global, la chaleur dissipée par radiation doit encore être quantifiée.

2.4.2 Thermique

Conduction

La thermique à l'intérieur d'un solide est décrite par l'équation de diffusion de la chaleur :

$$\text{div } \kappa \text{ grad } T + \dot{Q} = \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} \quad 2.59$$

où κ est la conductibilité thermique, ρC_p la chaleur spécifique volumique et \dot{Q} la densité de puissance produite au sein de la pièce. Dans le cas du traitement thermique par induction, le terme de source \dot{Q} provient essentiellement des courants induits qui dégagent une grande quantité de chaleur par effet Joule. Une seconde contribution, nettement plus faible, provient de la chaleur latente associée aux transformations de phase à l'état solide. Le terme de source peut donc s'écrire :

$$\dot{Q} = \frac{1}{\sigma} \|j\|^2 + \sum_{i=1}^{N_{tr}} \Delta h_i \frac{\partial f_i}{\partial t} \quad 2.60$$

où Δh_i est l'enthalpie de transformation et f_i la fraction volumique de la phase produite par la réaction i .

Radiation

Toute substance dont la température est supérieure à 0 K émet continuellement un rayonnement électromagnétique provenant de l'agitation moléculaire ou atomique. La longueur d'onde du rayonnement émis peut aller des ondes radios ($\sim 10^2$ mètres) aux ondes cosmiques ($< 10^{-14}$ m) (Siegel, 1982). La radiation thermique se situe dans le domaine des infrarouges et du visible (entre 10^{-7} et 10^{-3} m environ) et peut être détectée sous forme de chaleur ou de lumière.

L'énergie transmise par rayonnement peut être absorbée par la matière. Si l'absorption est totale, et cela quels que soient la longueur d'onde et l'angle d'incidence, on parle de corps noir. Ce corps idéal possède également la propriété d'émetteur parfait.

Le flux d'énergie émis dans le vide par la radiation de la surface plane d'un corps noir est donné par la relation de Stefan-Boltzmann :

$$q = -\sigma_B T^4 \quad 2.61$$

où σ_B est la constante de Stefan-Boltzmann ($\sigma_B = 5.6696 \cdot 10^{-8} \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-4}$) et T la température en K. Le signe négatif provient de la convention des signes pour les flux sortants.

Contrairement au corps noir, les surfaces de matériaux réels réfléchissent une partie du rayonnement incident. Il en découle qu'elles n'absorbent et n'émettent que partiellement l'énergie de radiation. Leurs propriétés d'émission, d'absorption, et de réflexion sont définies par rapport à celles du corps noir qui sert de référence. L'émissivité relative est donnée par le rapport entre le flux d'énergie émis par la surface et le flux émis par un corps noir à la même température. De même, on définit une absorptivité et une réflectivité relatives par rapport à la capacité d'absorption du corps noir. L'émissivité, l'absorptivité et la réflectivité relatives d'une surface varient avec la longueur d'onde, l'angle d'incidence et la température.

Dans le calcul numérique des échanges thermiques par radiation, on fait en général l'hypothèse de corps *gris-diffusants*, qui consiste à considérer que les propriétés radiatives ne dépendent ni de la longueur d'onde, ni de l'angle d'incidence. Ceci permet d'établir une relation reliant l'émissivité relative ε , l'absorptivité relative α et la réflectivité ρ :

$$\varepsilon = \alpha = 1 - \rho \quad 2.62$$

La loi de Stefan-Boltzmann pour les corps gris-diffusants s'exprime alors de la façon suivante :

$$q = -\varepsilon \sigma_B T^4 \quad 2.63$$

Même dans le cas du corps noir, les échanges radiatifs entre deux surfaces ne dépendent pas seulement de leurs températures, mais également de leurs positions et orientations relatives. Considérons le cas de deux surfaces de

températures uniformes T_1 et T_2 placées dans le vide et exposées à leurs rayonnements mutuels (v. Fig. 2.14). Seule une fraction du rayonnement émis par la surface 1 pourra être capté par la surface 2 et réciproquement. Pour le cas de corps noirs, le flux Q_{1-2} émis par la surface 1 et reçu par la surface 2 est donné par la relation :

$$Q_{1-2} = F_{1-2} A_1 \sigma_B T_1^4 \quad 2.64$$

où A_1 est l'aire de la surface 1 et F_{1-2} le *facteur de configuration* ou *facteur de vue* caractérisant les positions et orientations relatives des deux surfaces. Le facteur de vue est défini par la relation :

$$F_{1-2} = \frac{1}{A_1} \int_{A_1} \int_{A_2} \frac{\cos \theta_1 \cos \theta_2}{\pi R^2} dA_2 dA_1 \quad 2.65$$

où θ_1 , θ_2 , dA_1 et dA_2 sont les angles et les surfaces infinitésimales définies à la figure 2.14.

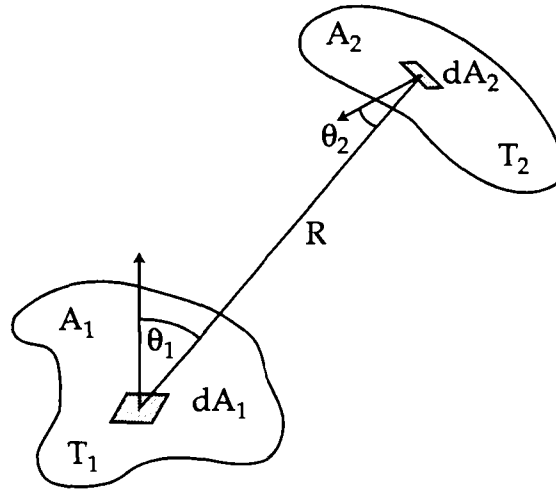


Fig. 2.14 : Radiation entre deux surfaces infinitésimales dA_1 et dA_2 contenues dans les facettes planes et isothermes, A_1 et A_2 .

Réciproquement, le flux Q_{2-1} émis par la surface 2 et reçu par la surface 1 est donné par :

$$Q_{2-1} = F_{2-1} A_2 \sigma_B T_2^4 \quad 2.66$$

La relation de réciprocité des facteurs de vues :

$$A_1 F_{1-2} = A_2 F_{2-1} \quad 2.67$$

permet finalement de formuler l'échange net entre les deux surfaces :

$$Q_{exc} = F_{2-1} A_2 \sigma_B (T_1^4 - T_2^4) = F_{1-2} A_1 \sigma_B (T_1^4 - T_2^4) . \quad 2.68$$

Cette relation permet de calculer le transfert d'énergie par rayonnement à l'intérieur d'une enceinte composée de facettes isothermes ayant les propriétés du corps noir. Le flux reçu par une facette i de l'enceinte dépend de sa température T_i et de celle des autres facettes T_j :

$$q_i^{abs} = \sum_{j=1}^{N_f} \sigma_B F_{i-j} (T_j^4 - T_i^4) \quad 2.69$$

où N_f est le nombre de facettes dans l'enceinte.

Cette formulation peut être utilisée en modélisation numérique pour estimer le flux extrait par radiation à la surface d'une pièce. La méthode nécessite une discrétisation des surfaces en facettes (on peut par exemple utiliser les faces externes d'un maillage de différences finies ou d'éléments finis) et un calcul des facteurs de vue. Si la pièce n'est pas placée dans une enceinte à proprement parler, mais rayonne en partie vers un environnement mal défini, une facette spéciale représentant l'environnement peut être créée. Le facteur de vue F_{i-env} reliant la facette i et l'environnement est alors déduit des autres facteurs de vue :

$$F_{i-env} = 1 - \sum_{j=1}^{N_f} F_{i-j} \quad 2.70$$

Cette méthode permet de traiter le cas de pièces de forme quelconque pouvant comporter des parties concaves. Toutefois, elle reste limitée au cas du corps noir. Le traitement de la radiation pour les corps réfléchissant devient plus complexe car, par le jeu des réflexions multiples, le rayonnement émis en un point de la pièce peut être capté par des parties qui ne sont pas directement exposées. La méthode de "radiation nette" (Siegel, 1982) permet de résoudre numériquement ce problème pour le cas des corps gris-diffusants. Elle sera décrite au chapitre 3.

Extraction de chaleur en surface par convection

Le flux extrait par convection à la surface d'une pièce est généralement exprimé par une relation mixte de type Newton :

$$q = \kappa \frac{\partial T}{\partial n} = -h (T_s - T_\infty) \quad 2.71$$

où q est le flux extrait, T_s la température de la surface, T_∞ la température du fluide refroidissant et $\partial T / \partial n$ la dérivée normale sortante. Le coefficient de transfert h caractérise l'échange thermique entre la surface et le fluide. Il dépend de très nombreux facteurs tels que la géométrie de la surface, le régime d'écoulement et les propriétés physiques du fluide (Incropera, 1996). Pour un acier refroidi à l'air calme à température ambiante (convection naturelle), h est de l'ordre de $100 \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$ à 1000°C et diminue progressivement au cours du refroidissement pour atteindre environ $25 \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$ vers 200°C (Totten, 1993).

Trempe

Les pertes thermiques d'une surface chaude en contact avec de l'eau sont rendues complexes par le phénomène de vaporisation. Le flux extrait d'un fil chauffé placé dans un bain d'eau à la température d'ébullition est illustré à la figure 2.15 en fonction de la différence de température, ΔT_s , entre le fil et le bain (Rappaz-M, 1998). En supposant que l'on puisse contrôler la température du fil, on obtient le flux indiqué en trait continu. Pour des faibles valeurs de ΔT_s , l'extraction de chaleur a lieu par convection naturelle du liquide sans formation de vapeur. (Une surchauffe est en effet nécessaire pour former des bulles). Au-

delà du point de début d'ébullition (point A), le flux augmente considérablement en raison de l'importante enthalpie de vaporisation. La vapeur s'échappe d'abord sous la forme de bulles isolées, puis en formant des colonnes lorsque la température augmente. Au-delà du point C, le film de vapeur formé à la surface devient de plus en plus continu et le flux extrait diminue progressivement. A partir du point D (point de Leidenfrost), le flux augmente de nouveau lentement par conduction et radiation thermique à travers le film de vapeur.

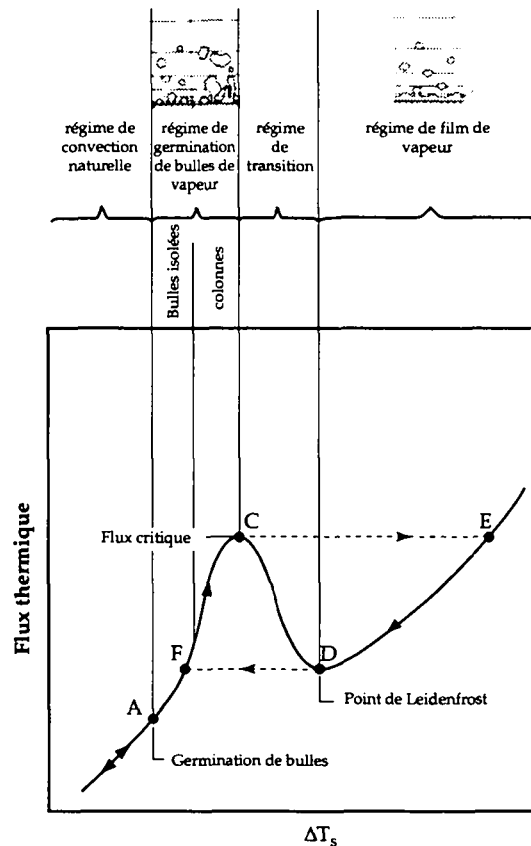


Fig. 2.15 : Flux de chaleur extrait d'un fil chauffé placé dans un bain d'eau à température d'ébullition en fonction de la différence de température entre le fil et le bain. Adapté de (M. Rappaz, 1998).

Dans l'expérience originale de Nukiyama, le flux était contrôlé au moyen de la puissance électrique dissipée dans le fil plutôt que la température. Dans ce cas, la courbe obtenue présente des discontinuités : la température de fonctionnement passe brusquement des points C à E au chauffage et des points D à F au refroidissement. Le chemin effectué au cours d'un cycle thermique est représenté en traits tillés à la figure 2.15.

Dans le procédé de trempe au défilé, on cherche à éviter la formation d'un film de vapeur isolant à la surface de la pièce. Pour cette raison, les douches utilisées pour tremper sont généralement conçues pour que les gouttes projetées aient une vitesse suffisante pour repousser la vapeur produite. Le transfert de chaleur a donc lieu par un régime de convection forcée avec écoulement turbulent, fondamentalement différent du comportement décrit à la figure 2.15.

Des additifs polymériques, généralement de la famille des PVA (Poly(vinyl alcohol)) ou des PAO (Poly(alcaline oxide)), sont souvent ajoutés à l'eau du circuit de refroidissement afin d'adoucir la trempe et d'éviter la fissuration. Ils

agissent par un effet d'accroissement de la viscosité qui provoque une diminution du coefficient de transfert à la surface de la pièce. La sévérité de la trempe peut être contrôlée en ajustant leur concentration. La figure 2.16 illustre l'influence de la concentration d'un PAO sur la courbe de refroidissement d'un échantillon trempé.

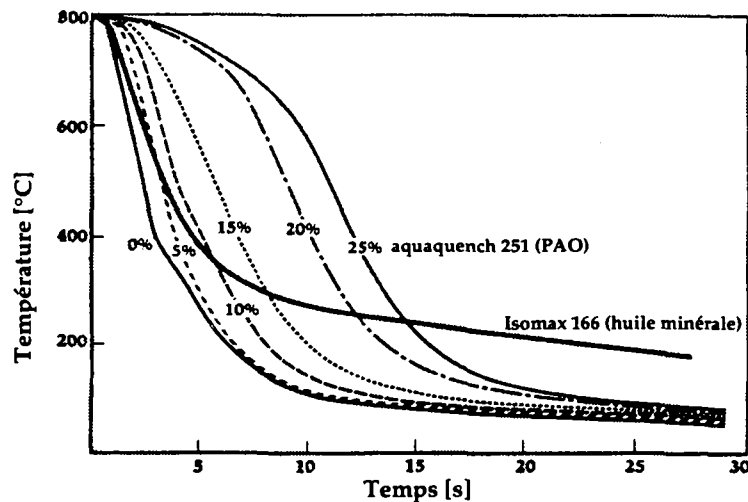


Fig. 2.16 : Courbes de refroidissement selon la concentration de PAO dans l'eau. Comparaison avec une huile minérale. D'après (Moerdijk, 1990).

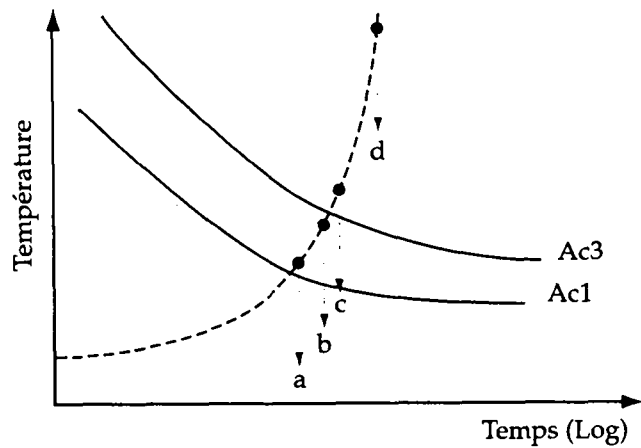
2.4.3 Transformations de phase

Au cours du chauffage par induction, la microstructure se transforme en austénite, de manière complète ou partielle selon la température atteinte localement et le temps de maintien. Pour le cas d'un acier hypoeutectoïde, l'austénitisation est composée des cinq mécanismes successifs déjà mentionnés. Dans l'ordre d'apparition, on observe :

- la dissolution de la perlite
- la transformation de la ferrite en austénite
- la mise en solution des carbures
- l'homogénéisation de l'austénite
- la croissance du grain austénitique

Normalement, seules les couches superficielles atteignent le stade de l'austénite "homogène". La croissance de grain étant défavorable aux propriétés finales, on cherche à l'éviter par un séjour très bref à haute température. Au coeur de la pièce, on maintient généralement l'état ferrito-perlitique, afin de préserver une certaine ductilité. A des profondeurs intermédiaires, l'austénitisation reste partielle et conduit en général à des microstructures mixtes.

Les différentes transformations de phase pouvant intervenir au cours du refroidissement ont été décrites au chapitre 2.1. Comme le procédé fait intervenir une trempe plutôt sévère, les vitesses de refroidissement sont généralement bien au-delà de la valeur critique pour la formation de martensite. Ainsi, pour des pièces de faible diamètre la microstructure finale dépend-elle essentiellement de



	DOMAINE TEMP. CHAUFFAGE	PHENOMENES TRANSFORMAT	STRUCTURE INITIALE	STRUCTURE APRES CHAUF.	STRUCTURE APRES REFOI.
a	Temp > Ac1	Austénitisation juste supérieure à Ac1. Formation de martensite hétérogène			
b	Temp < Ac3	Austénitisation inférieure à Ac3. Formation de marten. claire et sombre. Présence de ferrite			
c	Temp > Ac3	Austénitisation suffisante pour transformation complète mais diffusion limitée du carbone			
d	Temp >> Ac3	Austénitisation et diffusion du carbone suffisante pour obtenir une mart. homogène			

Fig. 2.17 : Microstructure obtenue après trempe en fonction de l'avancement de l'austénitisation. Tableau tiré de (Farias, 1992).

l'état atteint à la fin du chauffage. La figure 2.17 illustre les différentes microstructures obtenues en fonction de l'avancement de l'austénitisation. A noter toutefois que ce schéma n'est plus valable si la pièce devient épaisse ou la douche suffisamment adoucie pour que certaines régions austénitisées soient refroidies à des vitesses subcritiques.

Il faut signaler encore une transformation de phase importante pour le chauffage par induction : la transition ferro-paramagnétique du fer. En effet, au-dessus de la

température de Curie (770°C environ), la ferrite passe de l'état ferromagnétique à l'état paramagnétique. Au cours de la transition, la perméabilité magnétique relative, μ_r , chute jusqu'à une valeur proche de l'unité, caractéristique de l'état paramagnétique.

Cette transition s'accompagne d'une baisse de rendement de l'induction, dont la valeur peut être estimée par la relation 2.58. Cet effet explique le changement de pente généralement observé dans les courbes de chauffage aux alentours de la température de Curie.

Il faut noter que la température de Curie ne dépend pas de la vitesse de chauffage. Comme l'indique la figure 2.1, sa valeur est également indépendante de la teneur en carbone, sauf pour des compositions supérieures à 0.45%C où la transformation $\alpha \rightarrow \gamma$ intervient à une température plus basse que la transition magnétique de la ferrite.

3. APPROCHE MACROSCOPIQUE - ÉTUDE DU PROCÉDÉ DE TRAITEMENT THERMIQUE PAR INDUCTION ET TREMPÉ AU DÉFILÉ

L'objectif principal du travail présenté dans cette partie était de développer un logiciel permettant de modéliser le procédé de traitement thermique par induction et trempe au défilé. Celui-ci devait pouvoir fournir l'évolution de la température, du champ magnétique et des fractions de phases en tout point de la pièce ainsi qu'une carte de la dureté à la fin du traitement.

La modélisation du procédé est un problème complexe. La difficulté provient essentiellement du fait que les phénomènes physiques impliqués sont nombreux et partiellement couplés. On peut évoquer tout d'abord, les phénomènes électromagnétiques, qui nécessitent la résolution des équations de Maxwell et de la loi d'Ohm, et cela pour une géométrie qui varie dans le temps (l'inducteur se déplace en effet le long de la pièce). Le terme de source ainsi calculé doit pouvoir être pris en compte dans l'équation de diffusion de la chaleur en considérant également la chaleur latente dégagée par les transformations de phase. Par ailleurs, la cinétique des transformations de phase dépend directement de l'histoire thermique locale et, dans une moindre mesure, des contraintes générées par la dilatation thermique et les transformations elles-mêmes. La quantité de chaleur extraite à la surface de la pièce par radiation et par l'écoulement turbulent de la douche doit également pouvoir être quantifiée et introduite dans le bilan thermique. Finalement, les températures et l'évolution des fractions volumiques des différentes phases vont affecter les propriétés thermiques et électromagnétiques du matériau, rendant de ce fait le problème étroitement couplé.

Le logiciel développé pour résoudre ce problème est présenté à la section 3.1. Il est organisé sous forme de modules (induction, transformations de phase et radiation) qui sont décrits dans des paragraphes séparés. Le couplage des différents modules avec le logiciel 3-MOS ainsi que les méthodes inverses utilisées pour déterminer les conditions aux limites font l'objet de paragraphes supplémentaires.

Il est bien connu que l'exactitude d'une simulation, ne dépend pas seulement du choix des méthodes numériques, mais également de la connaissance précise des données du calcul telles que les propriétés physiques et les conditions aux limites. Comme ces données étaient parfois incomplètes pour les cas étudiés, la mise en oeuvre du modèle a nécessité certains travaux complémentaires. Il s'agissait notamment de la détermination du coefficient de transfert caractérisant la chaleur extraite par la douche à la surface de la pièce. Les techniques expérimentales mises en oeuvre et les résultats obtenus dans ce but sont présentés à la section 3.2. Des mesures de perméabilité magnétique se sont par ailleurs avérées nécessaires pour appliquer le modèle à un cas réel proposé par les partenaires industriels. Ce travail est présenté dans la section 3.3. Cette dernière contient en outre des mesures dilatométriques de la cinétique des transformations de phase réalisées dans le but de compléter les données du modèle. Ces mesures ont servi également à vérifier la validité du principe d'additivité utilisé dans la simulation pour calculer les cinétiques des transformations de phase en conditions anisothermes.

La confrontation de la simulation avec des résultats expérimentaux constitue le dernier sujet de cette partie. Les comparaisons ont été effectuées en trois étapes. La première est l'application du modèle à un cas de chauffage par induction d'une pièce simple refroidie à l'air libre. L'absence de trempe a permis de tester le fonctionnement des modules électromagnétiques et thermiques avec des conditions aux limites facile à décrire. La seconde étape est constituée d'un cas de trempe au défilé d'une pièce mince de forme cylindrique. Finalement, un cas complet faisant intervenir toutes les difficultés liées à la modélisation du procédé sera présenté. Ce cas peut être considéré comme un test pour l'application du modèle à des problèmes réels.

3.1 Description du logiciel de simulation

Présentation générale

Le logiciel développé intègre dans un même programme des calculs d'induction de diffusion thermique, de radiation et de transformations de phase. Il permet de décrire le traitement thermique par induction de pièces possédant une géométrie 3D axisymétrique. La résolution du problème électromagnétique est basée sur une formulation mixte en éléments finis (FE) et éléments-frontière (BE). La pièce et l'inducteur sont maillés en éléments finis alors que les éléments-frontière sont utilisés pour résoudre les équations de Maxwell dans l'air. Cette technique présente l'avantage de permettre le déplacement de l'inducteur par rapport à la pièce sans nécessiter une procédure de remaillage. Le même maillage FE est utilisé pour résoudre l'équation de la chaleur contenant le terme de source provenant de l'effet Joule. Une méthode micro-enthalpique permet de prendre en compte la chaleur latente libérée par les transformations de phase. La méthode de "radiation nette" résolvant les échanges thermiques par radiation à la surface de corps gris-diffusants est implémentée dans le logiciel en tant que condition aux limites du problème thermique. Les facteurs de vue sont calculés par une technique de tir prenant en compte la géométrie tridimensionnelle et les effets d'ombrage.

La cinétique des transformations de phase est déterminée à partir de données isothermes grâce à un principe d'additivité. Une formulation générale a été développée afin de rendre le logiciel utilisable pour d'autres aciers ou catégories de matériaux.

Certains modules du logiciel ont été développés antérieurement. Il s'agit notamment du module électromagnétique développé par Dr. M. Swierkosz et Prof. J. Rappaz au Département de Mathématiques (DMA) de l'EPFL et du logiciel 3-MOS développé ces dix dernières années au LMPH. La partie réalisée au cours de ce travail est constituée du développement du module de transformations de phase avec principe d'additivité, de l'implantation dans 3-MOS de la méthode de radiation nette pour le calcul du rayonnement et du couplage de l'ensemble avec le module électromagnétique.

Par souci de complétude, une description est donnée pour chaque module du logiciel (électromagnétisme, transformations de phase et radiation). Elle sera suivie d'une présentation du couplage avec le logiciel 3-MOS. Un dernier paragraphe traite des méthodes inverses qui ont été utilisées pour déduire le coefficient de transfert de la douche à partir de mesures de température au sein de la pièce.

3.1.1 Module électromagnétique

Ce module a été développé par M. Swierkosz et J. Rappaz dans le cadre du même projet. Une description résumée de la méthode est présentée ici. Cependant, pour obtenir plus de détails, on se référera à (Rappaz-J, 1995).

Le module a pour objet de résoudre les équations de Maxwell (éqs 2.43-2.45) dans le cas d'une géométrie 3D axisymétrique. Le modèle repose sur les hypothèses que les courants displacifs peuvent être négligés et que, dans le repère usuel (\mathbf{e}_r , \mathbf{e}_θ , \mathbf{e}_z) du système de coordonnées cylindriques, les champs \mathbf{B} , \mathbf{H} et \mathbf{E} sont invariants par rapport à θ et de la forme :

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}(r,z) e^{i\omega t} \quad 3.1$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}(r,z) e^{i\omega t} \quad 3.2$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{B}(r,z) e^{i\omega t} \quad 3.3$$

où ω est la fréquence angulaire.

De la symétrie de révolution, on peut déduire que :

$$\mathbf{H} = H_r(r,z) \mathbf{e}_r + H_z(r,z) \mathbf{e}_z \quad 3.4$$

On peut montrer qu'il existe un potentiel scalaire $\phi(r,z)$ dont le champ d'induction \mathbf{B} est le rotationnel :

$$\mathbf{B} = \text{rot} (\phi \mathbf{e}_\theta) \quad 3.5$$

En combinant

$$\text{rot } \mathbf{H} = \mathbf{j} \quad \text{et} \quad 3.6$$

$$\mathbf{H} = \nu \mathbf{B}, \quad 3.7$$

où $\nu = 1/\mu$ est la susceptibilité magnétique, on peut écrire :

$$\text{rot } \nu \text{rot} (\phi \mathbf{e}_\theta) = \mathbf{j} \quad 3.8$$

Le développement de $\text{rot} (\phi \mathbf{e}_\theta)$ donne :

$$\text{rot} (\phi \mathbf{e}_\theta) = \frac{1}{r} \frac{\partial(r\phi)}{\partial r} \mathbf{e}_z - \frac{\partial\phi}{\partial z} \mathbf{e}_r \quad 3.9$$

En remplaçant (3.9) dans (3.8) et en développant, on obtient :

$$-\left[\frac{\partial}{\partial r} \left(\nu \frac{\partial(r\phi)}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu \frac{\partial\phi}{\partial z} \right) \right] = j_\theta \quad 3.10$$

Pour le cas d'un inducteur torique soumis à un voltage alternatif de forme sinusoïdale :

$$U = U_0 e^{i\omega t}, \quad 3.11$$

on peut montrer que la densité de courant j_θ dans les conducteurs (pièce et inducteur) est donnée par :

$$j_{\theta} = \sigma \left(-i \omega \phi + \frac{U}{2\pi r} \right) \quad 3.12$$

L'équation (3.10) devient donc :

$$-\left[\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v}{r} \frac{\partial(r\phi)}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(v \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) \right] = \sigma \left(-i \omega \phi + \frac{U}{2\pi r} \right) \quad 3.13$$

Dans l'air ambiant, le courant est nul et v constant. L'équation 3.10 se réduit à :

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial(r\phi)}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = 0 \quad 3.14$$

En passant en coordonnées cartésiennes (x, y, z) , (3.14) peut être écrit sous la forme équivalente :

$$\Delta[\phi \cdot \sin \theta] = 0 \quad 3.15$$

Le modèle consiste alors à résoudre l'équation 3.15 dans le vide et l'équation 3.13 à l'intérieur des conducteurs en considérant que le potentiel est continu à l'interface et nul à l'infini.

La résolution est effectuée par une méthode mixte éléments-frontière/éléments finis. La partie en éléments finis permet d'obtenir le potentiel magnétique dans les conducteurs, alors que la partie en éléments-frontière résout le problème dans l'air. La connaissance du potentiel magnétique permet ensuite de déduire le champ magnétique et les courants induits à l'aide des équations 3.5, 3.7 et 3.12.

3.1.2 Module métallurgique

Le module de transformations de phase à l'état solide a pour but de calculer l'évolution des fractions de phase et la dureté finale aux noeuds du maillage en fonction de la thermique locale. Le modèle est basé sur des données isothermes : diagrammes TTT pour le refroidissement et diagrammes TTA pour le chauffage. A partir de ces données, le programme est capable de calculer la cinétique des transformations de phase pour une thermique quelconque.

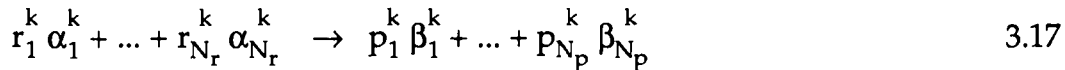
Principe de calcul

Le modèle est basé sur le principe d'additivité avec temps fictif présenté au chapitre 2 (éqs 2.17 et 2.18). Des modifications ont toutefois été apportées afin de généraliser le modèle à la description de systèmes faisant intervenir plusieurs transformations de phase. En effet, les équations 2.17 et 2.18 décrivent le fonctionnement du modèle pour le cas d'une transformation de phase unique. En réalité, on observe souvent la présence de plusieurs réactions dans le domaine de température parcouru. Ceci peut conduire à la situation où plus de deux phases coexistent en un point de la pièce (Il s'agit bien sûr d'un noeud de maillage représentant une région dont la taille est nettement supérieure à celle de la microstructure et dans laquelle la notion de mélange de phases peut avoir un sens). En outre, les diagrammes TTT ou TTA indiquent parfois des réactions faisant intervenir plus de deux phases. On peut citer l'exemple de diagrammes TTA d'aciers hypoeutectoïdes qui ne fournissent que les données de la réaction globale :



Par ailleurs, les équations 2.17 et 2.18 sont formulées pour des transformations de phase dont le maximum de la fraction transformée est 1. Cependant dans les régions biphasées du diagramme d'équilibre, la transformation demeure incomplète même pour des maintiens prolongés. Ceci doit pouvoir être pris en compte dans la formulation.

Le modèle est construit sur une formulation unique permettant de traiter l'ensemble des situations précitées. On considère que le système est susceptible de subir un ensemble de transformations de phase qui peuvent être formulées de la manière suivante :



où r_i^k et p_j^k sont des coefficients de réaction pour la transformation k . Les symboles α_i^k et β_j^k désignent respectivement les phases réactives et produites de la transformation. Pour la réaction 3.16 on pourra écrire par exemple :



Le choix des coefficients r et p pour cette réaction sera justifié plus loin.

Le calcul de la cinétique nécessite l'introduction d'une variable z représentant l'avancement de la réaction. Au palier m de la courbe de refroidissement (pas de temps m du module métallurgique), l'avancement z_m est défini de la façon suivante (en omettant les indices k par souci de clarté) :

$$z_m = \frac{P_m}{(R_m + P_m) f_m^{\max}} \quad \text{avec} \quad 3.19$$

$$R_m = \sum_{\text{réactifs } i}^{N_r} f_{m,i} \quad \text{et} \quad P_m = \sum_{\text{produits } j}^{N_p} f_{m,j} \quad 3.20$$

Le symbole $f_{m,i}$ désigne la fraction volumique de la phase i au palier m . R_m et P_m représentent respectivement les sommes des fractions volumiques des réactifs et des produits. L'avancement maximal, ou plus précisément le rapport $P_m/(R_m + P_m)$ maximal que peut atteindre la transformation est désigné par f_m^{\max} . Ce paramètre est inférieur à 1 uniquement dans les zones biphasées du diagramme d'équilibre. Il peut être calculé par la règle des leviers. L'avancement z varie quant à lui entre 0 (aucun produit) et 1 (f_m^{\max} atteint).

Les équations 2.17 à 2.18 présentées au chapitre 2 peuvent maintenant être appliquées en utilisant la variable d'avancement z à la place de la fraction volumique f . Le temps fictif au palier $m+1$ est ainsi donné par :

$$t_{m+1}^* = \left[\frac{1}{b(T_{m+1})} \text{Ln} \left(\frac{1}{1 - z_m} \right) \right]^{1/n(T_{m+1})} \quad 3.21$$

où $n(T_{m+1})$ et $b(T_{m+1})$ sont les coefficients de la relation d'Avrami au palier $m+1$. La fraction de phase, z_{m+1} , obtenue à la fin du palier $m+1$ est alors déterminée en ajoutant le pas de temps (durée du palier) au temps fictif t_i^* :

$$z_{m+1} = 1 - \exp \left[-b(T_{m+1}) \left(t_{m+1}^* + \Delta t \right)^{n(T_{m+1})} \right] \quad 3.22$$

Les nouvelles valeurs R_{m+1} et P_{m+1} peuvent alors être déduites de z_{m+1} :

$$P_{m+1} = z_{m+1} \cdot (R_m + P_m) \cdot f_m^{\max} \quad 3.23$$

$$R_{m+1} = R_m + P_m - P_{m+1} \quad 3.24$$

Pour déterminer la nouvelle fraction volumique $f_{m+1,i}$ de chaque phase i , le programme prévoit deux méthodes :

(1)

$$\text{réactifs :} \quad f_{m+1,i} = f_{m,i} - \frac{r_i}{\sum_{\text{réactifs } j} r_j} (P_{m+1} - P_m) \quad 3.25$$

$$\text{produits :} \quad f_{m+1,i} = f_{m,i} + \frac{P_i}{\sum_{\text{produits } j} P_j} (P_{m+1} - P_m) \quad 3.26$$

(2)

$$\text{réactifs :} \quad f_{m+1,i} = f_{m,i} - \frac{\omega_i}{\sum_{\text{réactifs } k} \omega_k} (P_{m+1} - P_m) \quad \text{avec} \quad \omega_i = \frac{f_{m,i}}{\sum_{\text{réactifs } j} f_{m,j}} \frac{r_i}{\sum_{\text{réactifs } j} r_j} \quad 3.27$$

$$\text{produits :} \quad f_{m+1,i} = f_{m,i} + \frac{\omega_i}{\sum_{\text{produits } k} \omega_k} (P_{m+1} - P_m) \quad \text{avec} \quad \omega_i = \frac{f_{m,i}}{\sum_{\text{produits } j} f_{m,j}} \frac{P_i}{\sum_{\text{produits } j} P_j} \quad 3.28$$

La formulation (1) respecte les proportions données par les coefficients de la réaction, à l'image d'une réaction chimique stoechiométrique. La formulation (2) fait quant à elle réagir des quantités proportionnelles à la fraction volumique relative et au coefficient de réaction. Elle permet par exemple de forcer un des réactifs à se transformer avant l'autre par l'attribution de coefficients de réaction différents. Cette possibilité est montrée dans l'exemple 3.18 dont le choix des coefficients indique une cinétique de dissolution plus rapide pour la perlite lors de l'austénitisation d'une structure ferrito-perlitique.

Détermination des coefficients b et n

Les coefficients $n(T)$ et $b(T)$ sont déduits du diagramme TTT à partir de deux couples de valeurs $(t_1(T), f_1(T))$ et $(t_2(T), f_2(T))$, qui sont les temps et fractions volumiques correspondant respectivement au début et à la fin de la transformation à la température T . Le système

$$\begin{cases} f_1(T) = f^{\max}(T) [1 - \exp(-b(T) t_1^{n(T)})] \\ f_2(T) = f^{\max}(T) [1 - \exp(-b(T) t_2^{n(T)})] \end{cases} \quad 3.29$$

permet de déterminer $n(T)$ et $b(T)$.

Cependant, la solution obtenue aboutit parfois à des valeurs de n beaucoup plus élevées que l'intervalle typique [1,4] prédit par les modèles analytiques (v. éqs 2.4 à 2.7). Cette observation est à l'origine de la possibilité d'imposer l'utilisation d'un facteur n constant. Dans ce cas, le paramètre b est déterminé par une

méthode de moindres carrés consistant à minimiser l'écart entre la sigmoïde et les couples (t_1, f_1) et (t_2, f_2) .

Critère de début de transformation

Pour chaque transformation, un critère de "germination" doit être donné afin d'indiquer à partir de quel moment la règle d'additivité peut être appliquée.

Le critère de base est la température. Un intervalle $[T_{\min}, T_{\max}]$ est donné pour chaque transformation. La réaction a lieu seulement si :

$$T_{\min} \leq T \leq T_{\max} \quad 3.30$$

Ce critère est une condition nécessaire. Il peut être complété par un second critère basé sur l'avancement d'une autre transformation. Dans ce cas, la transformation démarre lorsque

$$T_{\min} \leq T \leq T_{\max} \quad \text{et} \quad z^l > z_{\text{start}} \quad 3.31$$

où z^l est l'avancement de la transformation l et z_{start} un critère fixé. Cette possibilité peut être utilisée par exemple pour exiger que la perlite formée aux températures proches de A_1 n'apparaisse qu'au-delà d'un certain taux de ferrite proeutectoïde.

Le début de la transformation peut également être calculé d'après la méthode de Scheil (éq. 2.11). La transformation démarre alors si :

$$T_{\min} \leq T \leq T_{\max} \quad \text{et} \quad S = \sum_{i=1}^m \frac{\Delta t_i}{\tau_s(T_i)} = 1 \quad 3.32$$

où m est le nombre de paliers isothermes effectués dans le domaine $[T_{\min}, T_{\max}]$ et S la somme des fractions d'incubation. Le temps correspondant au début de la transformation isotherme est désigné par $\tau_s(T)$.

Lorsque plusieurs transformations sont en compétition, comme c'est le cas pour la formation de la perlite et de la bainite dans les aciers eutectoïdes, la fraction d'incubation atteinte à la fin du domaine de la première transformation peut être partiellement reportée sur la deuxième selon un facteur d'hérédité h . Cette idée, présentée pour la première fois par Fernandes (1985), permet de prendre en compte le temps passé en surfusion depuis le franchissement de la ligne eutectoïde, et non pas seulement depuis la température supérieure pour la formation de la bainite.

Dans l'exemple précité, la fraction d'incubation associée à la transformation bainitique, S_{bainite} , est donc calculée à partir de la fraction d'incubation atteinte dans le domaine perlitique :

$$S_{\text{bainite}} = h \sum_{i=1}^{n_{\text{perlite}}} \frac{\Delta t_i}{\tau_{\text{perlite}}(T_i)} + \sum_{i=1}^{n_{\text{bainite}}} \frac{\Delta t_i}{\tau_{\text{bainite}}(T_i)} \quad 3.33$$

où n_{perlite} et n_{bainite} sont respectivement le nombre de paliers passés dans les domaines perlitiques et bainitiques. En résumé, le paramètre h exprime dans quelle mesure le temps écoulé dans le domaine perlitique peut être comptabilisé pour la germination de la bainite.

Calcul des duretés

Le programme calcule une carte de la dureté à la fin du traitement (dureté à température ambiante). Le calcul est basé sur la loi de mélange proposée par Denis (1992) :

$$H_V = \sum_i \sum_k \Delta f_{k,i} H_{V_k}(T_i) \quad 3.34$$

où $\Delta f_{k,i}$ et $H_{V_k}(T_i)$ sont respectivement l'incrément de fraction volumique et la microdureté de la phase k formée à la température T_i du palier i .

Les microduretés H_{V_k} sont tabulées en fonction de la température de formation pour chaque phase. Ces valeurs sont généralement indiquées sur les diagrammes TTT.

3.1.3 Module de radiation

Les phénomènes de radiation jouent un rôle important dans les procédés qui se déroulent dans le vide ou qui font intervenir des températures élevées. Leur considération dans un logiciel de simulation peut donc s'avérer essentielle pour certains procédés. Elle introduit toutefois un certain nombre de difficultés. Il s'agit notamment du calcul des facteurs de vue, nécessaire pour traiter la radiation à la surface de pièces comportant des parties concaves. D'autre part, la prise en compte des phénomènes de réflexion - existant sur toutes les surfaces ne possédant pas les propriétés du corps noir - nécessite d'effectuer un bilan d'énergie à l'échelle du procédé.

La technique utilisée pour traiter la radiation est basée sur un découpage de la surface de la pièce en facettes dont la température peut être considérée comme uniforme. Les facettes utilisées dans la modélisation 2D sont les arêtes externes du maillage en éléments finis. L'estimation des facteurs de vue est basée sur une méthode de tir initialement développée par Gilgien (1990) et reprise par Imwinkelried (1993). Le traitement de la réflexion du rayonnement est effectué selon la méthode de "radiation nette" pour des corps gris-diffusants (Siegel, 1982). Ces deux méthodes sont présentées brièvement ici.

Calcul des facteurs de vue

Le calcul des facteurs de vue a été implémenté pour le cas de géométries 3D-axisymétriques. Contrairement aux calculs thermiques et électromagnétiques, la symétrie axiale ne permet pas de ramener le problème à la résolution dans une coupe. En effet, le rayonnement émis en un point de la surface ne reste pas confiné dans le plan de coupe (r,z) et ne présente donc pas la même symétrie que la pièce. La figure 3.1 montre un exemple d'une pièce comportant des surfaces qui ne sont pas exposées mutuellement dans une coupe alors qu'elles le sont en réalité. Elle illustre également la complexité des phénomènes d'ombrage.

Le problème peut être résolu en utilisant une méthode de tir (Gilgien, 1990). La méthode consiste à subdiviser l'hémisphère d'émission d'une facette en petites parcelles caractérisées chacune par une direction de tir et présentant des facteurs de vue à peu près équivalents (Fig. 3.2 (a)). L'ensemble des facteurs de vue F_{ij} d'une facette i est alors obtenu au moyen de deux boucles imbriquées balayant les directions de tirs (indexées par k) et les autres facettes (indexées par j). Pour chaque couple (k,j) , un calcul d'intersection est effectué entre la ligne de tir k et la

portion de cône généré par la révolution du segment j (Fig. 3.2 (b)). (A noter que ce cône dégénère en une portion de cylindre si l'arête est parallèle à l'axe de symétrie ou en une portion de disque si elle y est perpendiculaire). S'il n'existe pas de point d'intersection plus proche le long de la direction de tir, le facteur de vue associé à la direction k est attribué à la facette j en l'additionnant au facteur F_{i-j} . (Tous les facteurs F_{i-j} sont initialisés à zéro au début du calcul). Les directions de tir qui ne présentent aucune intersection sont attribuées à une facette spéciale caractérisant l'environnement.

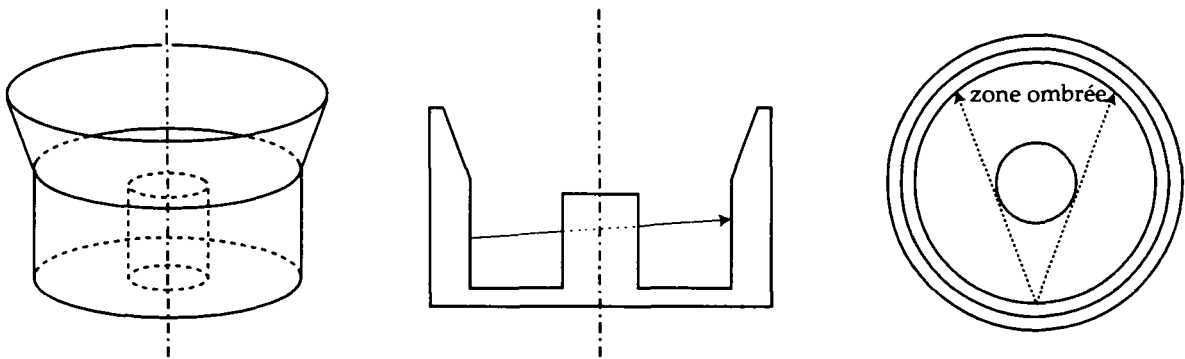


Fig. 3.1 : Exemple d'un phénomène d'ombrage dans une pièce axisymétrique.

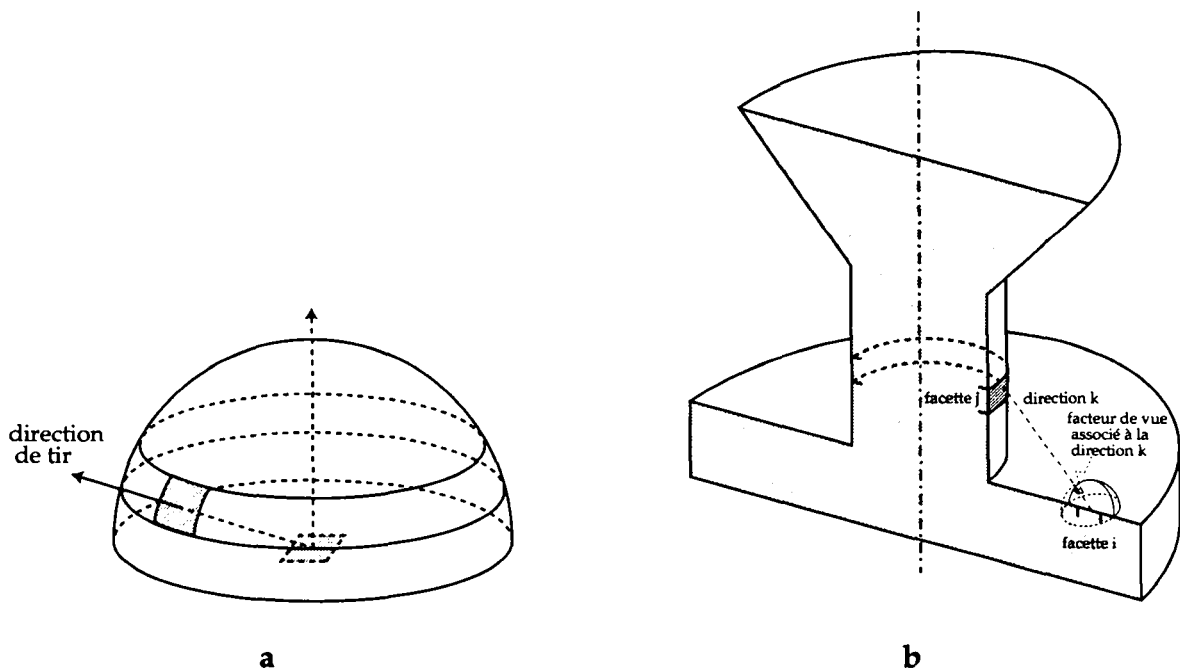


Fig. 3.2 : Découpage de l'hémisphère d'émission (a) et principe de la méthode de tir utilisée pour le calcul des facteurs de vue (b). Adapté de (Imwinkelried, 1993).

Méthode de radiation nette

La méthode de radiation nette (Siegel, 1982) a été implémentée afin de traiter les phénomènes de réflexion à la surface de corps gris-diffusants. Le principe consiste à écrire un bilan d'énergie pour chaque facette présente dans l'enceinte¹. Chaque facette i possède des propriétés d'émissivité relative, ϵ_i , réflectivité relative, ρ_i , et absorptivité relative, α_i , reliées entre elles par la relation de Kirchoff :

¹ Dans le cas où l'enceinte n'est pas fermée, une facette spéciale est créée pour l'environnement.

$$\varepsilon_i = \alpha_i = 1 - \rho_i \quad 3.35$$

Le flux net q_i^{out} sortant de la facette i est composé de la partie réfléchi du rayonnement incident, q_i^{in} , et de l'émission propre à la facette (v. Fig. 3.3) :

$$q_i^{\text{out}} = \rho_i q_i^{\text{in}} + \varepsilon_i \sigma_B T_i^4 = (1 - \varepsilon_i) q_i^{\text{in}} + \varepsilon_i \sigma_B T_i^4 \quad 3.36$$

Le flux incident, q_i^{in} , peut être remplacé par l'expression :

$$q_i^{\text{in}} = \sum_{j \neq i}^{N_f} F_{i-j} q_j^{\text{out}} \quad 3.37$$

où N_f est le nombre de facettes dans l'enceinte.

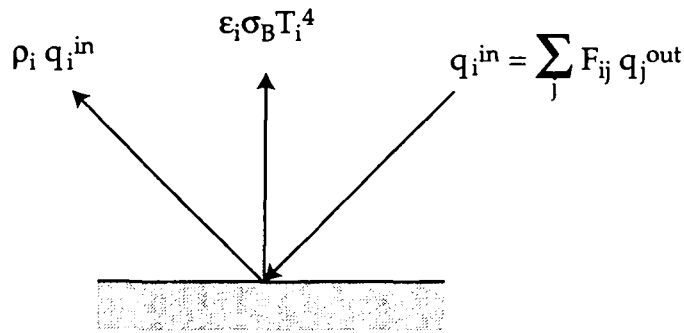


Fig. 3.3 : Bilan d'énergie effectué à la surface d'un corps gris dans la méthode de "radiation nette".

En substituant l'expression 3.37 dans l'équation 3.36 et en multipliant par la surface de la facette A_i , on obtient :

$$A_i q_i^{\text{out}} - A_i (1 - \varepsilon_i) \sum_{j \neq i}^{N_f} F_{i-j} q_j^{\text{out}} = A_i \varepsilon_i \sigma_B T_i^4 \quad 3.38$$

Répétée pour l'ensemble des facettes, cette relation permet de former un système d'équations linéaires :

$$[R] \mathbf{q}^{\text{out}} = \mathbf{b} \quad \text{avec} \quad 3.39$$

$$\mathbf{b}_i = \frac{A_i \varepsilon_i}{1 - \varepsilon_i} \sigma_B T_i^4 \quad \text{et} \quad \begin{cases} R_{ij} = \frac{A_i}{1 - \varepsilon_i} & \text{si } i = j \\ R_{ij} = -A_i F_{i-j} & \text{si } i \neq j \end{cases} \quad 3.40$$

La relation de réciprocité des facteurs de vue (éq. 2.67) permet de montrer que le système est symétrique. La méthode numérique utilisée pour la résolution dépend des émissivités relatives. Si ces dernières sont constantes tout au long du calcul, l'invariance des termes de la matrice permet l'utilisation d'une méthode directe basée sur une factorisation de la matrice effectuée une seule fois au début du programme. Dans le cas où les émissivités varient au cours du calcul, une méthode itérative est adoptée.

La résolution du système linéaire fournit une solution pour l'ensemble des échanges radiatifs dans l'enceinte. Elle est effectuée à chaque pas de temps du

programme en utilisant les températures explicites des arêtes externes (moyennes algébriques des températures aux noeuds des extrémités).

La solution q^{out} obtenue permet alors de déduire le flux à appliquer comme condition aux limites pour chaque facette :

$$\kappa \frac{\partial T}{\partial n} = q_i^{in} - q_i^{out} = \frac{\epsilon_i}{1 - \epsilon_i} (q_i^{out} - \sigma_B T_i^4) \quad 3.41$$

Ce flux est recalculé à chaque pas de temps de la résolution du problème thermique.

3.1.4 Couplage avec le logiciel 3-MOS

3-MOS est un logiciel développé au LMPH au cours de ces 10 dernières années pour simuler les procédés de solidification (Thévoz, 1990). Il est constitué d'un ensemble de modules permettant de calculer la thermique avec changement de phase, les vitesses d'écoulement dans le liquide, les structures de grains dendritiques, la macroségrégation et la microségrégation. Ce logiciel a été choisi comme base d'implémentation pour les modules d'induction, de radiation et de transformations de phase à l'état solide présentés précédemment. Parmi les modules présents initialement dans 3-MOS, seule la partie thermique est utilisée dans la simulation du traitement thermique. Cette partie est brièvement décrite ici en soulignant les modifications apportées par le couplage avec les nouveaux modules.

Le modèle est basé sur une formulation en enthalpie permettant de prendre en compte facilement la chaleur latente des transformations de phase.

L'équation à résoudre est la suivante :

$$\text{div} (\kappa \text{grad } T) + \dot{Q} = \frac{\partial h}{\partial t} \quad 3.42$$

où h est l'enthalpie volumique et \dot{Q} un terme de source¹.

La résolution de cette équation non linéaire est effectuée au moyen d'une méthode d'éléments finis utilisant le schéma itératif de Newton-Raphson. La formulation en éléments finis est basée sur un ensemble de fonctions d'interpolation, $\phi_i(\mathbf{x})$, appelées aussi fonctions de base. Une fonction $\phi_i(\mathbf{x})$ est associée à chaque noeud i du maillage et définie sur le domaine de calcul. Elle vaut 1 au noeud i et décroît linéairement jusqu'à 0 sur les arêtes opposées. Cette base de fonctions permet d'exprimer les champs de température et d'enthalpie par les combinaisons linéaires suivantes :

$$T(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^N T_i(t) \phi_i(\mathbf{x}) \quad 3.43$$

$$h(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^N h_i(t) \phi_i(\mathbf{x}) \quad 3.44$$

où T_i et h_i sont respectivement la température et l'enthalpie volumique au noeud i et N le nombre de noeuds dans le maillage.

¹ Contrairement à la notation utilisée dans l'équation 2.59, le terme de source défini ici ne comprend pas l'enthalpie des transformations de phase, celle-ci étant incluse dans le terme de droite.

En multipliant l'équation 3.42 par une fonction test ϕ_j (qui peut être choisie parmi les fonctions d'interpolation) et en l'intégrant sur le domaine de calcul, Ω , on obtient par le théorème de la divergence la formulation suivante :

$$\int_{\Gamma} \kappa (\mathbf{grad} T \phi_j) \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma - \int_{\Omega} \kappa (\mathbf{grad} T \cdot \mathbf{grad} \phi_j) \, d\Omega = \int_{\Omega} \frac{\partial h}{\partial t} \phi_j \, d\Omega - \int_{\Omega} \dot{Q} \phi_j \, d\Omega \quad 3.45$$

La procédure de discrétisation et d'assemblage conduit à l'équation matricielle suivante :

$$[\mathbf{M}] \frac{dh}{dt} + [\mathbf{K}] \mathbf{T} = \mathbf{b} + \mathbf{s} \quad 3.46$$

où \mathbf{h} est le vecteur des enthalpies et \mathbf{T} celui des températures aux noeuds. Les matrices de conductibilité, $[\mathbf{K}]$, de masse, $[\mathbf{M}]$, le terme de source, \mathbf{s} , et le vecteur contenant les conditions aux limites, \mathbf{b} , sont définis de la manière suivante :

$$K_{ij} = \int_{\Omega} \kappa (\mathbf{grad} \phi_i \cdot \mathbf{grad} \phi_j) \, d\Omega \quad 3.47$$

$$M_{ij} = \int_{\Omega} (\phi_i \phi_j) \, d\Omega \quad 3.48$$

$$s_j = \int_{\Omega} (\dot{Q} \phi_j) \, d\Omega \quad 3.49$$

$$b_j = \int_{\Gamma} \kappa (\mathbf{grad} T \phi_j) \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma \quad 3.50$$

Les conditions aux limites peuvent être de type essentiel (température imposée), naturel (flux imposé ou adiabatique) ou encore de type mixte (coefficient de transfert).

La discrétisation en temps est effectuée selon le schéma semi-implicite :

$$- [\mathbf{K}] \mathbf{T}^{n+1} + \mathbf{b}^n + \mathbf{s}^n = [\mathbf{M}] \frac{\mathbf{h}^{n+1} - \mathbf{h}^n}{\Delta t} \quad 3.51$$

où n est le numéro du pas de temps. Les conditions aux limites, le terme de source, de même que les propriétés physiques intervenant dans le calcul sont pris explicitement au pas de temps précédent.

La résolution revient à chercher le zéro de la fonction $F(\mathbf{h}^{n+1})$ suivante :

$$F(\mathbf{h}^{n+1}) = \frac{1}{\Delta t} [\mathbf{M}] \mathbf{h}^{n+1} - \frac{1}{\Delta t} [\mathbf{M}] \mathbf{h}^n + [\mathbf{K}] \mathbf{T}^{n+1} - \mathbf{b}^n - \mathbf{s}^n = 0 \quad 3.52$$

Le zéro est approché par la méthode itérative de Newton-Raphson. L'incrément du vecteur \mathbf{h} entre les itérations i et $i+1$ est obtenu en utilisant la relation :

$$\left. \frac{\partial F}{\partial \mathbf{h}^{n+1}} \right|_{\mathbf{h}^{n+1} = \mathbf{h}_i} (\mathbf{h}_{i+1} - \mathbf{h}_i) = -F(\mathbf{h}_i) \quad 3.53$$

De l'équation 3.52, avec les hypothèses faites, on déduit directement :

$$\frac{\partial F}{\partial h^{n+1}} = \frac{1}{\Delta t} [M] + [K] \left[\frac{\partial T}{\partial h} \right] \quad 3.54$$

où $[\partial T/\partial h]$ est la matrice diagonale contenant les dérivées de la fonction $T(h)$ estimées aux noeuds. Le système matriciel à résoudre à chaque itération est donc le suivant :

$$\left\{ \frac{1}{\Delta t} [M] + [K] \left[\frac{\partial T}{\partial h} \right] \right\} (h_{i+1} - h_i) = - \frac{1}{\Delta t} [M] h_i + \frac{1}{\Delta t} [M] h^n - [K] T_i + b^n + s^n \quad 3.55$$

Il fournit l'incrément du vecteur h entre les itérations i et $i+1$.

Dans le cas de la solidification, une courbe, $h(T)$, reliant l'enthalpie à la température, peut être calculée sur la base des propriétés physiques, du diagramme de phase et d'un modèle de microségrégation. Cette courbe permet alors de déduire à chaque itération la valeur T_i à partir de h_{i+1} ainsi que d'estimer la dérivée $\partial T/\partial h$ pour chaque noeud.

Dans le cas des transformations de phase à l'état solide, la relation enthalpie-température est mal connue et dépend fortement de l'histoire thermique locale et des phases formées. L'approche adoptée est celle d'un couplage micro-macroscopique semblable à celui présenté par Thévoz et Rappaz (Thévoz, 1989).

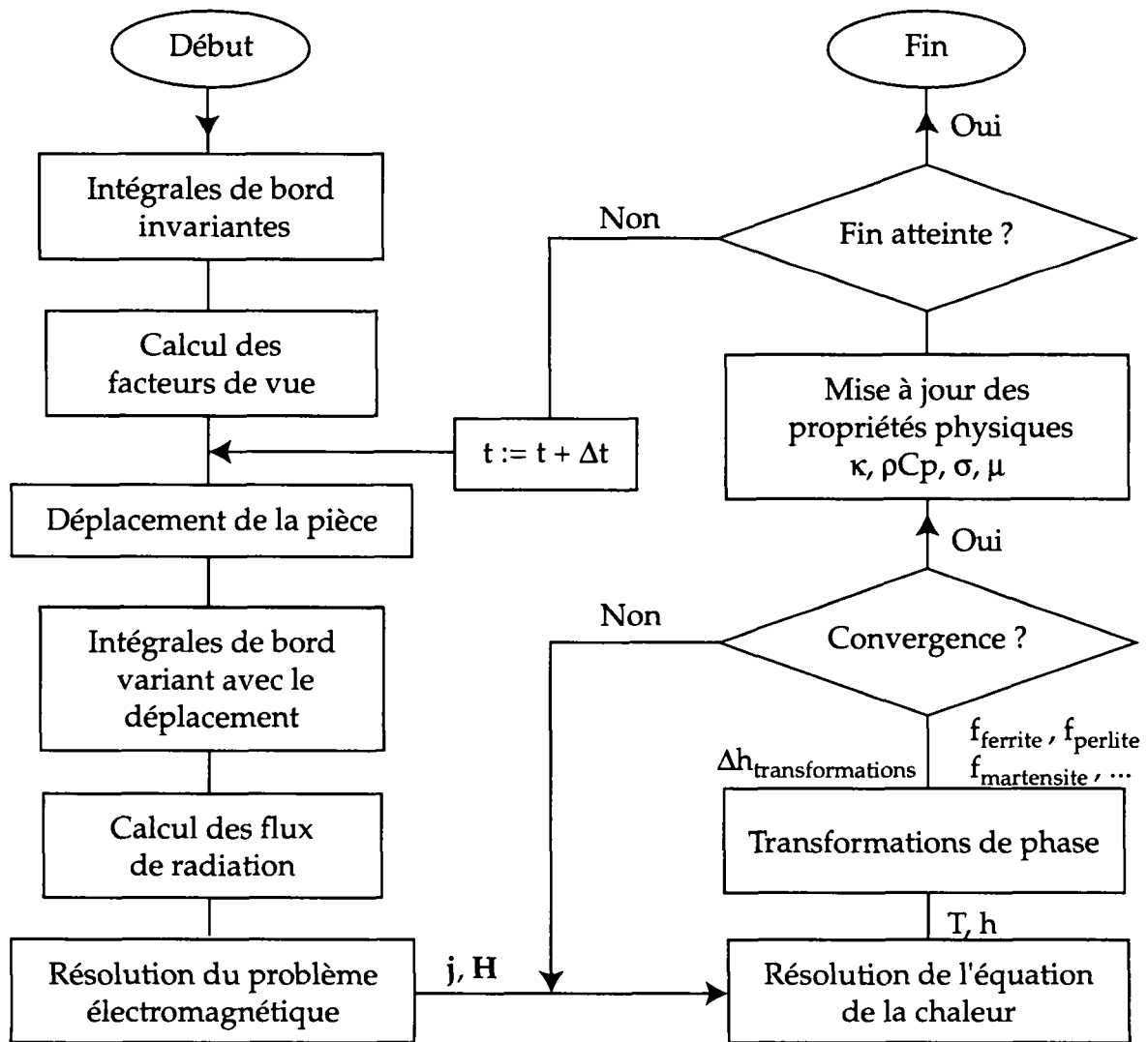


Fig. 3.4 : Organigramme du logiciel de simulation de traitement thermique par induction.

La conversion enthalpie-température et le calcul de la dérivée $\partial T/\partial h$ sont ainsi effectués dans le module de transformations de phase. A chaque itération et pour chaque noeud du maillage, le module est appelé en fournissant la variation d'enthalpie ($h_{i+1}-h_i$) donnée par la résolution de (3.55). Le module retourne alors la variation de température ($T_{i+1}-T_i$) qui, en considérant le principe d'additivité, génère une vitesse de transformation permettant de satisfaire la relation :

$$h_{i+1} - h_i = \rho c_p (T_{i+1} - T_i) + \sum_{k=1}^{N_{\text{transf}}} \Delta h_k^{\text{tr}} \frac{\partial P_k}{\partial t} \quad 3.56$$

où Δh_k^{tr} et P_k sont respectivement l'enthalpie de transformation et la fraction volumique occupée par les produits de la transformation k . Le pas de temps utilisé dans le module de transformations de phase est généralement inférieur à celui utilisé dans le programme principal. Il est choisi de façon à assurer un nombre minimum de paliers pour l'application du principe d'additivité. La dérivée $\partial T/\partial h$ est obtenue numériquement par un second appel au module avec une valeur ($h_{i+1}-h_i$) légèrement perturbée. La procédure itérative est arrêtée lorsque toutes les composantes du vecteur ($h_{i+1} - h_i$) sont inférieures à un critère fixé.

Le programme peut également fonctionner sans itérations. Le vecteur des enthalpies au pas de temps $n+1$ est alors obtenu en résolvant le système suivant :

$$\left\{ \frac{1}{\Delta t} [\mathbf{M}] + [\mathbf{K}] \left[\frac{\partial \mathbf{T}}{\partial \mathbf{h}} \right] \right\} (\mathbf{h}^{n+1} - \mathbf{h}^n) = - [\mathbf{K}] \mathbf{T}^n + \mathbf{b}^n + \mathbf{s}^n \quad 3.57$$

Dans ce cas, l'appel au module de transformations de phase n'est effectué que deux fois pour chaque noeud (détermination de T^{n+1} et $\partial T/\partial h$).

Couplage

L'organigramme général du logiciel de simulation est illustré à la figure 3.4. Avant d'entrer dans la boucle principale en pas de temps, le programme effectue un certain nombre d'opérations d'initialisation. Il s'agit en particulier, du calcul des facteurs de vue pour la radiation et des intégrales de bord invariantes utilisées dans la méthode d'éléments-frontière du module d'induction (Intégrales liant des arêtes d'un même domaine du maillage).

Au cours d'un pas de temps de la boucle principale, la résolution est effectuée par la suite d'opérations suivante :

- La pièce est déplacée verticalement d'un incrément $v \cdot \Delta t$ où v est la vitesse de tirage et Δt le pas de temps.
- S'il y a déplacement de la pièce, les intégrales de bord qui lient l'inducteur à la pièce sont remises à jour.
- Les flux de radiation sont calculés sur la base des températures obtenues au pas de temps précédent (éq. 3.40).
- La résolution du problème électromagnétique est effectuée. Elle fournit le champ magnétique \mathbf{H} et la densité de courant \mathbf{j} en chaque noeud du maillage.
- La thermique est résolue en utilisant le terme de source donné par le calcul d'induction et les conditions aux limites provenant du calcul de

radiation. L'appel au module de transformations de phase à l'état solide est inclus dans cette étape. Il est effectué selon le couplage itératif décrit ci-dessus.

- A la fin du pas de temps, les propriétés physiques ($\kappa, \rho C_p, \sigma, \mu$) sont mises à jour en tenant compte des nouvelles valeurs du champ magnétique et de la température.

3.1.5 Méthodes inverses

La résolution directe d'un problème de diffusion thermique consiste à calculer le champ de température dans un domaine pour une situation initiale et des conditions aux limites données. Dans les *méthodes inverses*, on utilise le même modèle numérique, mais en considérant que les conditions aux limites et/ou les propriétés thermophysiques sont des inconnues du problème. En contrepartie, la méthode inverse nécessite la connaissance de la température en certains points de la pièce (mesurée par exemple avec des thermocouples). La technique consiste alors à trouver le jeu de données (conditions aux limites ou propriétés physiques) qui minimise l'écart entre les valeurs mesurées et les valeurs obtenues par le calcul direct. La minimisation peut être effectuée selon une technique de moindres carrés standard ou selon l'algorithme de *Maximum A Posteriori* (MAP) tel que proposé par Milano et Scarpa (Rappaz-M, 1995). Cette dernière technique a été implémentée dans le logiciel d'éléments finis 3-MOS.

Aspects théoriques de la méthode inverse

Considérons que N_m thermocouples ont été placés en des positions connues x_j ($j=1, \dots, N_m$) à l'intérieur de la pièce. Les mesures ont fourni une série de valeurs de température T_{ij}^m en chaque point x_j et à différents temps t_i ($i=1, \dots, N_t$). On cherche alors à déduire le jeu de paramètres inconnus $\mathbf{B} = \{\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_{N_B}\}$ qui minimise la fonction :

$$S(\mathbf{B}) = \sum_{i=1}^{N_t} \sum_{j=1}^{N_m} \frac{1}{\sigma_T^2} \left[T_{ij}^m - T_{ij}^c(\mathbf{B}) \right]^2 + \sum_{k=1}^{N_B} \frac{1}{\sigma_k^2} \left[\beta_k - \beta_k^0 \right]^2 \quad 3.58$$

où les $T_{ij}^c(\mathbf{B})$ sont les températures calculées au temps i et à la position x_j . La déviation standard σ_T est l'erreur typique sur la mesure de température et σ_k un paramètre indiquant dans quelle mesure les inconnues β_k peuvent s'écarter d'une valeur estimée a priori, β_k^0 . Si l'on fait tendre σ_k vers l'infini, la technique de MAP se ramène à une méthode de moindres carrés standard, alors qu'un paramètre σ_k tendant vers zéro impose l'égalité entre les inconnues et leurs estimations a priori.

Pour minimiser $S(\mathbf{B})$, on écrit :

$$\frac{\partial S}{\partial \beta_1} = 0, \quad \frac{\partial S}{\partial \beta_2} = 0, \quad \dots, \quad \frac{\partial S}{\partial \beta_{N_B}} = 0 \quad 3.59$$

La dérivation de (3.58) par rapport aux β_1 fait apparaître les coefficients de sensibilité :

$$X_{ij1} = \frac{\partial T_{ij}^c(\mathbf{B})}{\partial \beta_1} \quad 3.60$$

Une procédure de linéarisation de $T_{ij}^c(\beta)$ (Rappaz-M, 1995) conduit à la formulation d'un système d'équations linéaires permettant de déterminer l'incrément du vecteur des inconnues, $\Delta\beta = \beta^{v+1} - \beta^v$, entre les itérations v et $v+1$:

$$\sum_{k=1}^{N_\beta} A_{lk} \cdot \Delta\beta_k = f_l \quad 3.61$$

avec :

$$A_{lk} = \sum_{i=1}^{N_t} \sum_{j=1}^{N_m} \frac{X_{ijk} \cdot X_{ijl}}{\sigma_l^2} + \frac{\delta_{lk}}{\sigma_l^2} \quad 3.62$$

$$f_l = \sum_{i=1}^{N_t} \sum_{j=1}^{N_m} \frac{1}{\sigma_l^2} \left[T_{ij}^m - T_{ij}^c(\beta^v) \right] \cdot X_{ijl} - \frac{\beta_l^v - \beta_l^0}{\sigma_l^2} \quad 3.63$$

où δ_{lk} est le symbole de Kroneker.

La résolution est donc effectuée selon la procédure itérative suivante :

- (1) choix des estimations a priori β_k^0 et attribution comme valeur initiale,
- (2) calcul des températures $T_{ij}^c(\beta^v)$ par résolution du problème direct,
- (3) calcul des coefficients de sensibilité X_{ijl} . Cette opération est réalisée au moyen de N_β calculs directs dans lesquels les inconnues β_k sont perturbées tour à tour,
- (4) résolution du système d'équations linéaires (3.61),
- (5) répétition des opérations à partir du point (2) si les incréments obtenus sont supérieurs à un seuil de tolérance fixé.

La procédure décrite ici constitue le coeur du programme de méthode inverse. La résolution du problème direct (effectuée $N_\beta+1$ fois à chaque itération) est obtenue avec le modèle FE de 3-MOS, utilisé alors comme une sous-routine du programme inverse.

3.2 Caractérisation des conditions aux limites

La douche utilisée pour la trempe au défilé joue un rôle important dans le procédé. En effet, elle réalise l'essentiel de l'extraction de la chaleur à la surface de la pièce et influence donc fortement les vitesses de refroidissement. Si la couche austénitisée est importante, la profondeur trempée et les microstructures obtenues vont donc être principalement dictées par la capacité de refroidissement de la douche. (Dans le cas contraire, la profondeur de trempe correspond directement à celle de la couche austénitisée, même pour une douche de faible capacité). Malheureusement, la chaleur extraite par la douche ne peut être quantifiée par la seule connaissance des données géométriques, débits et autres propriétés physiques. Les mouvements de convection du liquide de trempe - généralement turbulents - et les phénomènes de vaporisation rendent le problème trop complexe pour l'établissement d'un modèle.

L'approche adoptée consiste donc à déterminer le coefficient de transfert de chaleur à la surface d'une pièce doucée en se basant sur des mesures de température à différentes profondeurs sous la surface. Les méthodes inverses présentées au paragraphe 3.1.5 permettent alors de déterminer par un calcul numérique la valeur du coefficient de transfert et sa variation avec la température de surface. Le travail a été réalisé pour une douche typique utilisée dans le procédé de trempe au défilé, en portant l'effort principalement sur l'influence du débit et de la concentration d'adjuvant dans l'eau de refroidissement. Les résultats seront repris dans le cadre de l'application du modèle à un cas de trempe au défilé.

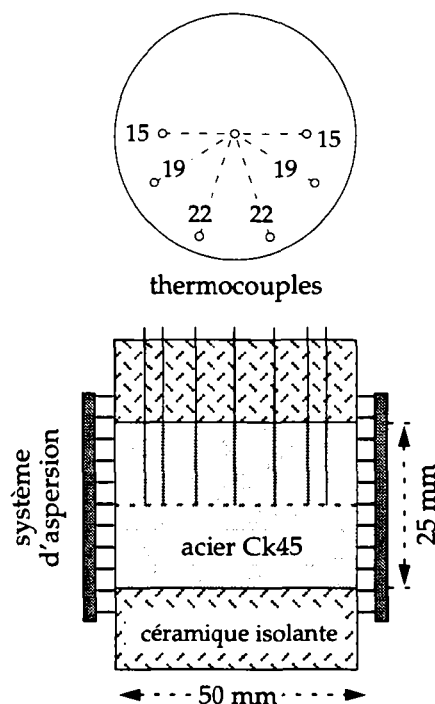


Fig. 3.5 : Montage expérimental utilisé pour déterminer le coefficient de transfert à la surface d'une pièce doucée. Les valeurs indiquées dans la section circulaire représentent la distance en mm entre les thermocouples et le centre de la pièce.

3.2.1 Montage expérimental

Les essais ont été réalisés dans les ateliers des sociétés Amysa-Yverdon SA et Bobst SA qui ont mis à disposition les équipements d'induction et de trempe. La douche étudiée est un modèle typique utilisé dans les procédés de trempe au défilé (modèle AMYSA 17622-3462). Elle possède une forme torique axisymétrique à section rectangulaire avec des orifices horizontaux d'environ 1 mm de diamètre et répartis sur une hauteur de 30 mm.

Le montage expérimental est illustré à la figure 3.5. La pièce doucée est un cylindre de 25 mm de haut et 50 mm de diamètre en acier Ck45 dont la composition est indiquée dans le tableau 3.1. Les faces supérieures et inférieures sont isolées par une céramique (amiante). Sept thermocouples sont placés à l'intérieur de la pièce dans des trous de 1.5 mm de diamètre et de 12.5 mm de profondeur. Le contact de la jonction du thermocouple avec la matière est assuré par une brasure à l'argent réalisée au four à 600°C environ. Les positions choisies sont le centre et des rayons de 15, 19 et 22 mm. Les trois derniers thermocouples

sont dédoublés dans le but d'obtenir une estimation des erreurs de mesure. Les positions sont réparties selon des angles différents, afin de minimiser les perturbations provoquées par les thermocouples voisins.

Eléments d'alliage	C	Si	Mn	P	S
Teneur en % pds	0.42 - 0.50	0.15 - 0.35	0.50 - 0.80	< 0.035	< 0.035

Tableau 3.1 : Composition de l'acier Ck45 (selon fabriquant).

L'expérience se déroule dans des conditions statiques. La pièce est chauffée par induction à la fréquence de 6700 Hz pendant 120 s. L'inducteur est alors déplacé verticalement pour permettre à la pièce de refroidir à l'air libre. Après 15 s, le champ de température est presque uniforme et la douche est amenée à la hauteur de la pièce. L'aspersion qui est immédiatement enclenchée après la mise en place de la douche est maintenue jusqu'au refroidissement complet de la pièce. La température et la tension efficace aux bornes de l'inducteur sont enregistrées tout au long de l'essai.

Les conditions utilisées pour chaque essai sont résumées dans le tableau 3.2. Les paramètres variés sont le débit et la concentration de l'adjuvant mis en solution dans l'eau du circuit de refroidissement. Le produit utilisé est un composé polymérique de la famille des PAO (Poly(alcaline oxide)) vendu sous le nom de Aquaquench®. Les essais avec adjuvant ont été effectués avec des concentrations réparties entre 14% et 20%. Cet intervalle correspond à la plage d'utilisation typique qui est située juste en dessous de la limite de solubilité du polymère dans l'eau. L'influence du débit a été mesurée avec une concentration d'adjuvant constante de 14%.

No de l'essai	Concentration d'adjuvant	Débit	Température du liquide de trempe
1	0%	45 l/min	35°C
2	14%	45 l/min	35°C
3	17%	45 l/min	35°C
4	20%	45 l/min	30°C
5	14%	69 l/min	31°C
6	14%	27 l/min	31°C

Tableau 3.2 : conditions choisies pour la caractérisation du refroidissement de la douche.

3.2.2 Mise en oeuvre de la méthode inverse

Les conditions aux limites et initiales du calcul direct sont représentées schématiquement à la figure 3.6. La présence d'isolations céramiques permet de considérer des conditions aux limites adiabatiques sur les faces supérieures et inférieures de la pièce. Le coefficient de transfert, h , appliqué sur le bord latéral est supposé être indépendant du lieu en raison de l'aspersion directe et homogène

sur toute la hauteur de la pièce. Le champ de température initial est donné par une fonction d'interpolation linéaire basée sur les valeurs mesurées par les thermocouples juste avant l'aspersion. Le domaine de calcul est séparé en deux parties. La zone extérieure (en gris sur la figure) est considérée comme étant de microstructure bainito-martensitique, alors que le coeur est supposé ferrito-perlitique. L'épaisseur (3.8 mm) a été estimée sur la base du diagramme TRC et des courbes de refroidissement mesurées. Cette subdivision permet d'introduire une enthalpie de transformation dépendant de la phase formée lors de la décomposition de l'austénite. L'échange thermique entre les deux domaines est décrit par une condition de contact parfait.

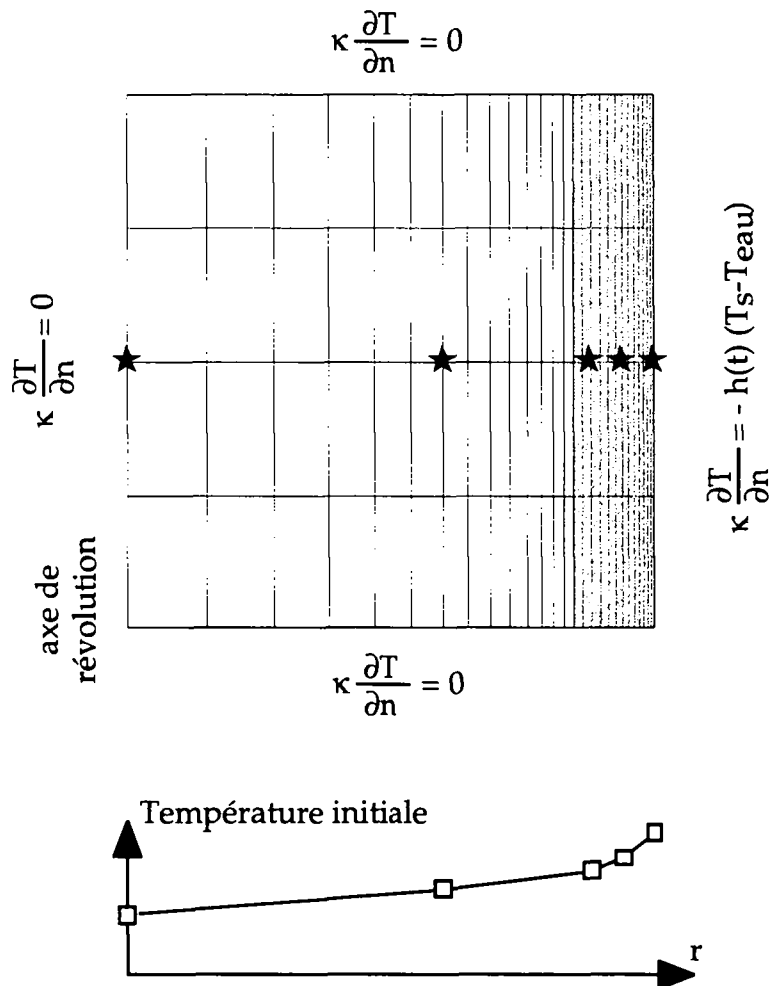


Fig. 3.6 : Conditions utilisées dans la méthode inverse. Le domaine de calcul est divisé en une région bainito-martensitique (gris) et une région ferrito-perlitique (blanc). Les étoiles indiquent les noeuds de maillage correspondant aux positions des thermocouples. Le champ de température initiale est interpolé linéairement à partir des valeurs mesurées en ces points avant l'aspersion.

Les inconnues du problème inverse sont les valeurs du coefficient de transfert, $h = \{h_1, h_2, \dots, h_{N_B}\}$, tabulées en fonction du temps aux instants $\{t_1, t_2, \dots, t_{N_B}\}$. La valeur de h utilisée dans la résolution est alors déduite par une interpolation linéaire. Les calculs ont été effectués avec 17 inconnues tabulées aux temps (0, 1, 2, 4, 6, 9, 12, 15, 20, 25, 30, 40, 50, 60, 70, 80 et 120 s). Après convergence du calcul, le

programme fournit une comparaison des températures calculées et mesurées, l'évolution de la température de surface et le vecteur h . Ces deux derniers résultats permettent finalement de tracer la courbe représentant la variation du coefficient de transfert avec la température de surface.

Des calculs inverses utilisant une tabulation de h directement en fonction de la température de surface ont également été réalisés. Cependant, il s'est avéré que la convergence est plus difficile à obtenir dans ce cas. La tabulation en temps réduit en effet le risque d'instabilité du schéma itératif.

3.2.3 Résultats et discussion

Les résultats des différents essais sont représentés à la figure 3.7. La variation du coefficient de transfert, h , avec la température de surface, T_s , est décrite par les 17 valeurs obtenues pour chaque essai. La résolution a demandé 5 à 6 itérations à partir d'une estimation de $10'000 \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$ identique pour tous les points. La présence d'oscillations sur les courbes $h(T_s)$ a nécessité l'application d'une procédure de lissage dont le résultat est représenté en trait gras sur la figure.

De manière générale, on peut déduire de ces résultats que le coefficient de transfert augmente avec le débit d'aspersion et diminue avec la teneur en adjuvant. De même, on observe que la fonction $h(T_s)$ est croissante jusqu'à 150°C environ et diminue légèrement au-delà. Son comportement à haute température est toutefois sujet à une erreur importante. En effet, le temps caractéristique de diffusion thermique entre la surface et les thermocouples placés en profondeur est relativement élevé. Il est estimé à 1.5 s pour le premier thermocouple, situé à 3 mm de profondeur. Ce délai est représentatif du décalage qui sépare les événements produits en surface (modification des conditions de refroidissement) et leur détection en profondeur. Il fixe ainsi une limite inférieure pour l'intervalle de tabulation du coefficient de transfert. Pour les vitesses de refroidissement observées (environ 250°C/s à 1 mm sous la surface), une tabulation avec un intervalle de 1 s ne permet d'obtenir que 3 valeurs du coefficient de transfert entre 900 et 400°C .

On s'aperçoit donc que la caractérisation du coefficient de transfert aux températures élevées nécessiterait des thermocouples placés plus près de la surface. Malheureusement, la perturbation du champ thermique provoquée par la présence d'un thermocouple s'amplifie au voisinage de la surface. La distance de 3 mm apparaît donc comme un minimum pour un trou de 1.2 mm de diamètre.

Les courbes de refroidissement sont présentées à la figure 3.8 pour deux conditions de trempes. On remarque tout d'abord la transformation de phase ferrito-perlitique aux alentours de 620°C , particulièrement visible sur la courbe mesurée au centre de la pièce. Malgré les difficultés évoquées plus haut, on observe un bon accord entre les courbes de température mesurées et calculées. Les fonctions $h(T_s)$ obtenues semblent donc décrire le refroidissement de manière correcte.

Une formule empirique fournissant le coefficient de transfert en fonction de la température de surface, de la concentration d'adjuvant et du débit a été mise au point à partir des résultats de la figure 3.7. Elle est donnée dans l'annexe 7.2 avec deux exemples de représentation graphique. L'intérêt de cette fonction réside dans sa facilité d'utilisation et dans la possibilité d'obtenir des estimations de h pour des conditions différentes (interpolation et extrapolation des données).

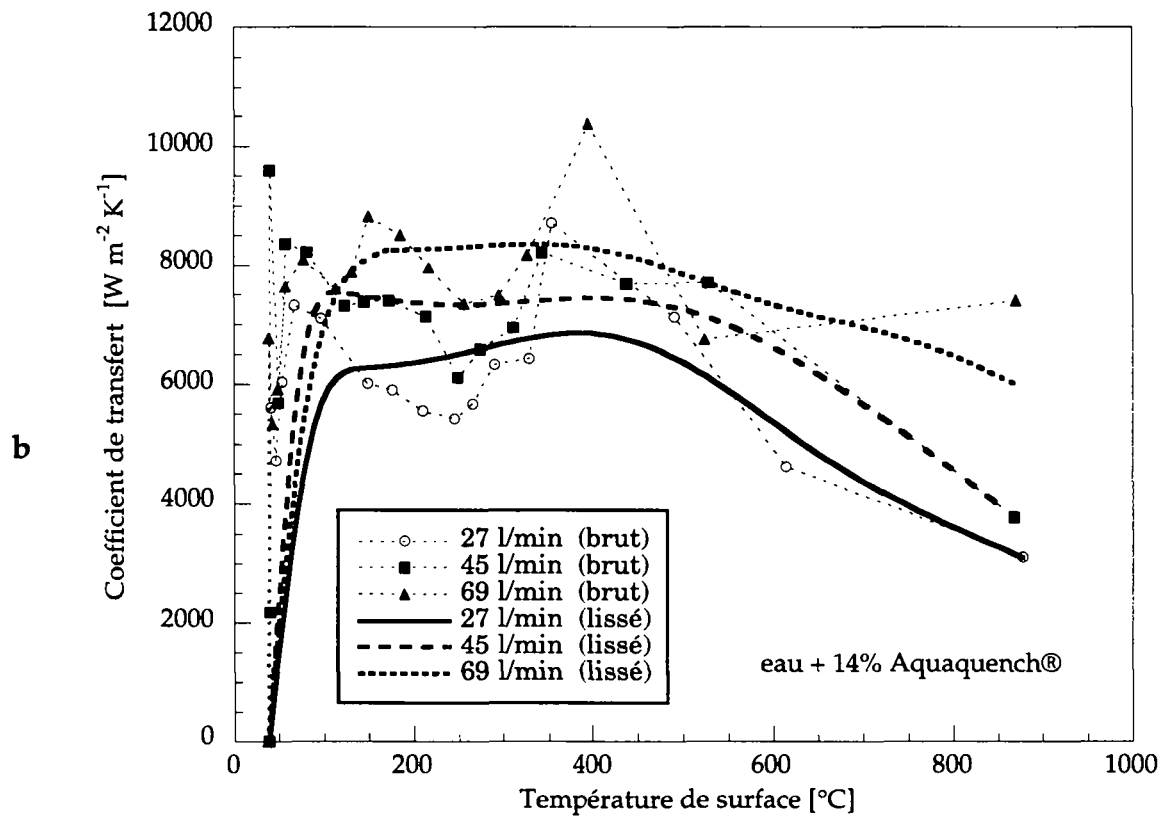
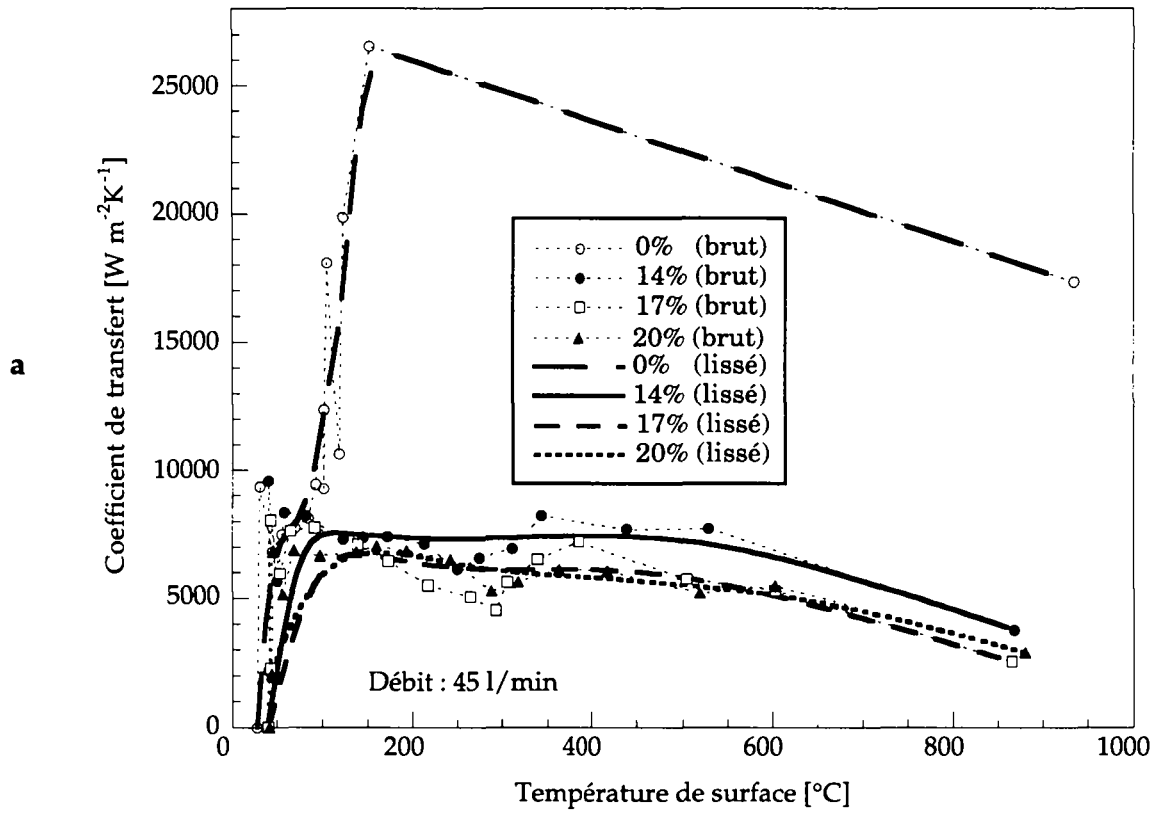


Fig. 3.7 : Coefficient de transfert déterminé en fonction de la température de surface pour différentes concentrations d'adjuvant (Aquaquench®) (a) et pour différents débits d'aspersion (b). Les valeurs déduites du calcul (brutes) ont nécessité un lissage dont le résultat est représenté en trait gras.

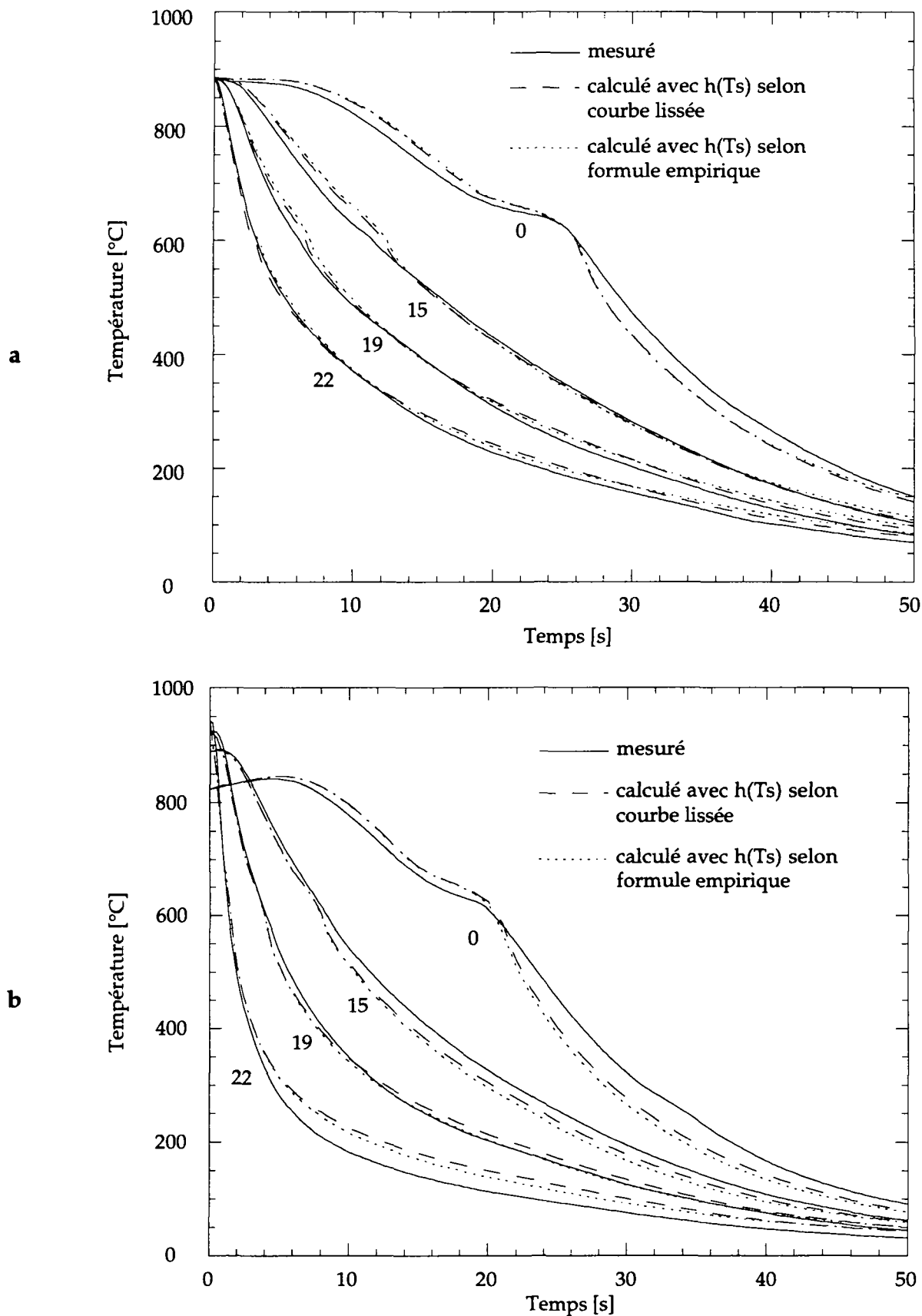


Fig. 3.8 : Comparaison des températures mesurées (traits continus), calculées avec un coefficient de transfert donné par la courbe lissée (traits tillés) et calculées avec un coefficient de transfert donné par la formule empirique (pointillés). (a) eau +14% Aquaquench, débit : 45 l/min. (b) eau sans adjuvant, débit : 45 l/min.

L'erreur effectuée en utilisant la fonction empirique plutôt que les données elles-mêmes peut être estimée à la figure 3.8. Les courbes de refroidissement obtenues avec un coefficient de transfert donné par la fonction empirique montrent une bonne correspondance avec celles provenant directement des données. Une certaine prudence est toutefois requise pour l'application de la fonction dans des conditions plus éloignées des mesures présentées ici.

3.3 Détermination des propriétés physiques

3.3.1 Mesure de la perméabilité magnétique de l'acier 42CrMo4

La perméabilité magnétique de l'acier 42CrMo4 a été mesurée en fonction de la température et du champ magnétique. Le but de ces mesures était de disposer des données nécessaires pour l'application du modèle à un cas industriel faisant intervenir une pièce en acier 42CrMo4 (section 3.6). Les mesures ont été réalisées par Prof. M.M. Radulescu selon un protocole adapté au cas du chauffage par induction (Radulescu, 1996).

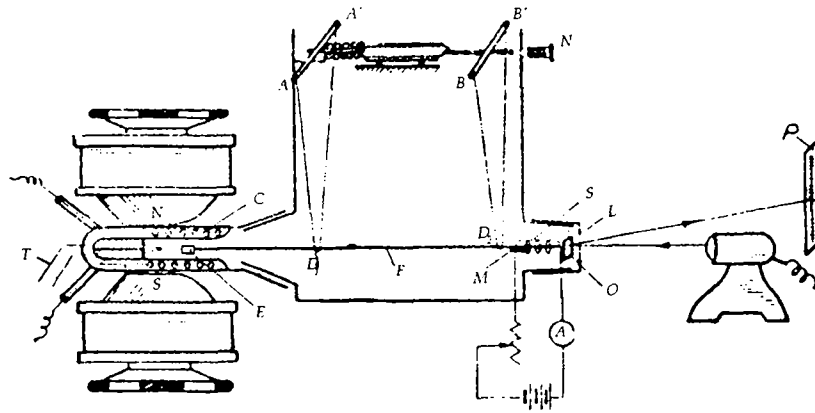


Fig. 3.9 : Balance de translation horizontale de Type Weiss utilisée pour les mesures de perméabilité magnétique (Radulescu, 1996).

Principe de mesure

La méthode adoptée est basée sur la balance à translation horizontale de type Weiss illustrée à la figure 3.9. Le principe consiste à mesurer la force exercée sur l'échantillon (E) placé dans un électro-aimant. Ce dernier produit un champ magnétique dont la composante horizontale du gradient, dH/dx , est approximativement constante dans la région de l'échantillon. La force exercée sur la pièce est donnée par :

$$F = V \mu_0 M \frac{dH}{dx} \quad 3.64$$

où V est le volume de l'échantillon et M son aimantation.

A l'aide d'un échantillon étalon (fer pur) dont la masse, $m_{ét}$, la force de compensation $F_{ét}$, la densité $\rho_{ét}$ et l'aimantation $M_{ét}$ sont connues, on obtient la perméabilité magnétique relative du matériau par la relation :

$$\mu_r = 1 + \frac{M}{H} = 1 + \frac{\rho}{H} \frac{F}{F_{ét}} \frac{m_{ét}}{m} \frac{M_{ét}}{\rho_{ét}} \quad 3.65$$

où m est la masse de l'échantillon et ρ sa densité.

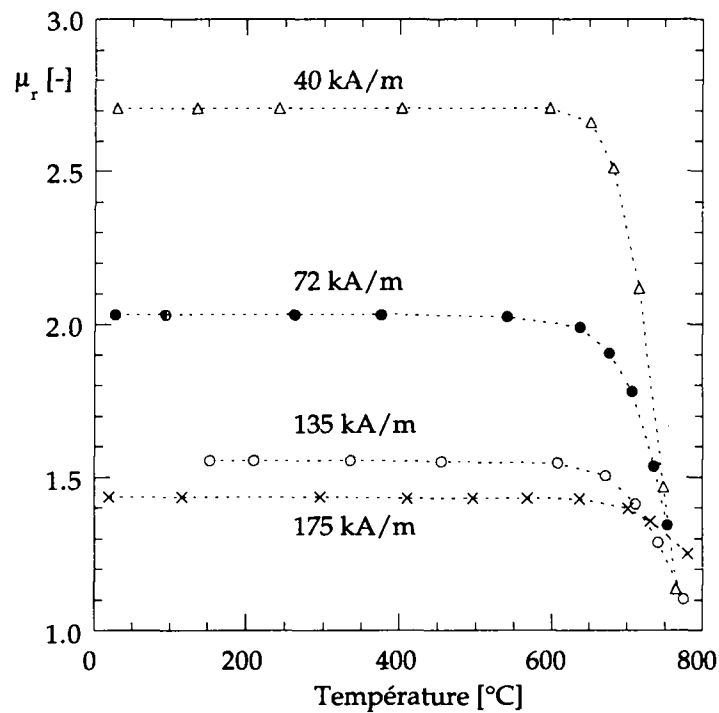


Fig. 3.10 : Perméabilité magnétique relative de l'acier 42CrMo4 en fonction de la température pour différentes valeurs du champ magnétique.

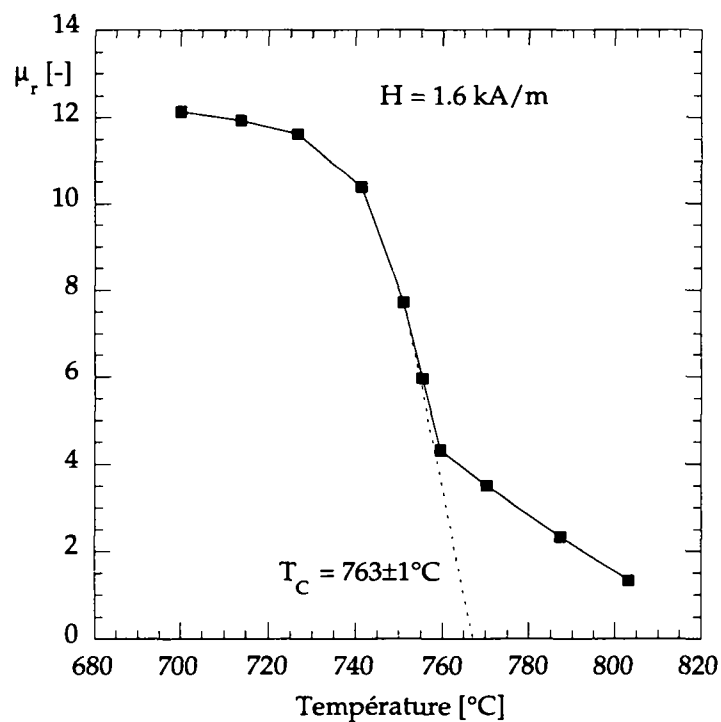


Fig 3.11 : Détermination de la Température de Curie de l'acier 42CrMo4 par l'application d'un champ faible.

Le four (C) dans lequel l'échantillon est placé permet d'effectuer les mesures à différentes températures.

La perméabilité magnétique relative de l'acier 42CrMo4 a été mesurée de cette manière pour quatre valeurs du champ magnétique (40, 72, 135 et 175 kA/m) et sur un intervalle de température compris entre 20°C et 800°C. La température de Curie a été déterminée en appliquant un champ faible (1600 A/m) entre 700°C et 800°C. Le comportement au-dessus de la température de Curie pour un champ magnétique très fort (400 kA/m) a également été caractérisé.

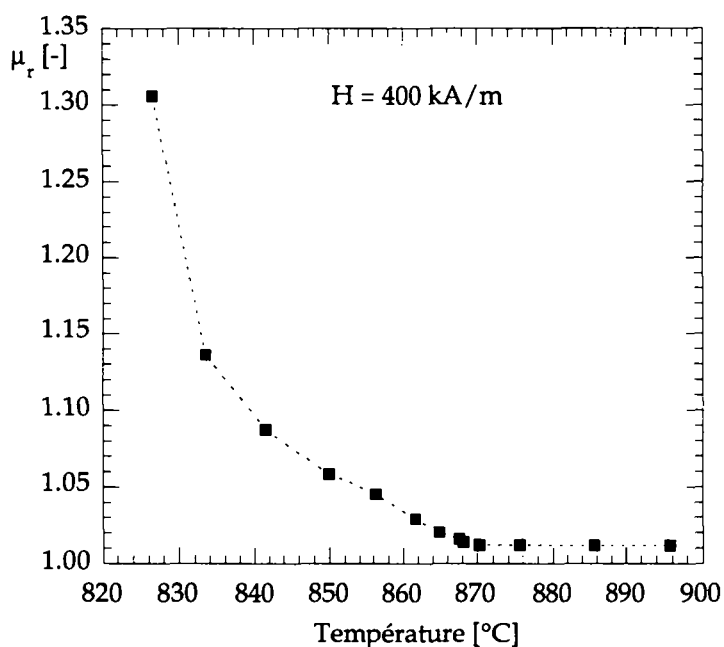


Fig. 3.12 : Perméabilité magnétique de l'acier 42CrMo4 au-dessus de la température de Curie sous l'application d'un champ très fort.

Résultats

La perméabilité magnétique relative mesurée en fonction du champ magnétique et de la température est représentée à la figure 3.10. On observe que pour un champ constant, la perméabilité ne varie que très peu jusqu'aux alentours de 600°C. Au-delà, elle diminue progressivement pour atteindre des valeurs proches de 1 vers 750-780°C. Cette chute correspond à la transition ferro-paramagnétique du fer. La température de Curie, T_c , à laquelle a lieu cette transition a été déterminée par une série de mesures à faible champ (1600 A/m). Les résultats présentés à la figure 3.11 conduisent à une estimation de $T_c = 763 \pm 1$ °C. La chute de perméabilité magnétique relative est toutefois observée à des températures plus élevées lorsqu'un champ fort est appliqué. Cet effet est visible aux figures 3.10 et 3.12. Cette dernière montre le comportement au-delà de T_c sous l'action d'un champ très fort.

3.3.2 Cinétique des transformations de phase à l'état solide dans l'acier Ck45

La cinétique des transformations de phase à l'état solide dans l'acier Ck45 a été mesurée par dilatométrie dans des conditions isothermes. Le but de ces essais était de déterminer le diagramme TTT de cet acier et de le comparer aux données

disponibles dans la littérature. Ce résultat a constitué ainsi une source d'informations supplémentaire pour la mise au point du fichier de données utilisé dans le modèle.

Des essais dilatométriques ont également été réalisés dans des conditions anisothermes. Ils ont permis d'effectuer une comparaison entre les cinétiques expérimentales et celles prédites par le modèle pour la même histoire thermique. Cette analyse constitue un test pour le principe d'additivité et l'utilisation des données isothermes dans des cas de refroidissement continu.

Conditions expérimentales

La cinétique des transformations de phase a été mesurée par dilatométrie sur une installation GLEEBLE 1500¹ permettant de simuler les processus thermomécaniques en métallurgie. La température de l'échantillon est contrôlée par un chauffage résistif et par la circulation d'eau dans le système de fixation. La dilatation est mesurée par un capteur placé sur le diamètre de l'éprouvette. Ce dernier a été fixé à 6 mm afin d'assurer une bonne homogénéité des températures.

Les essais isothermes ont été réalisés en chauffant les échantillons à 1000°C en 60 s puis en imposant une température constante inférieure à 700°C pendant le temps nécessaire à la transformation. Huit essais ont été effectués de cette manière avec des températures comprises entre 350°C et 700°C selon un intervalle de 50°C. Les essais anisothermes ont été accomplis avec les mêmes conditions d'austénitisation et des vitesses de refroidissement constantes de 3, 10 et 30°C/s.

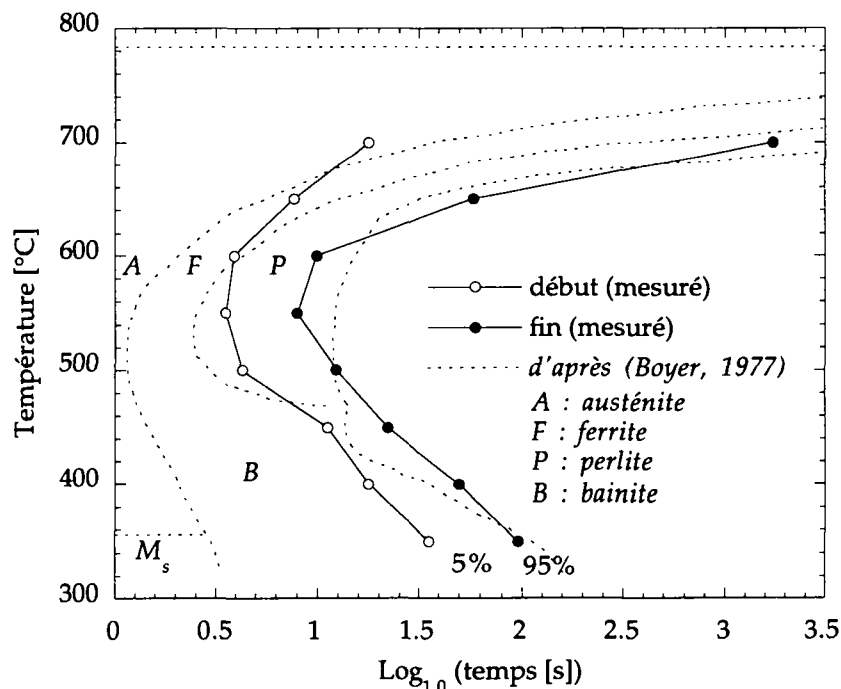


Fig. 3.13 : Diagramme TTT de l'acier Ck45 déterminé par dilatométrie (austénitisé à 1000°C en 60 s sans maintien). Le diagramme représenté en traits tillés provient de la littérature (Boyer, 1977) pour le même acier austénitisé à 1050°C en 60 s et maintenu à cette température pendant 5 min.

¹ GLEEBLE 1500 du Laboratoire de Métallurgie Mécanique, DMX-EPFL.

Résultats et discussion

Le diagramme TTT obtenu à partir des mesures isothermes est illustré à la figure 3.13. Les points représentés indiquent les temps de début et de fin de transformation par rapport au début du maintien isotherme. Les résultats sont superposés à un diagramme de la littérature (Boyer, 1977) obtenu pour le même acier, mais avec des conditions d'austénitisation différentes (chauffé à 1050°C en 60 s puis maintenu à cette température pendant 5 min). On peut observer que le diagramme mesuré indique des temps de début de transformation plus élevés que ceux provenant de la littérature. Les différences des conditions d'austénitisation utilisées ne peuvent expliquer cet écart. En effet, la durée et la température d'austénitisation, moins élevées dans nos mesures, devraient en principe conduire à une taille de grain austénitique inférieure et par conséquent accélérer le déroulement de la transformation. Or, ce phénomène n'est observé que dans l'essai à 700°C. Il faut toutefois signaler que les mesures sont soumises à d'autres influences, telles que la microstructure initiale, l'interprétation des courbes de dilatation, les contraintes dans l'éprouvette pendant l'essai et la composition réelle de l'échantillon. Une comparaison plus détaillée nécessiterait de procéder à des analyses chimiques et de compléter les résultats par des observations métallographiques d'échantillons trempés en cours de transformation. Elle dépasse toutefois le cadre de cette étude.

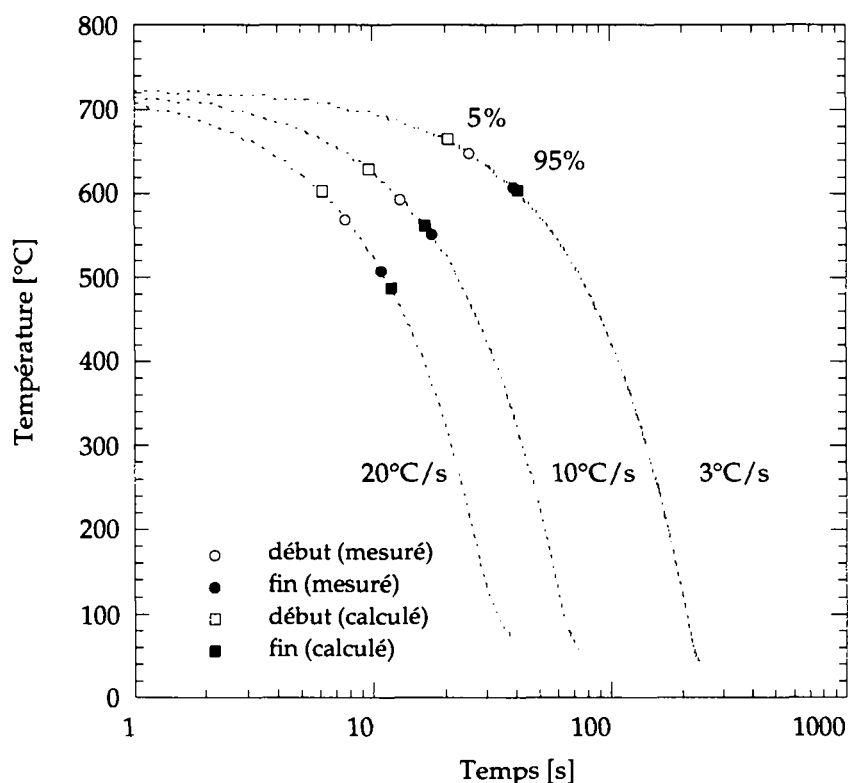


Fig. 3.14 : Cinétique de décomposition de l'austénite en refroidissement continu d'un acier Ck45 austénitisé à 1000°C en 60 s. Comparaison des cinétiques mesurées par dilatométrie et calculées au moyen du principe d'additivité.

Les résultats des essais isothermes ont été repris pour construire le fichier de données du modèle d'additivité. Celui-ci a alors été appliqué aux conditions de refroidissement continu utilisées dans les essais anisothermes. Les cinétiques expérimentales et calculées peuvent être comparées sur le diagramme TRC de la

figure 3.14. On observe une bonne correspondance générale avec toutefois des temps de début de transformation légèrement plus courts pour les résultats calculés. Cet écart peut provenir des données isothermes qui indiquent probablement une transformation trop rapide à haute température. Il peut également provenir du principe d'additivité lui-même, dont les conditions de validité formulées au chapitre 2 sont rarement vérifiées en réalité. En dépit des écarts observés, on peut juger que la méthode fournit des résultats suffisamment satisfaisants pour estimer les profondeurs de trempe dans un procédé de traitement thermique.

3.4 Application à un cas de chauffage au défilé

Avant d'être utilisé pour une description complète du procédé de trempe au défilé, le modèle a été appliqué au cas plus simple du chauffage par induction sans trempe. Cette opération a permis de vérifier les calculs électromagnétiques et leur couplage avec le module thermique. L'absence de douche simplifie les conditions aux limites du problème thermique et permet de confronter plus facilement les calculs avec les mesures. Après une brève description des conditions expérimentales, les résultats seront présentés sous la forme d'une comparaison des températures mesurées et calculées.

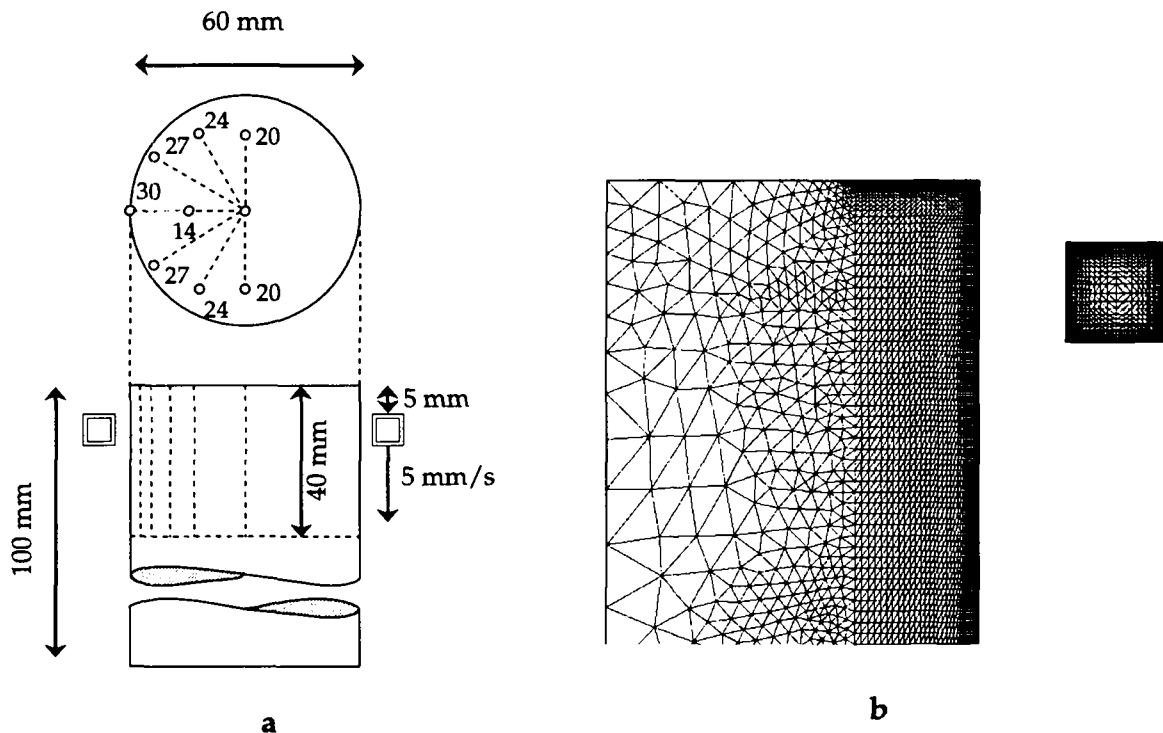


Fig. 3.15 : Position des thermocouples dans la pièce chauffée par induction (a) et maillage utilisé pour simuler le même cas (b).

3.4.1 Montage expérimental

La configuration choisie pour le test est illustrée à la figure 3.15 (a). La pièce chauffée est un cylindre en acier Ck45 de 60 mm de diamètre et de 100 mm de hauteur. Huit thermocouples sont insérés verticalement dans des trous de 1 mm de diamètre percés sur une profondeur de 40 mm. Comme pour les mesures décrites au paragraphe 3.2.1, le contact thermique est assuré par une brasure à

l'argent. Les positions choisies sont le centre et des rayons de 14, 20 et 24 et 27 mm. Un thermocouple supplémentaire est soudé à la surface dans le même plan horizontal.

Le chauffage est réalisé par un inducteur torique à section carrée soumis à une tension sinusoïdale d'une fréquence de 10 kHz. Après un préchauffage statique de 0.8 s, l'inducteur est déplacé verticalement à une vitesse de 5 mm/s sur une distance de 80 mm. A la fin de la course, l'alimentation en courant est maintenue pendant 0.8 s afin de chauffer le bas de la pièce également. Le refroidissement est effectué à l'air libre. Les températures et la tension efficace sont enregistrées pendant toute la durée de l'expérience.

3.4.2 Mise en oeuvre du modèle

Le maillage utilisé dans le calcul est constitué d'environ 8000 noeuds et 16000 éléments triangulaires (v. Fig. 3.15 (b)). L'épaisseur des éléments en surface a été déterminée en fonction de la profondeur de pénétration, dont la limite inférieure est estimée à 70 μm pour les conditions les plus défavorables (basse température). L'épaisseur de 20 μm utilisée en surface assure un minimum de 3 noeuds dans la zone de pénétration. La taille des éléments augmente avec la profondeur selon une progression géométrique.

Les conditions aux limites sont décrites par un flux imposé représentant les pertes par radiation et convection naturelle. Le flux est calculé selon la relation empirique (Chaboudez, 1994) :

$$q = -2.5 (T_s - T_{\text{air}})^{4/3} - 0.4 \sigma_B (T_s^4 - T_{\text{air}}^4) \quad 3.66$$

où T_s et T_{air} sont respectivement la température de la surface et de l'air ambiant en K.

Le voltage utilisé dans les calculs électromagnétiques est celui mesuré au cours de l'essai. Un facteur multiplicatif de 0.91 a toutefois dû être introduit pour tenir compte des pertes du système. Les variations des propriétés physiques du matériau avec la température sont prises en compte, de même que la chaleur latente libérée par les transformations de phase. Les valeurs utilisées ainsi que les conditions détaillées des calculs sont données dans l'annexe 7.3.

3.4.3 Résultats et discussion

Les températures mesurées dans la pièce et calculées aux mêmes positions sont présentées à la figure 3.16. Il faut signaler que les mesures ont été réalisées en présence d'un champ magnétique intense, ce qui peut engendrer des perturbations du signal détecté par les thermocouples. En profondeur, les perturbations sont toutefois limitées par l'effet de peau. (La profondeur de pénétration est inférieure à 1 mm). Cet effet est bien visible sur la figure où les écarts entre les températures mesurées et calculées sont plus importants en surface. Etant donné le gradient thermique élevé (jusqu'à environ 100°C/mm près de la surface), l'incertitude sur la position des thermocouples dans leur cavité (estimée à ± 0.2 mm) conduit à une erreur de mesure relativement importante ($\pm 20^\circ\text{C}$). Les trous provoquent en outre des perturbations du champ thermique dont l'ampleur est difficile à quantifier. Compte tenu de ces considérations, on peut conclure que les écarts observés entre les courbes expérimentales et simulées sont de l'ordre de grandeur de l'erreur de mesure.

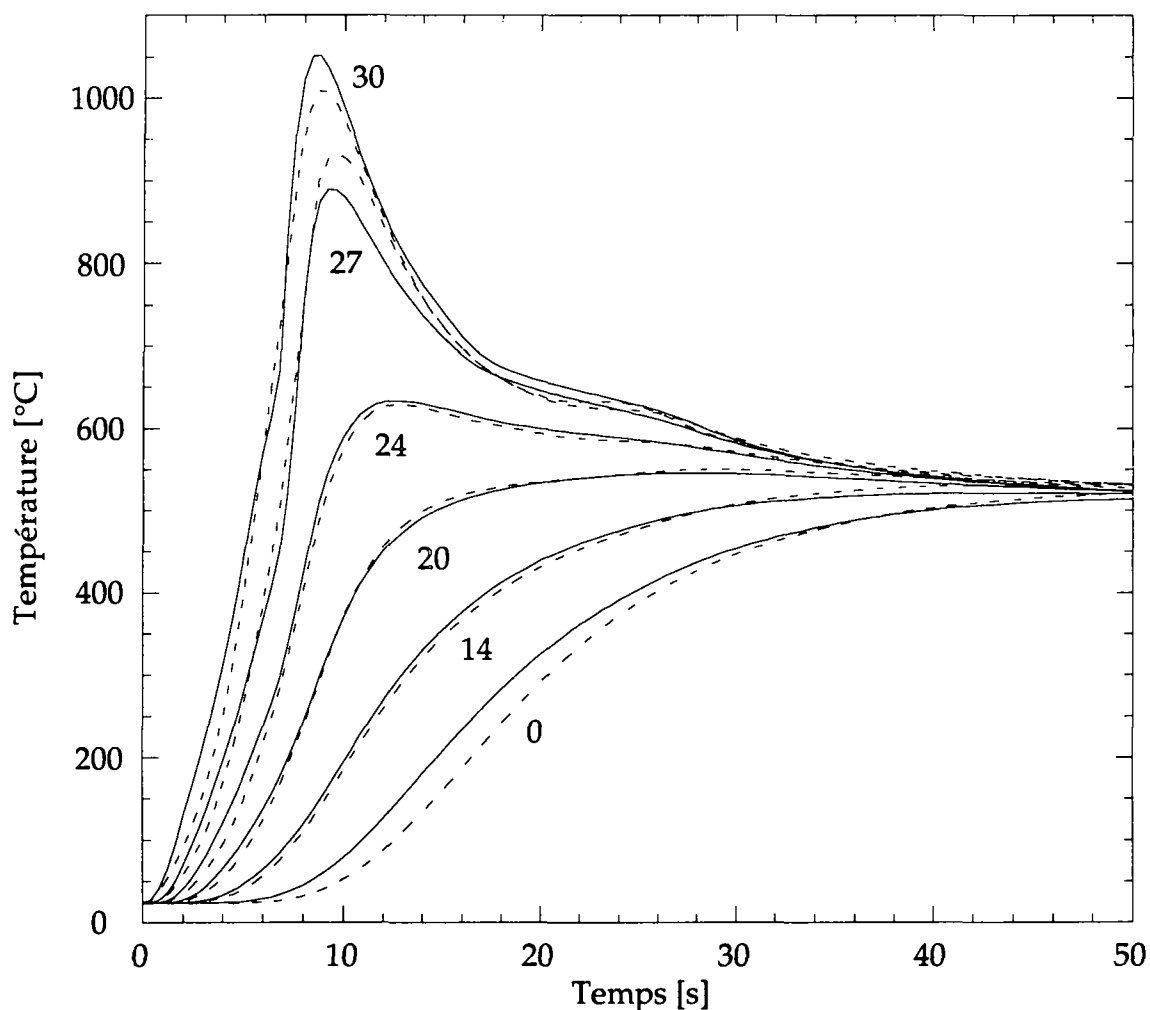


Fig. 3.16 : Températures mesurées (traits continus) et calculées (traits tillés) dans la pièce chauffée au défilé par induction. Les nombres indiquent la position radiale des thermocouples en mm.

3.5 Application à la trempe au défilé d'une pièce cylindrique

Le modèle a ensuite été appliqué à un cas de trempe au défilé d'une pièce cylindrique de faible diamètre. Ce cas sera traité brièvement car il ne constitue qu'une étape vers l'application à une pièce plus complexe.

3.5.1 Conditions expérimentales

Le traitement thermique décrit ici a été réalisé par D. Mari, C. Chaboudez et A. Gilliéron (1993) dans les ateliers de l'école d'ingénieurs d'Yverdon (EINEV). Le travail expérimental retenu consiste essentiellement à des mesures du profil de dureté dans la pièce après traitement (Gilliéron, 1993).

La pièce traitée est un cylindre de 120 mm de haut et 12 mm de diamètre en acier Ck45. Le chauffage est réalisé par un inducteur de section rectangulaire soumis à une tension sinusoïdale d'une fréquence de 700 kHz. Une douche de 20 mm de hauteur située 5 mm sous l'inducteur effectue la trempe après le passage de l'inducteur. Le système inducteur-douche se déplace le long de la pièce avec une vitesse de 4 mm/s.

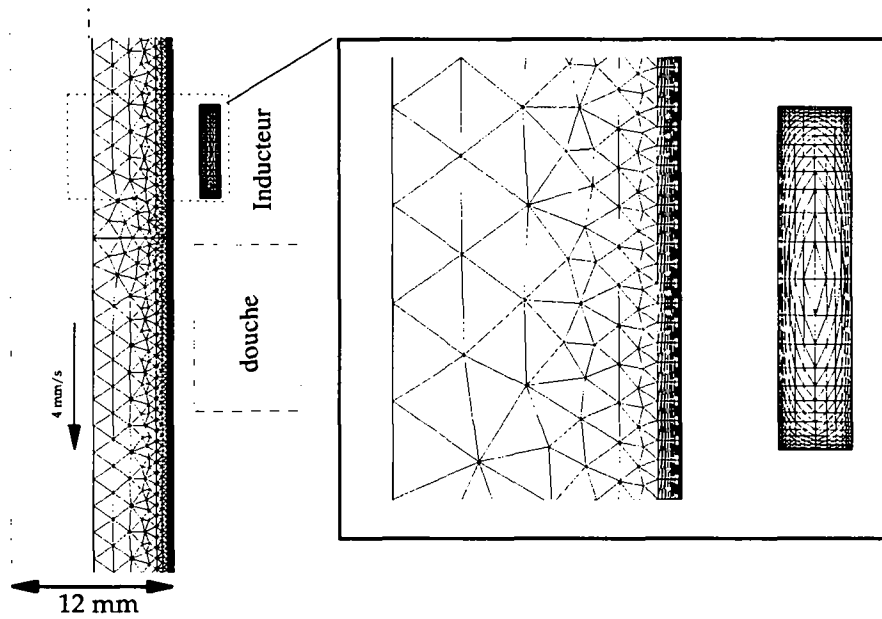


Fig. 3.17 : Extraits du maillage utilisé pour modéliser le traitement thermique par induction d'une pièce cylindrique de 12 mm de diamètre.

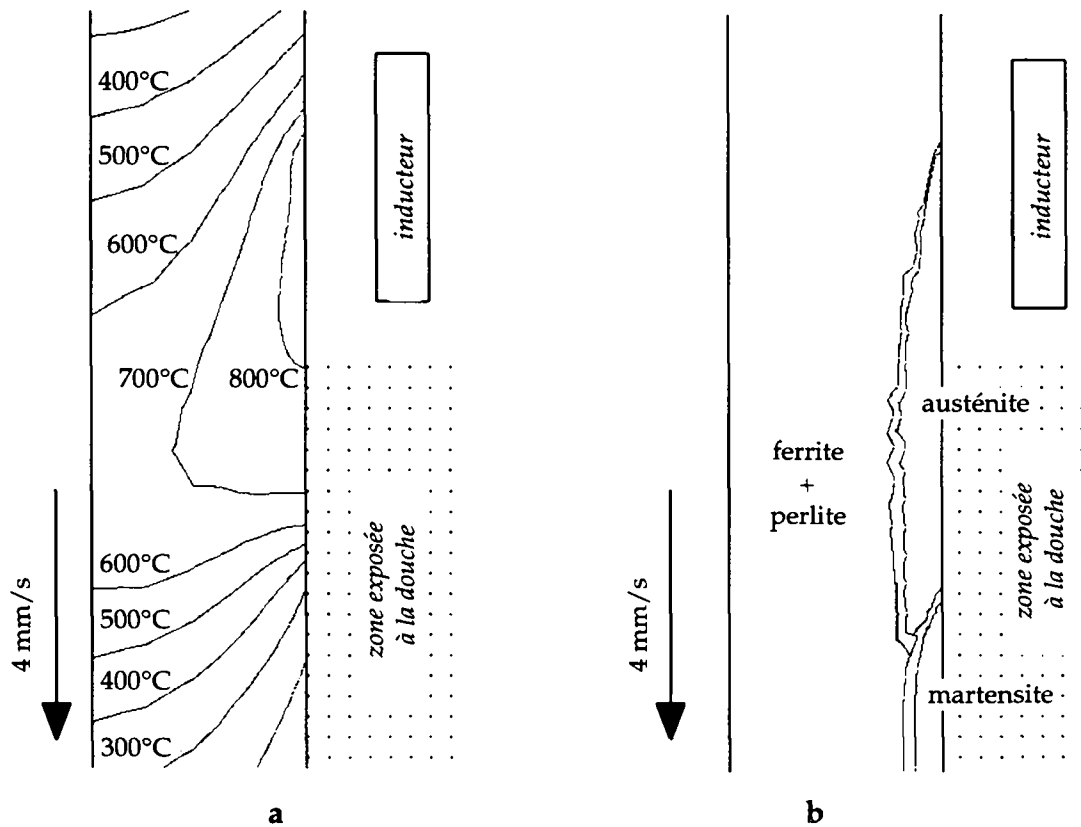


Fig. 3.18 : Champ de température (a) et distribution des phases (b) dans une pièce cylindrique de 12 mm de diamètre en acier Ck45 subissant un traitement thermique par induction.

3.5.2 Résultats et discussion

Le calcul a été réalisé avec le maillage présenté à la figure 3.17. Les éléments en surface possèdent une taille d'environ $10\ \mu\text{m}$, ce qui correspond approximativement à la profondeur de pénétration pour les conditions les plus défavorables (valeurs déduites avec la relation 2.57 pour les propriétés électromagnétiques à 20°C). Les valeurs du coefficient de transfert mesurées à la section 3.2 pour le cas de la trempe statique (Fig. 3.7) sont utilisées comme conditions aux limites pour la surface exposée à l'aspersion. Dans les autres régions, une condition de type naturel est appliquée. Le flux imposé est donné par la relation 3.66 qui décrit les échanges radiatifs et convectifs. Sur l'axe de symétrie ainsi que sur les faces supérieures et inférieures, des conditions de type adiabatique sont appliquées. Les propriétés physiques de l'acier Ck45 et les paramètres détaillés du calcul sont donnés dans l'annexe 7.3.

Les résultats de la simulation sont présentés à la figure 3.18 qui illustre le champ de température (à gauche) et la distribution des phases (à droite). Ce résultat correspond au régime quasi-stationnaire obtenu après une durée de traitement d'environ 3 s. On observe une zone d'austénite située sous l'inducteur et près de la surface qui se transforme ultérieurement en martensite sous l'action de la douche (c.f. zones inférieures). Le coeur de la pièce reste quant à lui ferrito-perlitique. Les lignes doubles indiquées sur la figure délimitent les régions contenant plusieurs phases. Leurs fractions respectives sont fournies par le calcul mais n'ont pas été représentées sur la figure pour des raisons de clarté. La dureté après traitement a été calculée par la loi de mélange décrite au paragraphe 3.1.2 (éq. 3.34). Le résultat peut être comparé au profil mesuré dans la pièce à la figure 3.19. On observe un accord très satisfaisant avec notamment une profondeur de trempe de 0.8 mm dans les deux cas. Une étude plus détaillée nécessiterait toutefois de placer des thermocouples dans la pièce et de confronter les évolutions de températures mesurées et calculées. Ce travail a été effectué pour le cas traité dans la section suivante.

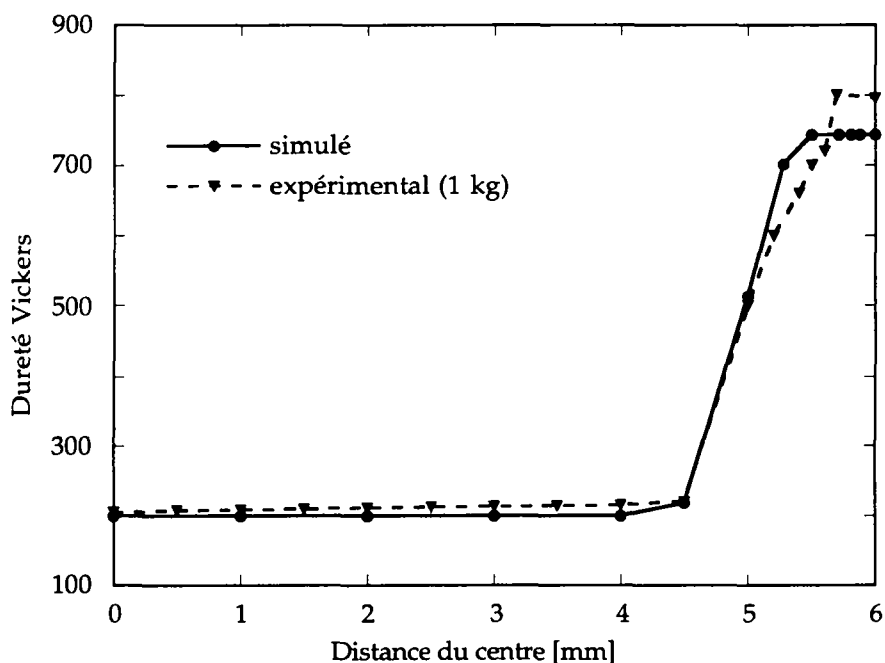


Fig. 3.19 : Profils de dureté expérimentale et calculée dans la pièce après traitement.

3.6 Application à la trempe au défilé d'une pièce industrielle non cylindrique

Au cours des paragraphes précédents, nous avons mis en place les différentes données nécessaires à la simulation du procédé de traitement thermique par induction. La perméabilité magnétique et le coefficient de transfert caractérisant la douche ont été déterminés par des essais spécifiques. Par ailleurs, les calculs électromagnétiques et leur couplage avec le module thermique ont été validés expérimentalement, de même que le principe d'additivité utilisé pour la prédiction des cinétiques de transformation de phase. Le modèle a été appliqué au cas préliminaire d'une pièce mince de forme cylindrique. Nous sommes donc à même de passer au cas d'une pièce industrielle plus complexe.

La pièce choisie est un composant d'une machine d'emballage automatique de la société Bobst S.A. Il s'agit d'une pièce d'articulation présentant une symétrie de révolution avec une collerette dans sa partie centrale (v. Fig. 3.20). Cette zone, tout comme la partie supérieure de la pièce, est soumise à des frottements importants qui nécessitent un durcissement de surface. Celui-ci est réalisé industriellement par un procédé de traitement thermique par induction et trempe au défilé.

La géométrie axisymétrique mais non cylindrique ainsi que la présence de la douche permettra de tester le fonctionnement du modèle dans un cas complexe. Les comparaisons porteront sur la thermique, la répartition des phases et les profils de dureté.

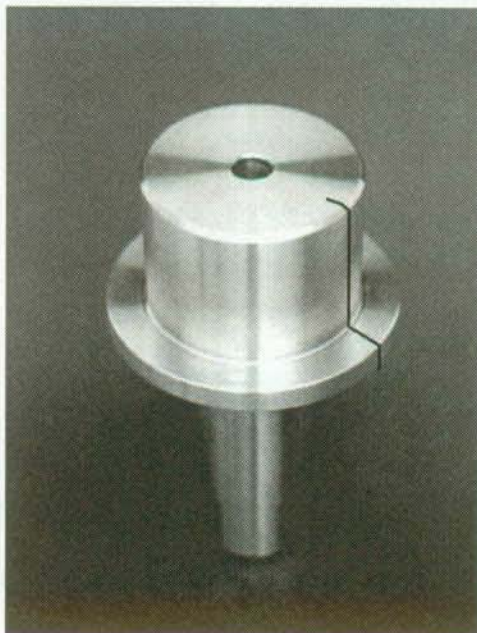


Fig. 3.20 : Pièce industrielle choisie comme application du modèle. La zone supérieure et la collerette, dont les profils sont marqués d'un trait noir, doivent être durcies superficiellement sur une profondeur de 4 mm.

3.6.1 Montage et travail expérimental

Les mesures ont été réalisées sur le site de production de la société Bobst S.A., qui a mis à disposition l'ensemble de l'équipement de trempe au défilé. La pièce traitée a été usinée à partir de barreaux en acier 42CrMo4 dont la composition est indiquée dans le tableau 3.3. Sa géométrie et celle de l'inducteur sont illustrées à

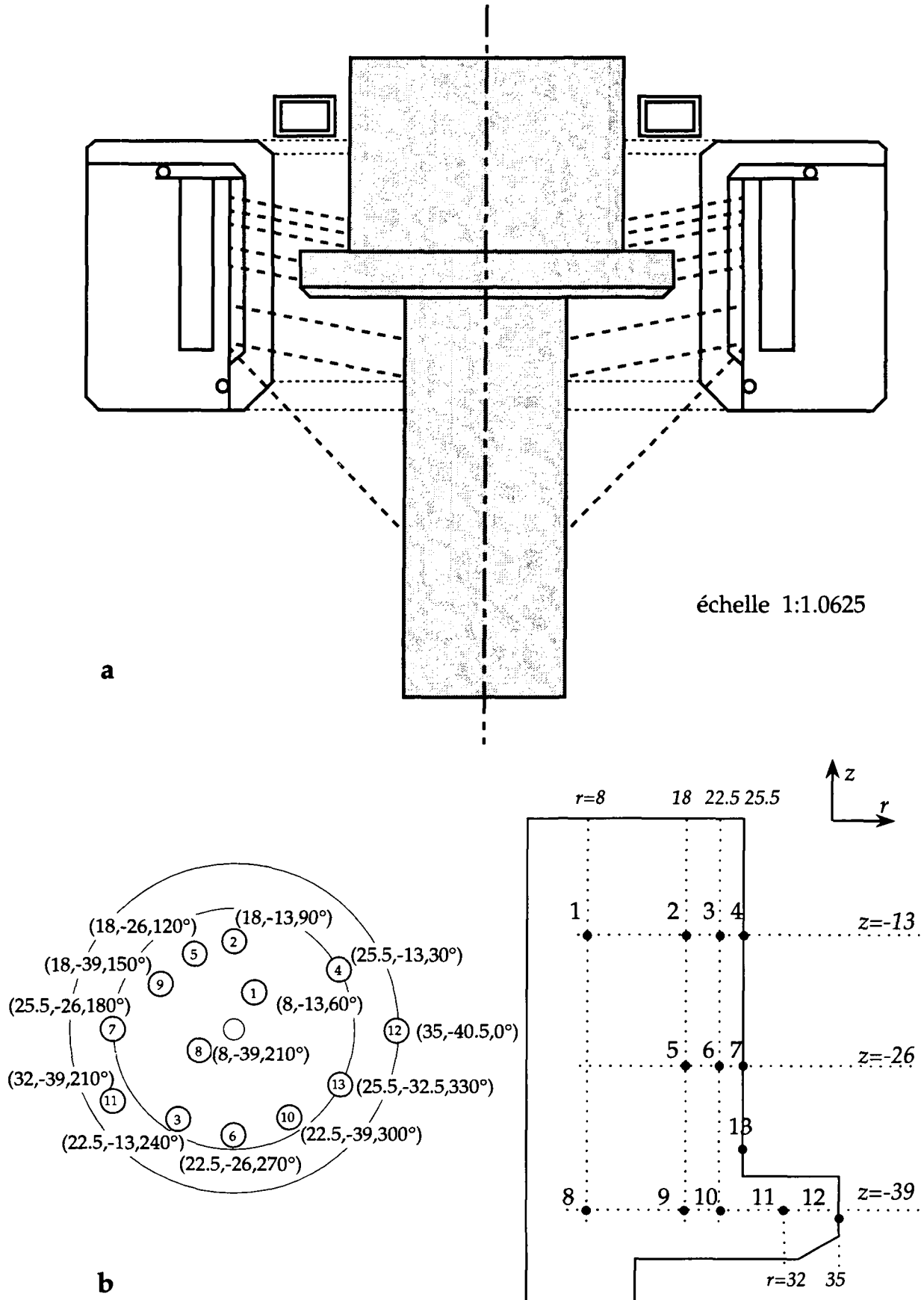


Fig. 3.21 : Schéma du procédé (a) et position des thermocouples (b).

la figure 3.21. Comme dans les mesures précédentes, des thermocouples ont été insérés verticalement dans des trous circulaires et brasés afin d'établir un bon contact thermique avec la matière. Les 13 thermocouples ont été répartis dans la région traitée de la pièce, en concentrant les mesures dans la collerette. Le traitement de cette zone est en effet particulièrement difficile à contrôler et constitue donc un point de comparaison intéressant.

Éléments d'alliage	C	Si	Mn	P	S	Cr	Mo
Teneur en % pds	0.38 - 0.45	0.15 - 0.40	0.50 - 0.80	< 0.035	< 0.035	0.90 - 1.20	0.15 - 0.30

Tableau 3.3 : Composition de l'acier 42CrMo4 (selon fabriquant).

Le chauffage est réalisé par un inducteur à section carrée soumis à une tension sinusoïdale d'une fréquence de 8.2 kHz. La position initiale (illustrée sur la figure 3.22) est maintenue pendant 4 s après la mise sous tension afin d'austénitiser la zone de la collerette. L'inducteur est ensuite déplacé verticalement vers le haut, à une vitesse de 6.7 mm/s et sur une distance de 33 mm.

La douche utilisée pour la trempe est solidaire de l'inducteur et effectue donc le même déplacement. Les points d'impact des jets sont distribués sur une zone de 30 mm environ, dont le centre est situé 31 mm sous le bas de l'inducteur. Les remous remontent toutefois jusqu'à celui-ci, augmentant de ce fait la surface en contact avec le liquide de trempe. Le liquide utilisé est une solution aqueuse contenant 14% d'Aquaquench. Le débit d'aspersion est de 45 l/min.

Le traitement a ensuite été répété sur une pièce sans thermocouples destinée aux observations métallographiques. Une macrographie de la section longitudinale a été effectuée dans le but de révéler les régions trempées. Un échantillon d'environ 15x20x2 mm³ a en outre été prélevé sous la surface par électroérosion afin d'observer les microstructures de la zone trempée, de la région de transition et du coeur de la pièce. Un profil de trempe a également été déterminé par des mesures de microdureté à différentes profondeurs sous la surface.

3.6.2 Mise en oeuvre du modèle

Le maillage utilisé pour le calcul est illustré à la figure 3.22 (a). Il comprend 3517 noeuds et 6667 éléments triangulaires. L'épaisseur des éléments en surface est d'environ 30 µm, ce qui correspond à 1/3 de la profondeur de pénétration dans les conditions les plus défavorables.

Les conditions aux limites sont relativement difficiles à définir en raison de la présence de la douche et de son déplacement. Un paramètre, f_{douche} , a été défini afin de caractériser l'exposition d'un point de la surface au liquide de trempe. Il est représenté à la figure 3.22 (b) en fonction de la position du point par rapport à la douche. Le paramètre vaut 1 si le point est situé dans la zone d'impact des jets et tend vers zéro selon une fonction exponentielle décroissante dans les régions avoisinantes. Il permet ainsi de prendre en compte l'influence des remous et du ruissellement. Le paramètre f_{douche} est calculé pour tous les noeuds de surface susceptibles d'être aspergés (indiqués par "eau-air" sur la figure 3.22 (a)). Les paramètres δ_i et δ_s caractérisant les tailles des zones de remous et de

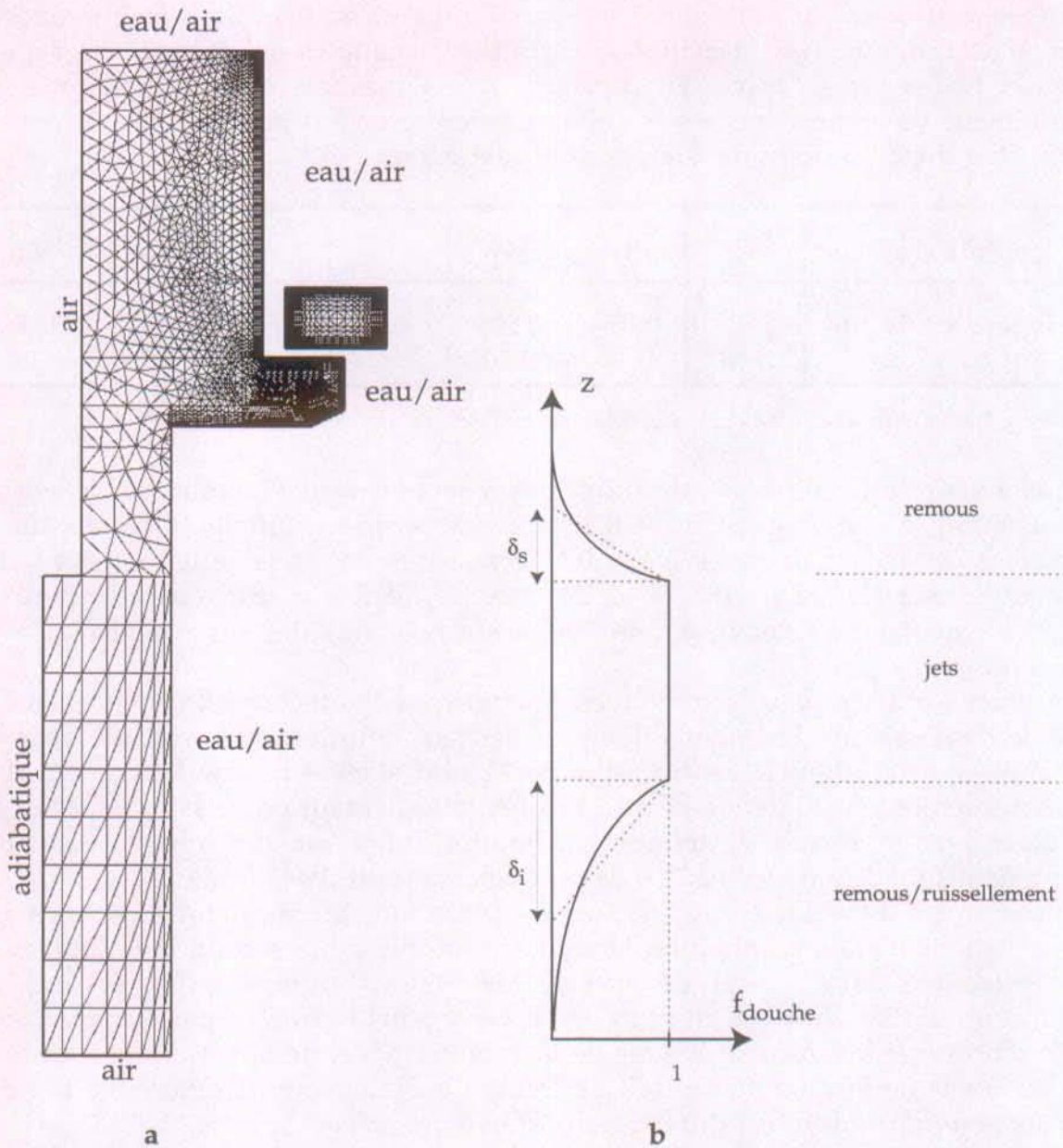


Fig. 3.22 : Maillage utilisé dans la simulation (a) et définition de la fonction f_{douche} caractérisant l'exposition de la pièce au liquide de refroidissement (b).

ruissellement ont été estimés respectivement à 40 mm et 30 mm. Le paramètre f_{douche} intervient dans les conditions aux limites de la façon suivante :

$$\kappa \frac{\partial T}{\partial n} = -h_{eau/air} (T_s - T_{liq}) \quad \text{avec} \quad 3.67$$

$$h_{eau/air} = f_{douche} \cdot h_{douche}(T_s) +$$

$$(1 - f_{douche}) \frac{16 (T_s - T_{air})^{4/3} + 0.6 \sigma_B [(T_s + 273.15)^4 - T_{air}^4]}{T_s - T_{liq}}$$

où T_s , T_{liq} et T_{air} sont respectivement les températures de la surface, du liquide de trempe et de l'air ambiant en °C. $h_{douche}(T_s)$ est la fonction déterminée à la

section 3.1 pour la variation du coefficient de transfert avec la température de surface (v. Fig. 3.7). Sur le contour indiqué par "air" à la fig. 3.22, le coefficient d'échange est calculé avec un paramètre f_{douche} nul.

Le voltage utilisé dans les calculs électromagnétiques est celui mesuré en fonction du temps au cours de l'essai. Le facteur multiplicatif de la tension - qui représente les pertes dans le système - a été évalué à 0.89. Les propriétés physiques de l'acier et les paramètres détaillés du calcul figurent dans l'annexe 7.3.

3.6.3 Résultats et discussion

Résultats expérimentaux

La macrographie de la figure 3.23 révèle clairement la zone affectée par le traitement thermique. On distingue dans la partie supérieure de la pièce, une zone trempée dont l'épaisseur de 4 mm environ est constante sur toute la hauteur. La région de la collerette est plus fortement trempée, mais avec une profondeur diminuant dans la partie inférieure. Ce résultat répond aux exigences de fabrication.

La figure 3.24 montre plus clairement la zone trempée dans la partie supérieure de la pièce. On peut observer une structure en bande parallèle à la surface, générée lors de la mise en forme par l'alignement des inclusions et inhomogénéités dans la direction d'élongation (phénomène connu sous le nom anglais de *Banding* (Brooks, 1992)). Des inclusions sont observées dans l'ensemble de la pièce avec une densité réduite près de la surface. Cette diminution est expliquée par le processus de maturation et de dissolution engendré par les températures élevées atteintes en surface pendant le traitement.

Les micrographies de la zone traitée et du coeur de la pièce sont présentées respectivement aux figures 3.26 et 3.27. La couche trempée montre clairement une structure martensitique en lattes, alors que le coeur est constitué d'une microstructure bainitique. Cette dernière correspond à l'état de livraison de l'acier. La micrographie de la zone de transition (Fig. 3.25) montre quant à elle un passage relativement abrupt entre les deux microstructures. Une couche de transition d'environ 200 μm est toutefois observée. Elle est constituée d'un mélange des phases bainitiques et martensitiques.

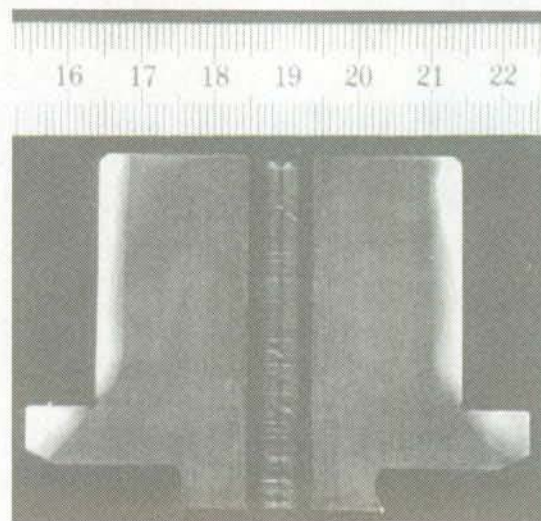


Fig. 3.23: Macrographie de la pièce traitée.

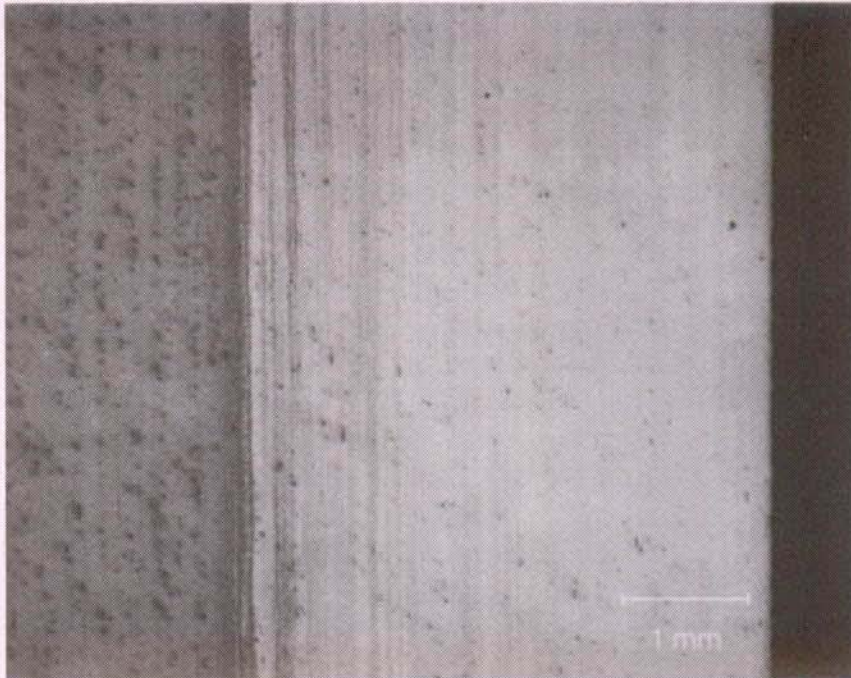


Fig. 3.24 : Vue d'ensemble de la couche obtenue.



Fig. 3.25 : Zone de transition.



Fig. 3.26 : Microstructure dans la couche durcie.



Fig. 3.27 : Microstructure au coeur de la pièce (environ 6 mm sous la surface).

Résultats de simulation

La figure 3.28 montre la carte de température et la distribution du champ magnétique dans la pièce en cours de traitement. Ce résultat a été obtenu par simulation pour un temps de 6.5 s correspondant à la moitié du trajet effectué par le système inducteur-douche. On peut remarquer que les isothermes ne présentent pas de symétrie par rapport au plan médian de l'inducteur. Cet effet provient du déplacement de l'inducteur ainsi que du refroidissement effectué par la douche dans la partie inférieure. La même observation s'applique à l'intensité

du champ magnétique représenté sur la moitié gauche de la figure. L'absence de symétrie provient ici du champ thermique qui introduit des gradients dans les propriétés électromagnétiques. La région de la collerette, et plus particulièrement l'arête supérieure externe, paraît fortement soumise à l'influence de l'inducteur. On observe en effet un champ magnétique encore intense dans cette zone, alors que l'inducteur est déjà éloigné. La concentration des lignes de champ dans les zones saillantes est à l'origine de cet "effet de coin".

La zone trempée prédite par la simulation est présentée à la figure 3.29. Le modèle prédit la formation en surface d'une couche martensitique de 4 à 6 mm d'épaisseur et le maintien d'une microstructure bainitique au coeur. L'épaisseur de la zone trempée obtenue varie légèrement avec la hauteur. Elle est d'environ 4 mm dans les deux tiers supérieurs de la zone cylindrique mais atteint près de 6 mm dans la zone située au-dessus de la collerette.

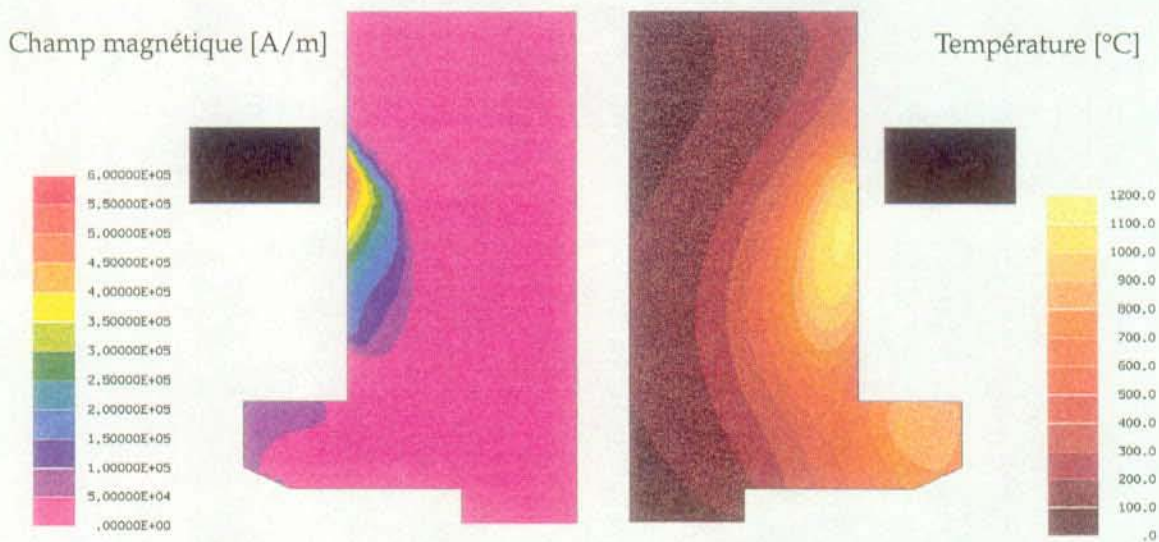


Fig. 3.28 : Distribution du module du champ magnétique (gauche) et de la température (droite) dans la pièce après 6.5 s de traitement.

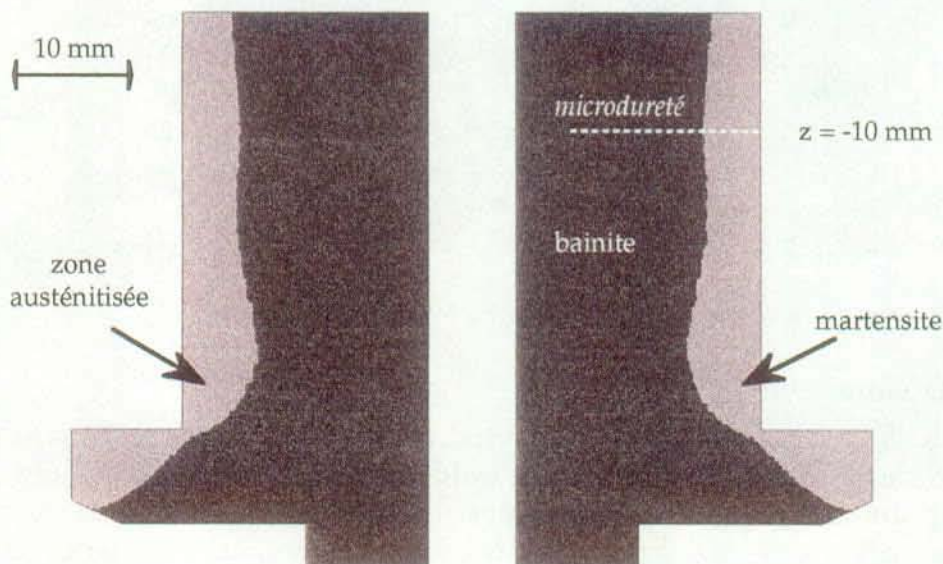


Fig. 3.29 : Distribution des phases obtenues par simulation. Zone austénitisée durant le traitement (gauche) et zone trempée (droite).

La figure 3.29 montre également que la région austénitisée (la partie de gauche a été obtenue par la superposition des zones austénitisées à différents temps) correspond exactement à la zone durcie. Cette observation signifie que la cinétique des transformations de phase au refroidissement ne joue qu'un rôle mineur dans le cas étudié. En effet, les vitesses de refroidissement atteintes dans les régions austénitisées sont toujours suffisantes pour transformer l'austénite en martensite et éviter la formation d'autres phases plus stables. La microstructure finale dépend donc essentiellement de l'avancement de l'austénitisation au moment où la température maximale est atteinte.

Comparaisons et discussion

Une première comparaison entre résultats expérimentaux et simulés peut être effectuée sur la base des températures mesurées par les 13 thermocouples et celles obtenues avec le modèle aux mêmes positions (Fig. 3.30). L'accord est en général très satisfaisant à l'exception de quelques points (les thermocouples 6, 11 et 13 en particulier). Les remarques effectuées au paragraphe 3.4.3 au sujet des erreurs possibles sur les mesures de température s'appliquent ici également. On peut notamment évoquer l'incertitude sur la position des thermocouples dans leur logement, la perturbation provoquée par le champ magnétique et d'éventuels problèmes de contact thermique liés à la brasure. Ce dernier effet est probablement à l'origine de l'écart important observé pour le thermocouple 11.

La deuxième comparaison porte sur les zones trempées. Les profils de dureté expérimentaux et simulés peuvent être comparés à la figure 3.31 où sont représentées les valeurs obtenues dans le plan horizontal $z = -10$ mm (v. Fig. 3.29). Dans cette région de la pièce, les profondeurs de trempé obtenues par simulation correspondent bien aux valeurs expérimentales. On retrouve naturellement le même accord sur les figures 3.23 et 3.29. Ces figures montrent en outre que la zone trempée est parfaitement prédite dans la région de la collerette. Elles révèlent en revanche un accord moins satisfaisant pour la zone située au-dessus de la collerette ($z \cong -30$ mm), où la simulation prédit une profondeur de 6 mm, alors que la macrographie indique une couche durcie de 4 mm.

L'écart observé dans cette zone ne provient certainement pas de la cinétique des transformations de phase. Le modèle métallurgique fournit en effet des profondeurs de trempé correctes pour la partie supérieure et la zone de la collerette. A l'exception du thermocouple N°11, manifestement victime d'un mauvais contact thermique, ces régions montrent en outre un excellent accord sur les températures. Il semble donc que la profondeur de trempé est correctement prédite si la thermique est bien décrite.

L'écart entre la simulation et l'expérience semble donc davantage lié à la prédiction de la température. Cette hypothèse semble confirmée par les températures trop élevées prédites aux points 13 et 6 situés à proximité de la région dont la zone austénitisée est surévaluée.

L'erreur sur les températures calculées peut provenir d'une part des coefficients de transfert qui ont été déduits pour une configuration statique et cylindrique. Le mouvement de la douche, de même que la présence de la collerette, modifie certainement l'écoulement par rapport à la configuration étudiée. En particulier, les turbulences provoquées par la collerette augmentent certainement le pouvoir refroidissant de la douche par rapport à un cas cylindrique. Cet effet pourrait

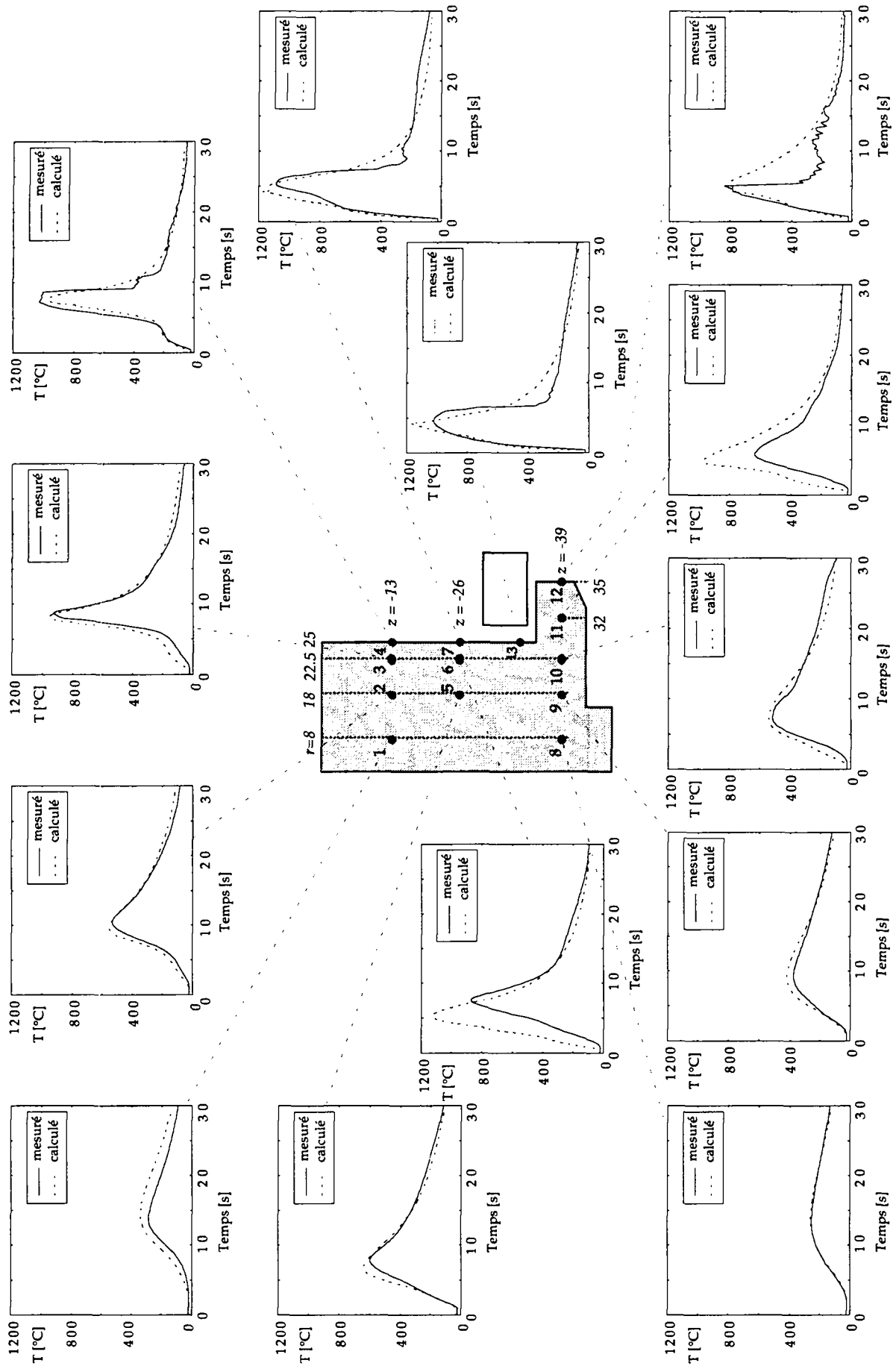


Fig. 3.30 : Comparaison des températures expérimentales et simulées.

expliquer la surévaluation de la zone austénitisée et trempée dans la région située au-dessus de la collerette. D'autre part, il faut citer également le choix relativement arbitraire des paramètres δ_i et δ_s caractérisant les remous aux abords de la douche.

En résumé, l'écart observé sur la profondeur de trempé dans la région située au-dessus de la collerette est certainement lié aux conditions aux limites utilisées dans la simulation. Les hypothèses assez restrictives du modèle de transformation de phase (l'influence de la microstructure initiale et des contraintes n'est pas prise en compte, de même que le principe d'additivité n'est exact que pour des conditions de germination et de croissance particulières), ne semblent donc pas constituer une limitation pour le cas étudié.

Finalement, si l'on tient compte de la complexité du procédé et des phénomènes physiques qui s'y déroulent, on peut juger que l'accord général entre la simulation et l'expérience est tout à fait satisfaisant.

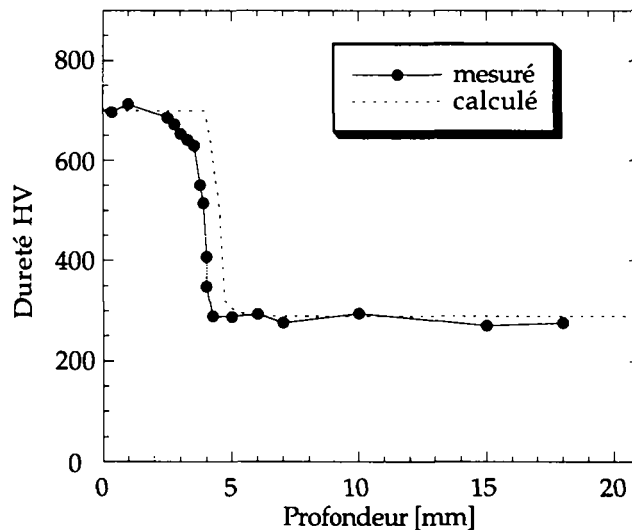


Fig. 3.31 : Profils de dureté expérimental et simulé.

3.7 Conclusion du chapitre 3

Un logiciel a été développé dans le but de simuler le procédé de traitement thermique par induction et trempé au défilé. Il permet de décrire les phénomènes électromagnétiques, la thermique, la radiation et les transformations de phase qui ont lieu durant le traitement. Son application à des cas réels a nécessité de déterminer préalablement différents paramètres physiques, tels que le coefficient de transfert de la douche, la perméabilité magnétique et la cinétique des transformations de phase à l'état solide. Les points suivants peuvent être dégagés de ces travaux préliminaires :

- Une procédure basée sur des méthodes inverses et des mesures de température au sein d'une pièce doucée a permis de caractériser le refroidissement d'une douche typique du procédé pour différents débits et concentrations du liquide de trempé. Ces données ont été reprises dans la modélisation où elles ont permis de décrire correctement l'influence de la douche dans le procédé. Néanmoins, la procédure mise en place est appelée à être reproduite si le cas traité fait intervenir un modèle de douche différent ou si les paramètres d'aspersion sont plus éloignés des conditions étudiées.

- Les essais dilatométriques isothermes et anisothermes ont permis d'étudier le fonctionnement du principe d'additivité. L'accord entre les prédictions et les résultats expérimentaux a été jugé suffisant pour appliquer la méthode au procédé de trempe au défilé.
- Les mesures de perméabilité magnétique et les diagrammes TTT déterminés expérimentalement se sont avérés adéquats pour la prédiction de la température et de la zone trempée dans le procédé (v. remarques ci-dessous).

A partir de ces données expérimentales, le modèle a été appliqué à 3 cas de chauffage par induction. La comparaison entre simulation et expérience conduit aux observations suivantes :

- L'excellent accord entre résultats simulés et expérimentaux observé dans le cas du cylindre chauffé par induction a montré que les modèles utilisés pour décrire le chauffage par induction et la thermique fonctionnent correctement.
- L'application à la trempe au défilé d'une pièce cylindrique mince a montré que le modèle est capable de prédire des profondeurs de trempe correcte pour le cas de géométries simples.
- Le bon accord entre résultats simulés et expérimentaux pour le cas de la pièce industrielle a permis de vérifier le fonctionnement du logiciel pour une géométrie difficile. Les écarts observés, notamment sur la profondeur de trempe, proviennent principalement des conditions aux limites mal connues dans les zones exposées au remous et au ruissellement, en particulier aux alentours de la collerette.
- Pour les cas étudiés, qui font intervenir un cycle thermique rapide, la microstructure finale dépend davantage de l'épaisseur de la couche austénitisée que de la cinétique des transformations de phase au refroidissement. Les vitesses de refroidissement - élevées même en profondeur - conduisent en effet systématiquement à la formation de martensite dans les régions austénitisées.

Malgré le bon accord général, des améliorations pourraient être apportées au présent logiciel. Le modèle de transformations de phase à l'état solide ne tient par exemple pas compte de l'influence de l'état de contrainte sur la cinétique des transformations, de même qu'il néglige l'effet de la microstructure initiale (taille de grain, espacement interlamellaire dans la perlite). La description des conditions aux limites pourrait également être améliorée en cherchant à déterminer le coefficient de transfert dans les régions voisines de la douche.

De manière générale, le logiciel développé ici est un outil très utile pour mettre au point et optimiser un procédé de traitement thermique par induction. En particulier, la formulation mixte en éléments finis et éléments frontière - sans maillage dans l'air ambiant - permet de traiter correctement et sans difficultés les cas de chauffage par induction avec déplacement de l'inducteur.

4. APPROCHE MICROSCOPIQUE - ÉTUDE DE L'AUSTÉNITISATION D'UN ACIER HYPOEUTECTOÏDE

Dans le chapitre 3, les transformations de phase ont été abordées à l'échelle du procédé, par un calcul de la cinétique basé sur la thermique locale et des diagrammes TTT et TTA. Le modèle présentait l'avantage de fournir l'évolution des fractions de phase et des duretés pour l'ensemble de la pièce. Toutefois, ce type d'approches reste assez éloigné des phénomènes physiques qui sont à la base des transformations et ne permet pas facilement de prendre en compte l'influence de la microstructure initiale sur la cinétique de transformation.

Dans l'approche microscopique abordée ici, les transformations de phase sont décrites à l'échelle de la microstructure. Les cinétiques de transformation sont déduites de la résolution de l'équation de diffusion pour le soluté et du bilan de masse effectué aux interfaces. Cette approche a été appliquée aux transformations de phase au chauffage dans les aciers hypoeutectoïdes. Le choix de ces transformations a été motivé par l'importance que revêt l'étape d'austénitisation dans les procédés de traitement thermique. La taille du grain et la distribution du carbone dans l'austénite à la fin du chauffage influencent en effet de manière significative les cinétiques des transformations de phase au refroidissement et par conséquent les propriétés finales de l'acier. Par ailleurs, dans les procédés de traitement de surface tels que le traitement thermique par induction, il a été observé que les profondeurs de trempe sont principalement dictées par l'avance de l'austénitisation au début du refroidissement. La prédiction d'une cinétique d'austénitisation réaliste et dépendant de la microstructure initiale présente donc un intérêt réel pour la modélisation des traitements thermiques.

Dans leur état normalisé, les aciers hypoeutectoïdes sont constitués d'une microstructure ferrito-perlitique. L'austénitisation d'une telle structure se déroule en deux étapes. La première est la transformation de la perlite en austénite qui a lieu juste au-dessus de la température eutectoïde. La seconde est constituée de la dissolution des zones ferritiques qui se poursuit jusqu'à la température Ae_3 (ligne $(\alpha+\gamma)/\gamma$ du diagramme de phases) et au-delà. A vitesse de chauffage modérée, la cinétique des deux transformations est principalement dictée par la diffusion du carbone dans l'austénite. Toutefois, les distances typiques de diffusion et par conséquent les cinétiques de transformations sont très différentes dans les deux cas. La cinétique de dissolution de la perlite est en effet liée à l'espacement interlamellaire, qui est généralement inférieur à $1\ \mu\text{m}$, alors que la dissolution de la ferrite dépend de la taille des zones ferritiques dont la valeur typique est d'environ $10\ \mu\text{m}$. Cette différence est à l'origine du développement de deux modèles distincts.

La dissolution de la perlite a été décrite avec un modèle d'éléments finis bidimensionnel permettant de calculer le champ de concentration du carbone dans l'austénite à l'avant d'une structure régulière de lamelles de ferrite et de cémentite. La taille du domaine de calcul est de l'ordre de $0.2\ \mu\text{m} \times 2\ \mu\text{m}$. La transformation de ferrite en austénite a quant à elle été décrite par un modèle de volumes finis bidimensionnel permettant de calculer le champ de concentration du carbone dans une structure constituée d'îlots de ferrite dans une matrice austénitique (cette dernière étant issue des anciennes zones de perlite). Ce modèle traite des domaines d'environ $20\ \mu\text{m} \times 20\ \mu\text{m}$. Il permet également de décrire le

processus d'homogénéisation des concentrations qui se poursuit après la transformation ferrite → austénite.

L'état de l'austénite formée au chauffage n'est pas seulement caractérisé par la distribution des concentrations des éléments d'alliage. La taille du grain, qui évolue de manière importante au cours d'un maintien prolongé à haute température, joue également un rôle prépondérant dans les transformations au refroidissement. Par exemple, elle influencera fortement la proportion des différentes morphologies de ferrite (ferrite équiaxe, de Widmanstätten et aciculaire) et, pour des refroidissements plus rapides, le début de la transformation martensitique.

Dans ce travail, la croissance du grain austénitique a d'abord été abordée sous l'angle d'une comparaison entre deux différents modèles de simulation présentés dans la littérature (Monte Carlo, et modèle mécanique (c.f. chap. 2)). Ceux-ci ont ensuite été appliqués à la description de la croissance de grain normale en condition isotherme dans l'acier Ck45. Les résultats de la modélisation ont été comparés à des cinétiques expérimentales.

Dans un dernier chapitre, on tentera de grouper les résultats obtenus pour les différentes étapes du processus d'austénitisation (dissolution de la perlite, transformation de la ferrite en austénite, homogénéisation et croissance du grain), afin de procéder à une description de l'ensemble des phénomènes.

4.1 Dissolution de la perlite

L'austénitisation d'une microstructure perlitique débute par la germination de nodules d'austénite, apparaissant généralement à l'interface entre les colonies de perlite. La croissance des nodules dans la structure lamellaire est ensuite principalement gouvernée par la diffusion du carbone et par les phénomènes de tension de surface. Contrairement à la transformation eutectoïde au refroidissement, où le système peut adopter l'espacement le plus favorable du point de vue énergétique, la dissolution a lieu ici avec des espacements interlamellaires préalablement fixés. Au début de la croissance du nodule, la vitesse de dissolution est en principe maximale dans la région des points de rencontre des phases α , γ et θ où l'échange du soluté se fait sur de courtes distances. Si un régime stationnaire s'établit, les interfaces α/γ et θ/γ adoptent une forme conduisant à des vitesses d'avance uniformes. Une telle situation peut être atteinte grâce aux phénomènes de tension de surface. Ceux-ci déterminent notamment les angles entre les interfaces α/γ , α/θ et θ/γ aux points de jonction des trois phases. Ils se traduisent également par une dépendance de l'équilibre thermodynamique des interfaces en fonction de la courbure locale.

Le modèle présenté ici permet de décrire la croissance en considérant une géométrie bidimensionnelle constituée d'une structure régulière de lamelles de phase α et θ . Il est fondé principalement sur les hypothèses d'un équilibre mécanique des tensions de surface au point de jonction des interfaces $\alpha/\gamma/\theta$, et de l'équilibre thermodynamique local à l'interface. La résolution de l'équation de diffusion par une méthode d'éléments finis permet de calculer la vitesse d'avance, la forme des interfaces ainsi que le champ de concentration en fonction de la surchauffe. Le calcul peut être effectué pour le début de la croissance et poursuivi jusqu'à l'obtention d'un régime stationnaire.

Le modèle sera tout d'abord appliqué à un matériau imaginaire dont les propriétés physiques permettent d'effectuer la résolution sur une grande plage de surchauffes et d'espacements interlamellaires. Le cas de l'alliage Fe-C sera traité dans un second temps, sous l'angle d'une comparaison avec des résultats expérimentaux tirés de la littérature.

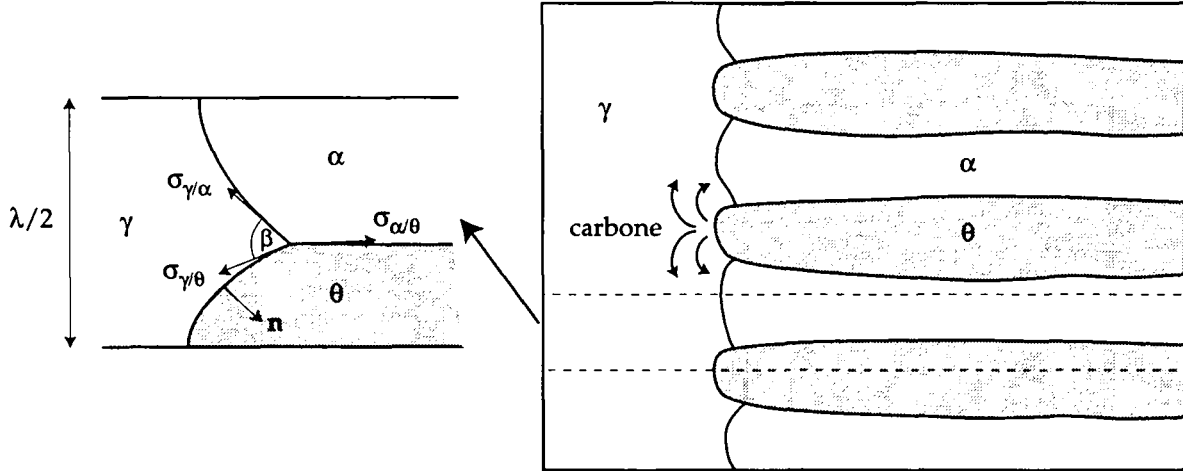


Fig. 4.1 : Représentation schématique de la transformation de la perlite en austénite.

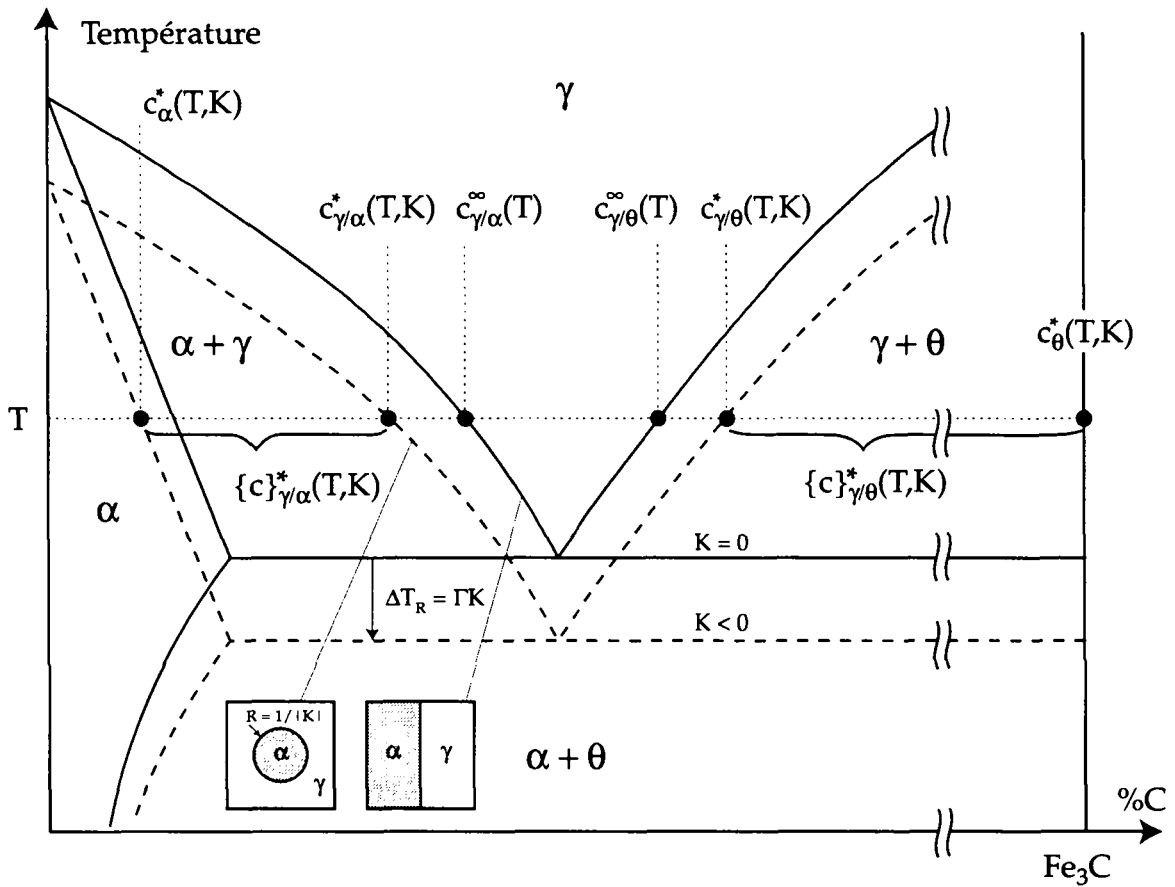


Fig. 4.2 : Définition des concentrations à l'interface utilisées comme conditions aux limites dans le modèle. Le diagramme de phase considéré est obtenu par une translation verticale calculée en fonction de la courbure locale de l'interface, K , définie par rapport à la phase γ .

4.1.1 Description du modèle

La croissance de la phase austénitique dans une structure perlitique peut être schématisée par la configuration bidimensionnelle décrite à la figure 4.1. Lors de la transformation, le carbone provenant des lamelles de cémentite diffuse en direction des lamelles de ferrite. Cet échange de soluté a lieu essentiellement à travers la phase austénitique à l'avant de la perlite.

Le modèle a pour objet de décrire la croissance de l'austénite dans la situation de la figure 4.1. La germination de l'austénite aux interfaces α/θ est donc supposée avoir déjà eu lieu. Le modèle est basé sur la résolution des équations décrivant la diffusion du carbone dans l'austénite et le déplacement des interfaces en fonction de la température de transformation. Les hypothèses sont les suivantes :

- La microstructure présente une périodicité caractérisée par un espacement interlamellaire λ . Cette hypothèse permet de réduire le problème au domaine illustré sur la partie gauche de la figure 4.1.
- L'équilibre mécanique des tensions de surface $\sigma_{\alpha/\gamma}$, $\sigma_{\theta/\gamma}$ et $\sigma_{\alpha/\theta}$ ¹ détermine l'angle β formé par les interfaces au point de jonction des trois phases (v. Fig 4.1).
- Les concentrations du carbone dans la cémentite (composé stoechiométrique) et dans la ferrite (solubilité très faible) restent constantes au cours de la transformation. Cette hypothèse permet de résoudre l'équation de diffusion dans l'austénite uniquement.
- La température est uniforme dans le domaine de calcul. La diffusivité thermique qui est largement supérieure à celle du soluté dans les métaux permet de justifier cette hypothèse.
- L'interface est à l'équilibre thermodynamique. Le diagramme de phase peut donc être utilisé pour déduire les concentrations de carbone à l'interface dans chaque phase.
- La courbure locale de l'interface modifie l'équilibre thermodynamique selon un coefficient de Gibbs-Thompson indépendant de l'orientation cristallographique.

Le problème à résoudre est constitué de deux équations. La première est l'équation de diffusion du carbone dans l'austénite :

$$\text{div } D \mathbf{grad} c + \mathbf{v}_{\text{réf}} \cdot \mathbf{grad} c = \frac{\partial c}{\partial t} \quad 4.1$$

où c et D sont respectivement la concentration et le coefficient de diffusion du carbone dans l'austénite. (L'indice γ est omis par souci de simplicité). Le second terme du membre de gauche fait intervenir $\mathbf{v}_{\text{réf}}$, la vitesse du référentiel par rapport à la microstructure. Il permet d'effectuer le calcul en considérant un référentiel qui se déplace avec l'interface.

La seconde équation est le bilan de soluté à l'interface, qui exprime la relation entre la vitesse absolue de l'interface, \mathbf{v}^* , et le champ de concentration :

¹ Pour éviter des confusions avec le symbole de l'austénite, la tension de surface est désignée par σ . Ce symbole est réservé habituellement à l'énergie de surface qui, sous certaines conditions, peut être assimilée à la tension de surface.

$$D \operatorname{grad} c \cdot \mathbf{n} = \mathbf{v}^* \cdot \mathbf{n} \{c\}^* \quad 4.2$$

Le symbole $\{c\}^*$ désigne le saut de concentration à l'interface défini à la figure 4.2 ($\{c\}_{\gamma/\alpha}^* = c_{\alpha}^* - c_{\gamma/\alpha}^*$ ou $\{c\}_{\gamma/\theta}^* = c_{\theta}^* - c_{\gamma/\theta}^*$ selon l'interface considérée). Le vecteur \mathbf{n} est le vecteur unitaire normal à l'interface, sortant de la phase γ (v. Fig. 4.1).

La résolution est effectuée numériquement par une méthode d'éléments finis utilisant un maillage déformant. Le domaine de calcul est illustré à la figure 4.3 avec l'évolution du maillage au cours de la transformation. Le bord droit du domaine, qui représente les interfaces γ/α et γ/θ , se déplace selon les vitesses données par la relation 4.2. Les noeuds du maillage sont déplacés horizontalement avec la vitesse relative au référentiel suivante :

$$u_x(x_0, y_0) = \frac{x_0}{x^*(y_0)} (v_x^*(y_0) - v_{\text{réf}}) \quad 4.3$$

où (x_0, y_0) sont les coordonnées du noeud. Les symboles $x^*(y_0)$ et $v_x^*(y_0)$ désignent respectivement la position et la vitesse horizontale absolue de l'interface à l'ordonnée y_0 .

La hauteur du domaine est définie par l'espacement interlamellaire, alors que la largeur est choisie suffisamment grande pour pouvoir faire l'hypothèse d'un flux nul sur le bord gauche. Les conditions aux limites sur les interfaces γ/α et γ/θ sont de type essentiel. Les valeurs imposées, $c_{\gamma/\alpha}^*(T, K(y))$ et $c_{\gamma/\theta}^*(T, K(y))$, sont déduites du diagramme de phase en tenant compte de la courbure locale, $K(y)$, via le coefficient de Gibbs-Thompson, Γ :

$$c_{\gamma/\alpha}^*(T, K(y)) = c_{\gamma/\alpha}^{\infty}(T - \Gamma K(y)) \quad 4.4$$

$$c_{\gamma/\theta}^*(T, K(y)) = c_{\gamma/\theta}^{\infty}(T - \Gamma K(y)) \quad 4.5$$

où $c_{\gamma/\alpha}^{\infty}(T)$ et $c_{\gamma/\theta}^{\infty}(T)$ sont les concentrations données par le diagramme d'équilibre pour une interface plane à la température T (v. Fig. 4.2). Le signe de K est défini positif lorsque le domaine γ est de forme convexe.

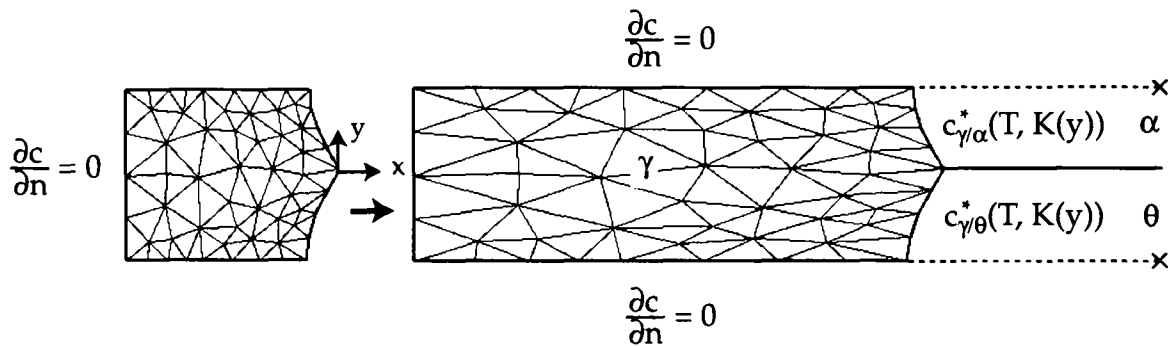


Fig. 4.3 : Conditions aux limites utilisées dans le modèle. Le maillage se déforme au cours du calcul en fonction du déplacement des interfaces γ/α et γ/θ .

Formulation en éléments finis

Comme pour la résolution de l'équation de la chaleur présentée au paragraphe 3.1.4, la formulation en éléments finis est basée sur un ensemble de fonctions d'interpolation, $\phi_i(x, t)$, permettant d'exprimer le champ de concentration par des combinaisons linéaires :

$$c(\mathbf{x},t) = \sum_{i=1}^N c_i(t) \phi_i(\mathbf{x},t) \quad 4.6$$

où c_i est la concentration au noeud i et N le nombre de noeuds dans le maillage. La dépendance en temps des fonctions d'interpolation est particulière au modèle qui fait intervenir une déformation du maillage (Lynch, 1982).

En multipliant l'équation 4.1 par une fonction test ϕ_j et en intégrant sur le domaine de calcul, Ω , on obtient par le théorème de la divergence la formulation suivante :

$$\int_{\Gamma} D \mathbf{grad} c \cdot \mathbf{n} \phi_j d\Gamma - \int_{\Omega} D (\mathbf{grad} c \cdot \mathbf{grad} \phi_j) d\Omega + \int_{\Omega} (\mathbf{v}_{\text{réf}} \cdot \mathbf{grad} c) \phi_j d\Omega = \int_{\Omega} \frac{\partial c}{\partial t} \phi_j d\Omega \quad 4.7$$

La procédure de discrétisation et d'assemblage conduit à l'équation matricielle suivante :

$$\mathbf{b} + ([\mathbf{V}_{\text{réf}}] - [\mathbf{D}]) \mathbf{c} = [\mathbf{M}] \frac{d\mathbf{c}}{dt} + [\mathbf{U}] \mathbf{c} \quad 4.8$$

avec les définitions :

$$b_j = \int_{\Gamma} D (\mathbf{grad} c \phi_j) \cdot \mathbf{n} d\Gamma \quad 4.9$$

$$D_{ji} = \int_{\Omega} D (\mathbf{grad} \phi_i \cdot \mathbf{grad} \phi_j) d\Omega \quad 4.10$$

$$M_{ji} = \int_{\Omega} (\phi_i \phi_j) d\Omega \quad 4.11$$

$$V_{\text{réf},ji} = \int_{\Omega} (\mathbf{v}_{\text{réf}} \cdot \mathbf{grad} \phi_i) \phi_j d\Omega \quad 4.12$$

$$U_{ji} = \int_{\Omega} \left(\frac{\partial \phi_i}{\partial t} \phi_j \right) d\Omega \quad 4.13$$

En introduisant dans l'expression 4.13, la relation suivante (Lynch, 1982) :

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = - \mathbf{grad} \phi_i \cdot \mathbf{u} \quad 4.14$$

où \mathbf{u} est la vitesse relative des noeuds dans un maillage déformant, l'équation matricielle (4.8) peut s'écrire :

$$\mathbf{b} + ([\mathbf{V}] - [\mathbf{D}]) \mathbf{c} = [\mathbf{M}] \frac{d\mathbf{c}}{dt} \quad 4.15$$

avec

$$V_{ji} = \int_{\Omega} ((v_{\text{réf}} + \mathbf{u}) \cdot \mathbf{grad} \phi_i) \phi_j d\Omega \quad 4.16$$

Le modèle ne fait intervenir que des vitesses relatives horizontales, qui peuvent être exprimées dans la base des fonctions d'interpolation selon la combinaison linéaire suivante :

$$u_x = \sum_{k=1}^N u_{x,k} \phi_k \quad 4.17$$

En considérant une vitesse de référentiel horizontale également, l'expression 4.16 se réduit à :

$$V_{ji} = \sum_{k=1}^N (v_{\text{réf}} + u_k) \int_{\Omega} \frac{\partial \phi_i}{\partial x} \phi_j \phi_k d\Omega \quad 4.18$$

La résolution de l'équation 4.15 est effectuée selon le schéma explicite suivant :

$$\mathbf{b} + ([\mathbf{V}] - [\mathbf{D}]) \mathbf{c}^t = [\mathbf{M}] \frac{\mathbf{c}^{t+\Delta t} - \mathbf{c}^t}{\Delta t} \quad 4.19$$

Le pas de temps Δt est déterminé à partir du critère de stabilité pour un schéma explicite et une matrice de masse condensée :

$$\Delta t < \frac{1}{4} \left(\frac{L^2}{D} \right)_{\min} \quad 4.20$$

où $(L^2/D)_{\min}$ est le minimum sur les éléments des rapports donnés par la longueur d'arête, L , (minimum des trois arêtes de l'élément) et le coefficient de diffusion D calculé en fonction de la concentration locale.

Traitement de l'interface

Le champ de concentration obtenu par la résolution de l'équation 4.19 permet d'estimer la vitesse horizontale absolue de l'interface à partir de la relation 4.2 :

$$v_x^* = \frac{D}{\{c\}^*} \left(\frac{\partial c}{\partial x} \Big|_* + \frac{n_y}{n_x} \frac{\partial c}{\partial y} \Big|_* \right) \quad (\text{si } n_x \neq 0) \quad 4.21$$

Les dérivées partielles désignent les composantes du gradient de concentration dans l'austénite à l'interface et n_x et n_y les composantes du vecteur normal sortant. Ce dernier est calculé à chaque noeud d'interface en effectuant la moyenne arithmétique des vecteurs unitaires perpendiculaires aux deux arêtes voisines.

Le noeud situé au point de jonction des trois phases, ainsi que les deux noeuds voisins situés de part et d'autre de celui-ci sont déplacés à la même vitesse. Cette dernière est estimée par la moyenne arithmétique des vitesses obtenues avec la relation 4.21 pour les deux voisins. Une telle procédure permet de maintenir constant l'angle β formé par les interfaces au point de jonction. L'angle β est calculé à partir des tensions de surface en supposant l'équilibre mécanique. Il est

imposé au début du calcul par un déplacement horizontal du noeud au point de jonction $\alpha/\gamma/\theta$.

La connaissance des vitesses à l'interface permet ensuite de déformer le maillage en déplaçant chaque noeud de la quantité $u_x \Delta t$, en déduisant u_x de la relation 4.3. La courbure de l'interface est estimée à partir du vecteur normal avec la relation :

$$K = \text{div } \mathbf{n} \quad 4.22$$

Sa connaissance permet de mettre à jour les concentrations à l'interface selon les équations 4.4 et 4.5 et de poursuivre la résolution au pas de temps suivant.

Remaillage

La déformation du maillage résultant du déplacement du bord droit du domaine γ peut parfois conduire à la dégénérescence des éléments. Pour éviter ce phénomène, une procédure de remaillage est mise en oeuvre dès que l'un des sommets des éléments triangulaires possède un angle inférieur à un critère fixé (8°). Le remaillage est opéré à partir des noeuds du contour à l'aide du logiciel Modulef selon un algorithme frontal (Bernadou, 1985). Le champ de concentration dans le nouveau maillage est obtenu au moyen des fonctions d'interpolation et des valeurs aux noeuds dans l'ancien maillage.

4.1.2 Validation numérique

Afin de tester la programmation, le modèle a d'abord été appliqué au cas simplifié d'un front plan d'austénite croissant aux dépens de la ferrite uniquement. La situation initiale du calcul est constituée d'un domaine rectangulaire de concentration uniforme (0.8%C). Elle correspond à la fin de la dissolution de la perlite lors de l'austénitisation d'un acier hypoeutectoïde normalisé. Cette situation monodimensionnelle permet de comparer les résultats du modèle avec ceux provenant d'un calcul par différences finies 1D. Ce dernier modèle est décrit dans la section 4.2.

La figure 4.4 (a) montre le maillage et le champ de concentration obtenus pour un maintien de 5 s à 728°C (1°C de surchauffe). Le calcul a été réalisé avec un coefficient de diffusion du carbone dans l'austénite de $2.5 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$ et un référentiel fixe ($v_{\text{réf}} = 0$). Les profils de concentration calculés à différents instants peuvent être comparés à ceux provenant du modèle de différences finies 1D à la figure 4.4 (b). L'excellent accord obtenu indique que la résolution par une méthode éléments finis et maillage déformant n'introduit pas d'erreur importante.

4.1.3 Application à un alliage idéal

Un alliage "idéal" a été imaginé dans le but d'étudier le comportement du modèle en fonction des différents paramètres. Ses propriétés physiques ont été choisies afin de faciliter la mise en oeuvre du modèle et d'éviter dans un premier temps le traitement de microstructures présentant des épaisseurs de lamelles très différentes pour les phases α et θ . L'alliage imaginé possède ainsi un diagramme de phase presque symétrique avec une transformation eutectoïde à 55% (Fig. 4.5). Pour les calculs, le coefficient de diffusion, le coefficient de Gibbs-Thompson et l'angle β entre les interfaces γ/α et γ/θ ont été fixés arbitrairement à $3 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$, $2 \cdot 10^{-6} \text{ m K}$ et 120° respectivement.

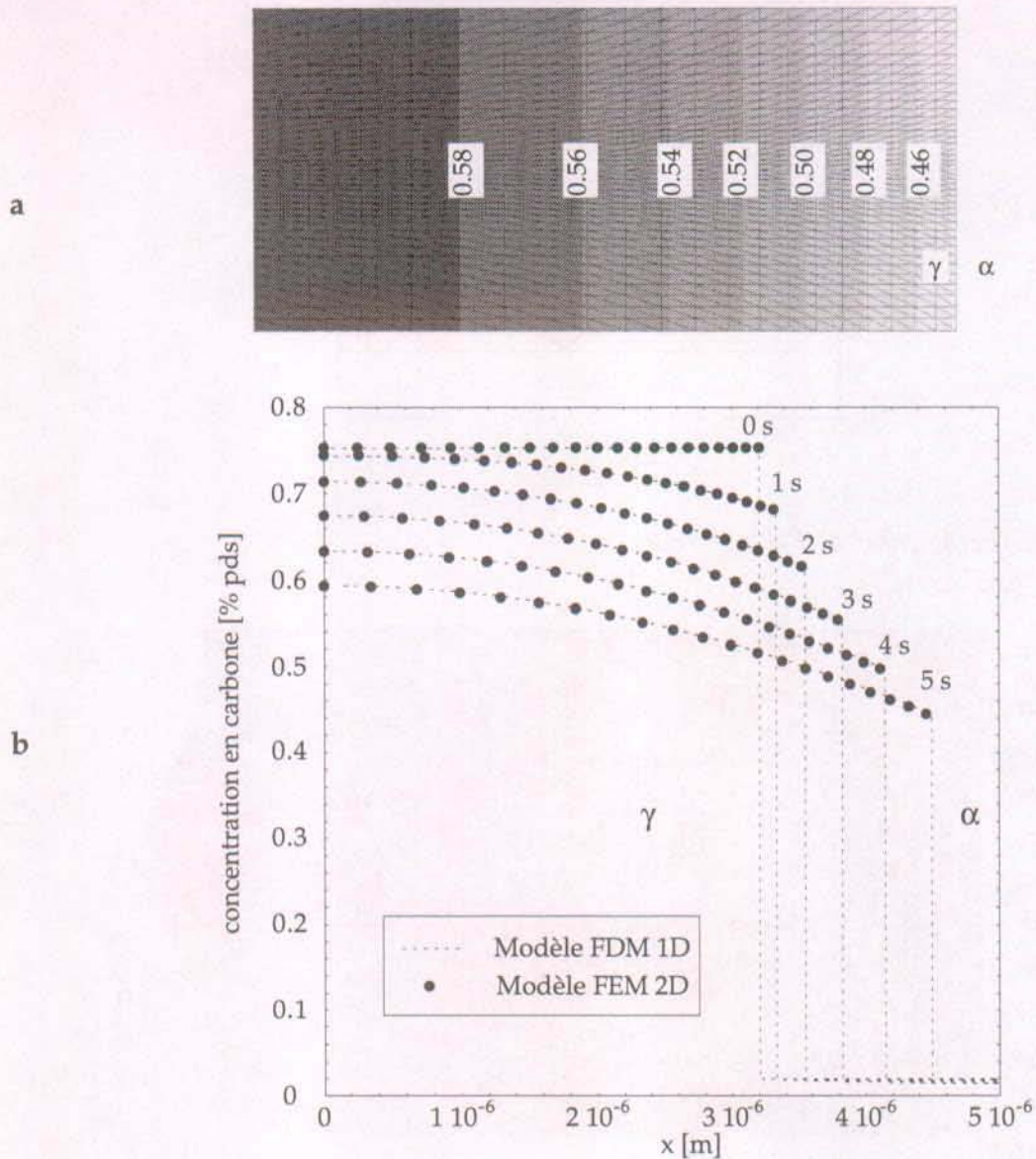


Fig. 4.4 : Validation du modèle d'éléments finis (FEM) par l'application à un cas monodimensionnel. (a) Champ de concentration dans l'austénite obtenu pour un maintien de 5 s à 728°C. Les valeurs indiquées correspondent à des iso-concentrations. (b) Comparaison des profils de concentration obtenus avec le modèle FEM 2D et avec un modèle de différences finies (FDM) 1D.

Le référentiel a été placé sur le point de jonction des phases α , γ et θ . Sa vitesse, qui varie au cours de la transformation, a été enregistrée tout au long du calcul afin de pouvoir reconstituer le déplacement de l'interface par rapport à un point immobile. La résolution a été poursuivie jusqu'à l'obtention d'un régime stationnaire. Les calculs ont été effectués pour une surchauffe variant entre -5°C et $+20^\circ\text{C}$ et pour les espacements interlamellaires de 0.4 et 1 μm . L'usage de valeurs négatives de surchauffe sera justifié plus loin.

La figure 4.6 montre le champ de concentration obtenu en régime stationnaire pour une surchauffe de 3°C et un espacement interlamellaire de 0.4 μm . On remarque la présence d'un gradient de concentration élevé au voisinage du point de jonction des trois phases et nettement plus faible vers les sommets des lamelles (bords du domaine). Malgré ces différences, l'interface se déplace avec

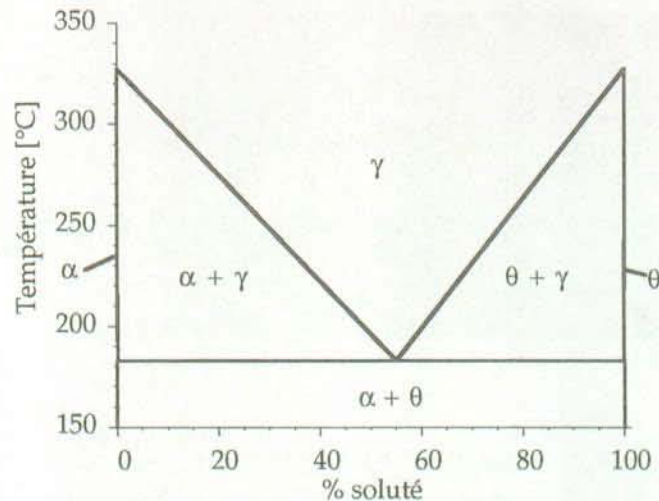


Fig. 4.5 : Diagramme de phase de l'alliage "idéal".

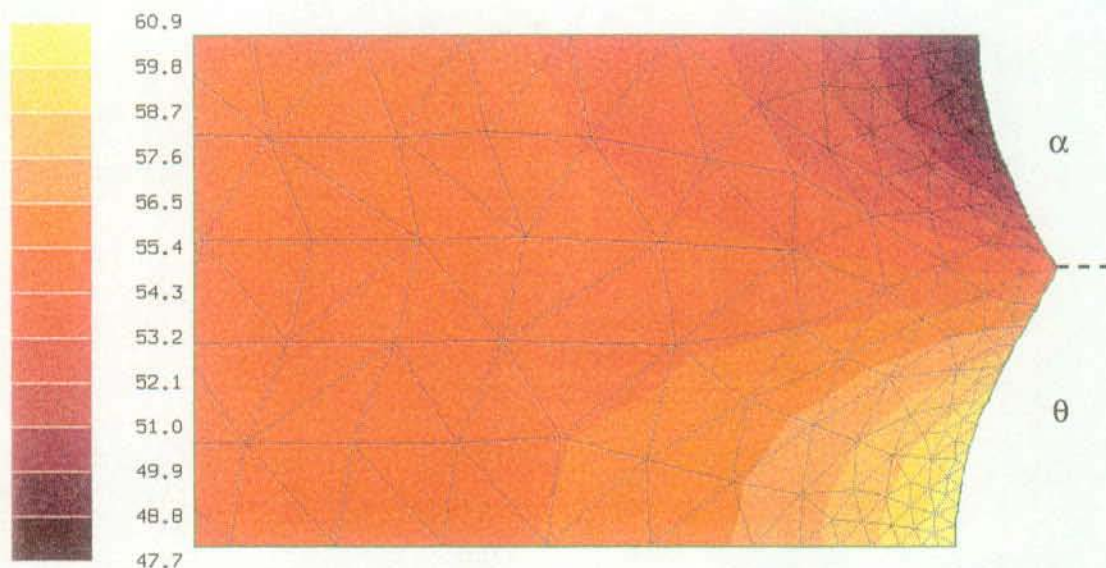


Fig. 4.6 : Champ de concentration stationnaire lors de la dissolution de la perlite calculé pour l'alliage "idéal" ($\lambda = 0.4 \mu\text{m}$, $T = T_{eut} + 3^\circ\text{C}$, $\beta = 120^\circ$).

une vitesse uniforme, indépendante de l'ordonnée. L'existence d'un régime stationnaire est vérifiée à la figure 4.7 où sont représentées les positions de l'interface au cours du calcul et sa vitesse horizontale en fonction de l'ordonnée. On en déduit qu'après une phase transitoire d'une durée de 0.3 ms environ, l'interface évolue à la vitesse constante de 0.69 mm/s.

Un régime stationnaire est donc obtenu en dépit des inégalités du gradient de concentration observées le long de l'interface. L'explication réside dans les phénomènes de tension de surface qui limitent l'avance de l'interface dans la région du point de jonction des trois phases - où les gradients sont les plus forts - et l'accélèrent dans les autres régions. La modification de l'équilibre thermodynamique due à la courbure locale de l'interface est représentée à la figure 4.8 pour trois surchauffes différentes. La surchauffe de courbure, $\Delta T_R = \Gamma K$, représentée en ordonnée permet de calculer la surchauffe effective de l'interface, ΔT_{eff} , définie par la relation suivante :

$$\Delta T_{eff} = T - T_{eut} - \Gamma K = \Delta T - \Delta T_R$$

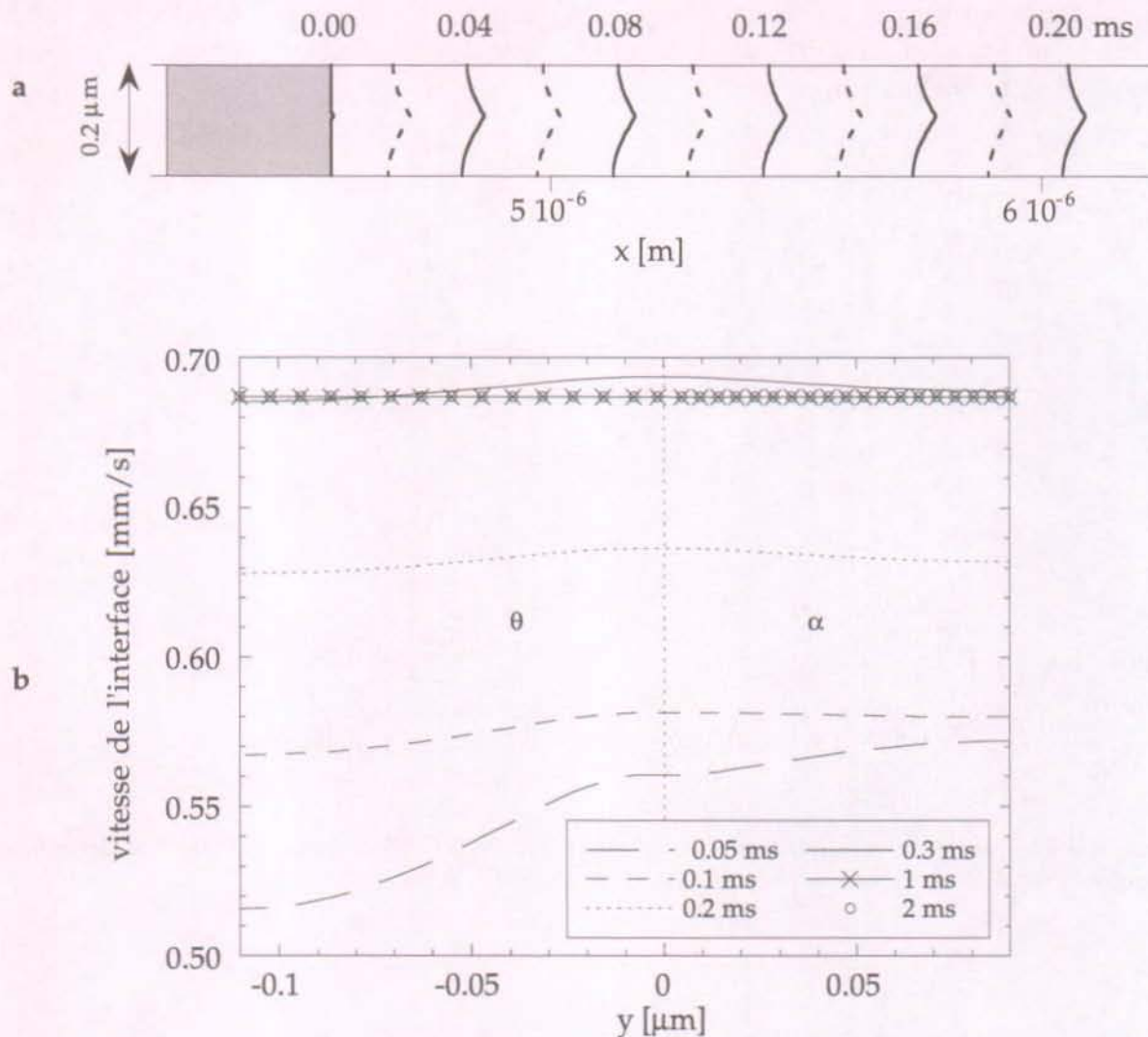


Fig. 4.7 : Position de l'interface (a) et profil de vitesse (b) à différents instants de la transformation (mêmes conditions que dans la Fig. 4.6).

où ΔT est la surchauffe imposée ($\Delta T = T - T_{eut}$), T la température de la transformation et T_{eut} la température eutectoïde pour une interface plane. On observe ainsi que, dans la région du point de jonction ($y=0$), la courbure positive de l'interface réduit considérablement la surchauffe effective. Les sommets des lamelles possèdent quant à eux une courbure négative qui permet de compenser les faibles gradients de concentration par une surchauffe effective beaucoup plus élevée. On en conclut qu'à l'instar de la plupart des microstructures résultant d'une transformation de phase diffusionnelle, la forme adoptée par l'interface est celle qui permet de trouver un équilibre entre les phénomènes de capillarité et de diffusion.

Les vitesses de transformation en régime stationnaire obtenues en fonction de la surchauffe sont représentées à la figure 4.9 pour deux valeurs de l'espacement interlamellaire. Les vitesses de croissance non nulles observées pour des surchauffes négatives proviennent de l'équilibre mécanique des tensions de surface imposé au point de jonction des trois phases. Dès le début du calcul, la zone austénitique possède une forme concave qui favorise la dissolution par un effet de diminution de la température d'équilibre.

Conformément à la tendance attendue, la vitesse de dissolution augmente avec la surchauffe et diminue avec l'espacement interlamellaire. La relation $v(\Delta T)$ semble quasiment linéaire, avec toutefois une légère augmentation de la pente vers les surchauffes plus élevées.

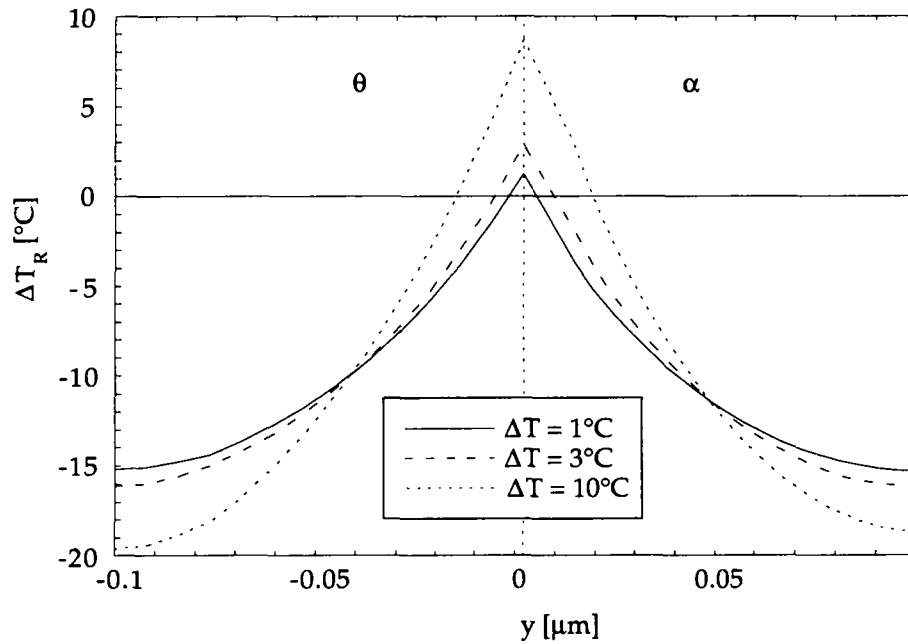


Fig. 4.8 : Profils de la surchauffe de courbure en régime stationnaire obtenus à différentes températures de transformation (mêmes conditions que dans la Fig. 4.6).

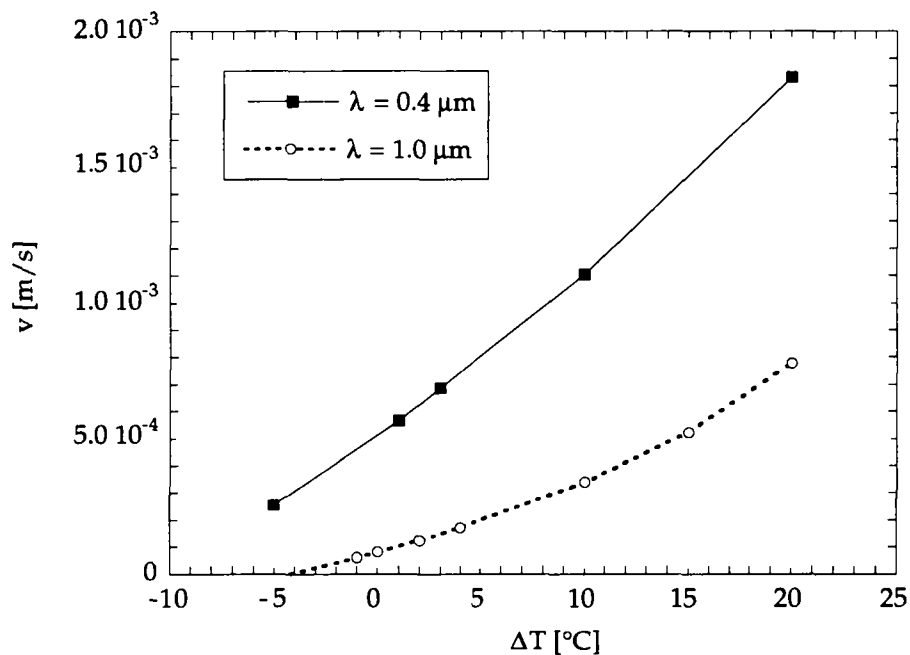


Fig. 4.9 : Vitesse de dissolution en régime stationnaire calculée en fonction de la surchauffe pour deux espacements interlamellaires (alliage "idéal").

4.1.4 Application à l'alliage Fe-C

Le modèle a ensuite été appliqué à la dissolution de la perlite en utilisant des propriétés plus réalistes pour l'alliage Fe-C. Le diagramme de phase employé est celui présenté à la figure 7.6.3 donnée en annexe. Les autres données numériques sont indiquées dans le tableau 4.1. Tous les calculs ont été effectués pour un alliage Fe-C de composition eutectoïde (0.77% pds).

Calcul N°	ΔT [°C]	λ [μm]	Γ_{α/θ^*} [°C·m]	Γ_{γ/α^*}	Γ_{γ/θ^*}	β	D [m^2/s]
1	1.0	0.5	$2 \cdot 10^{-7}$	$2 \cdot 10^{-7}$	$2 \cdot 10^{-7}$	120°	$1.4 \cdot 10^{-12}$
2	3.0	0.5	$2 \cdot 10^{-7}$	$2 \cdot 10^{-7}$	$2 \cdot 10^{-7}$	120°	$1.4 \cdot 10^{-12}$
3	1.0	0.5	$0.5 \cdot 10^{-7}$	$2 \cdot 10^{-7}$	$2 \cdot 10^{-7}$	166°	$1.4 \cdot 10^{-12}$
4	3.0	0.5	$0.5 \cdot 10^{-7}$	$2 \cdot 10^{-7}$	$2 \cdot 10^{-7}$	166°	$1.4 \cdot 10^{-12}$
5	5.0	0.5	$0.5 \cdot 10^{-7}$	$2 \cdot 10^{-7}$	$2 \cdot 10^{-7}$	166°	$1.4 \cdot 10^{-12}$

*estimé à partir des valeurs de (Kurz, 1989) pour la solidification

Tableau 4.1 : Données numériques utilisées pour modéliser la dissolution de la perlite dans un acier de composition eutectoïde.

Le champ de concentration obtenu en régime stationnaire pour une surchauffe de 1°C est présenté à la figure 4.10 pour deux valeurs du coefficient de Gibbs-Thomson $\Gamma_{\alpha/\theta}$ (calculs 1 et 3). On observe une influence importante de l'angle β sur la forme stationnaire de l'interface ainsi que sur la vitesse de transformation. La vitesse plus rapide obtenue pour l'angle de 120° est liée à la forme plus creusée imposée par l'angle au point de jonction. Les gradients se trouvent en effet augmentés dans ce cas, de même que la valeur absolue de la courbure. La transformation est donc accélérée par la diffusion plus rapide et par la surchauffe effective plus élevée.

Les vitesses de dissolution stationnaires obtenues pour les quatre premiers calculs du tableau 4.1 sont représentées en fonction de la surchauffe à la figure 4.11. Les résultats sont comparés à des valeurs expérimentales déduites par interpolation des mesures de Roberts (1943). On observe que le modèle prédit une cinétique en accord avec les mesures, avec toutefois des valeurs légèrement trop élevées lorsque $\beta = 120^\circ$. Au vu de ces résultats, l'angle au point de jonction des trois phases est probablement plus proche de 166° que de 120°. Cette hypothèse semble confirmée par la micrographie présentée à la figure 4.12 montrant un nodule d'austénite croissant dans une matrice perlitique avec une interface relativement lisse.

Les résultats obtenus ont également été comparés avec les prédictions de deux modèles analytiques présentés par Speich (1969) (v. paragraphe 2.2.3). Le premier modèle est constitué d'une solution approximative de l'équation de diffusion stationnaire, dont le développement mathématique est présenté en détail dans l'annexe 7.4. Une représentation graphique de la solution est donnée à la figure 4.13. Les paramètres utilisés sont identiques à ceux du calcul N°1 (v. tableau 4.1) si bien qu'une comparaison directe peut être effectuée avec le résultat de la figure 4.10. Dans le modèle analytique, la forme des interfaces est donnée par les iso-

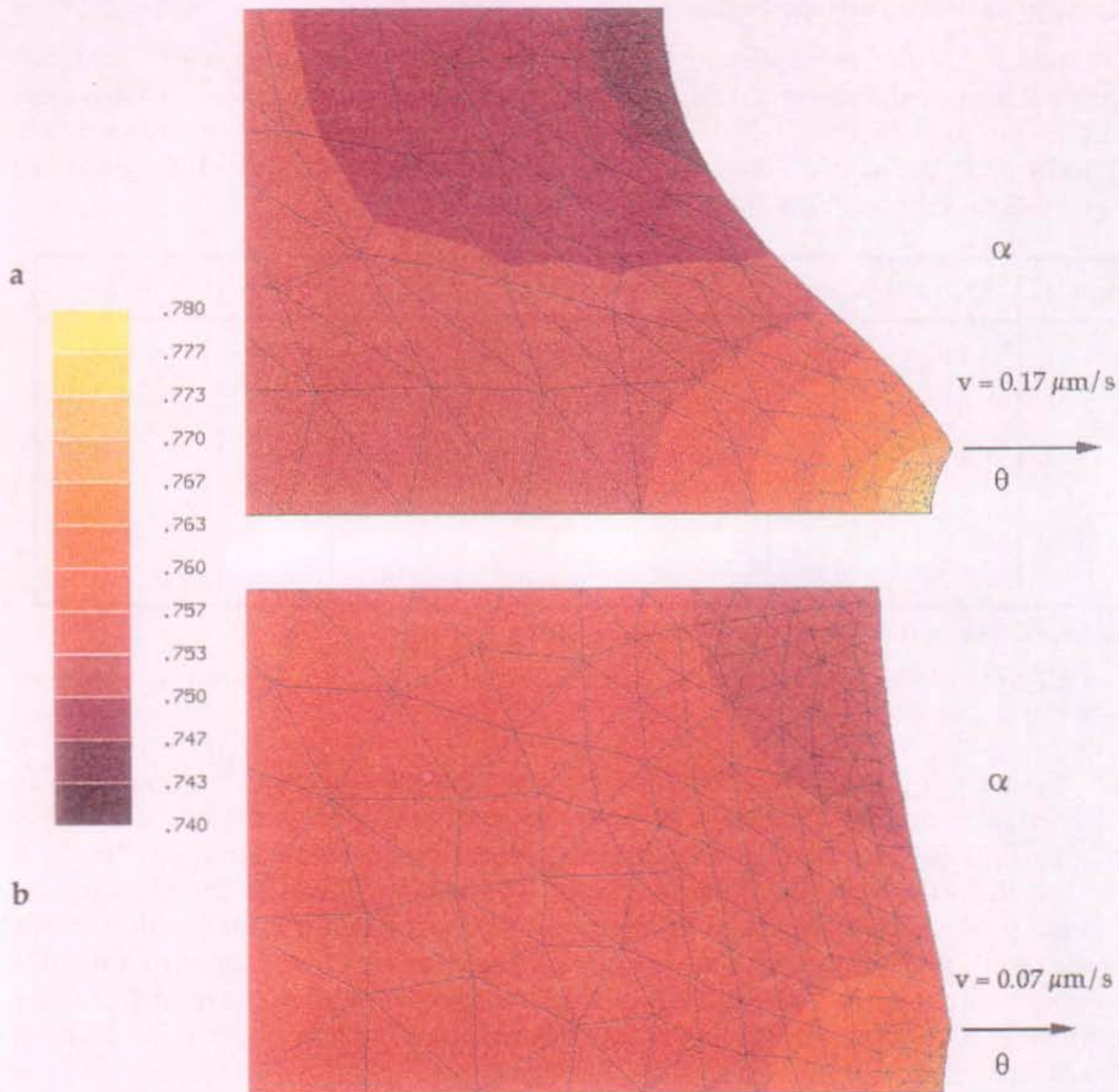


Fig. 4.10 : Champ de concentration du carbone dans l'austénite pendant la dissolution d'une microstructure perlitique en régime stationnaire, calculé pour deux valeurs de l'angle β imposé au point de jonction des phases α , γ et θ . (a) $\beta = 120^\circ$ (b) $\beta = 166^\circ$. ($\lambda = 0.5 \mu\text{m}$, $\Delta T = 1^\circ\text{C}$, $D = 1.4 \cdot 10^{-12} \text{m}^2/\text{s}$).

concentrations $c_{\gamma/\alpha}^\infty$ (0.754%pds) et $c_{\gamma/\theta}^\infty$ (0.764%pds) tracées à la figure 4.13. On observe ainsi que les épaisseurs des lamelles α et θ obtenues analytiquement sont très différentes des valeurs calculées numériquement. Cette différence provient de l'utilisation d'une solution du deuxième ordre uniquement, qui ne permet pas de décrire correctement à la fois les épaisseurs relatives des lamelles et les gradients à l'interface. Le problème se retrouve à la figure 4.11 où les cinétiques prédites analytiquement (modèle 1) sont inférieures d'un ordre de grandeur environ à celles provenant du modèle numérique et des mesures.

Le second modèle analytique est quant à lui constitué de la relation 2.24 qui est basée uniquement sur des ordres de grandeurs. Bien qu'il ne permette pas de représenter le champ de concentration, ce modèle fournit des estimations de la vitesse de dissolution en accord avec les valeurs expérimentales. Ce résultat montre que la cinétique est principalement dictée par l'espacement

interlamellaire et les sauts de concentration à l'interface. Les effets de la tension de surface interviennent donc de manière secondaire. Leur prise en compte est toutefois nécessaire pour une description cohérente du champ de concentration et de la forme de l'interface.

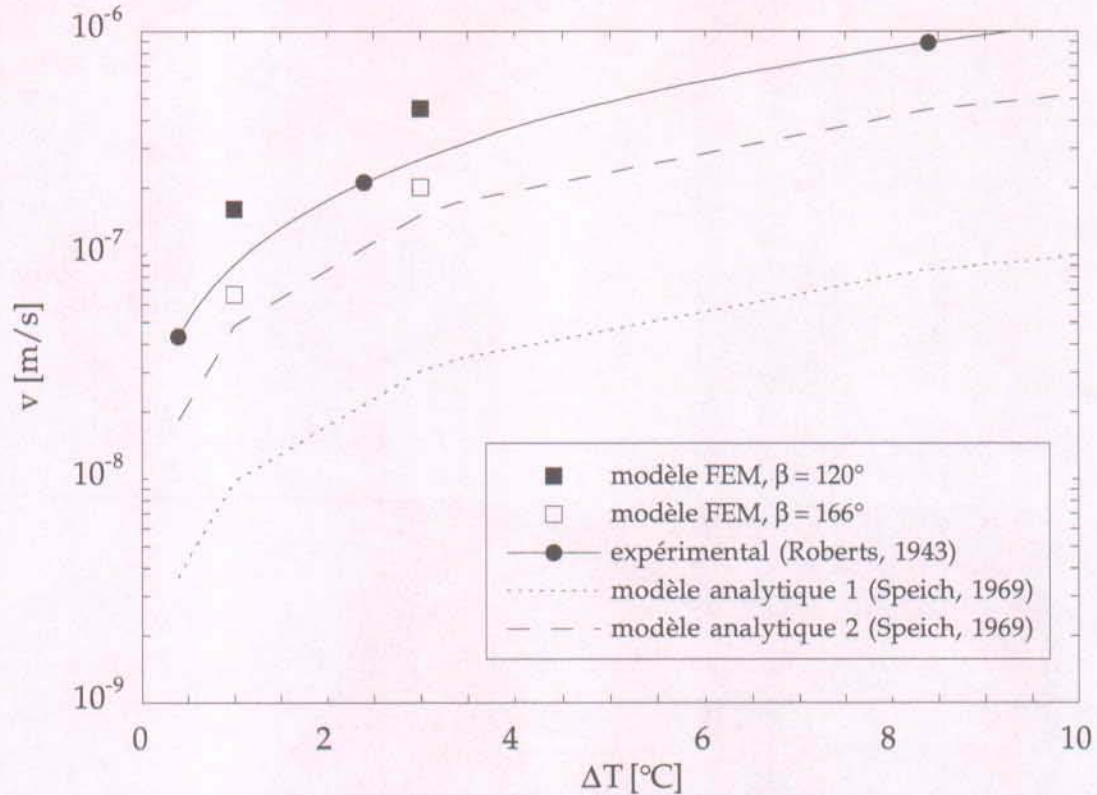


Fig. 4.11 : Vitesse de dissolution de la perlite en régime stationnaire en fonction de la surchauffe (alliage Fe-C, $\lambda = 0.5 \mu\text{m}$).

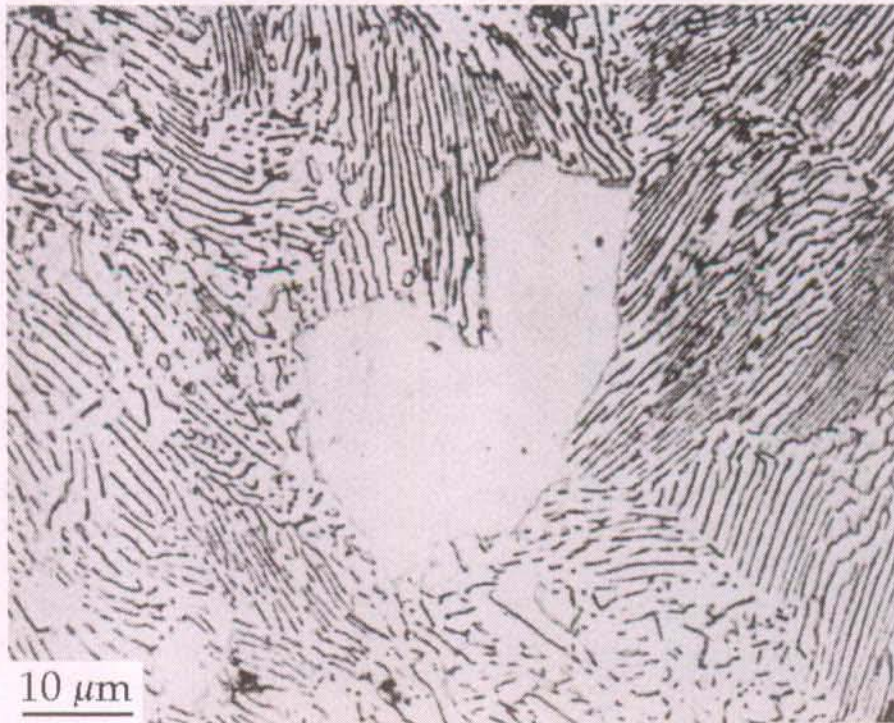


Fig. 4.12 : Nodule d'austénite à l'interface entre deux colonies de perlite dans un acier de composition eutectoïde (Roberts, 1943).



Fig. 4.13 : Solution du 1^{er} modèle analytique de Speich ($\Delta T = 1^\circ\text{C}$, $\lambda = 0.5 \mu\text{m}$, $D = 1.4 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$).

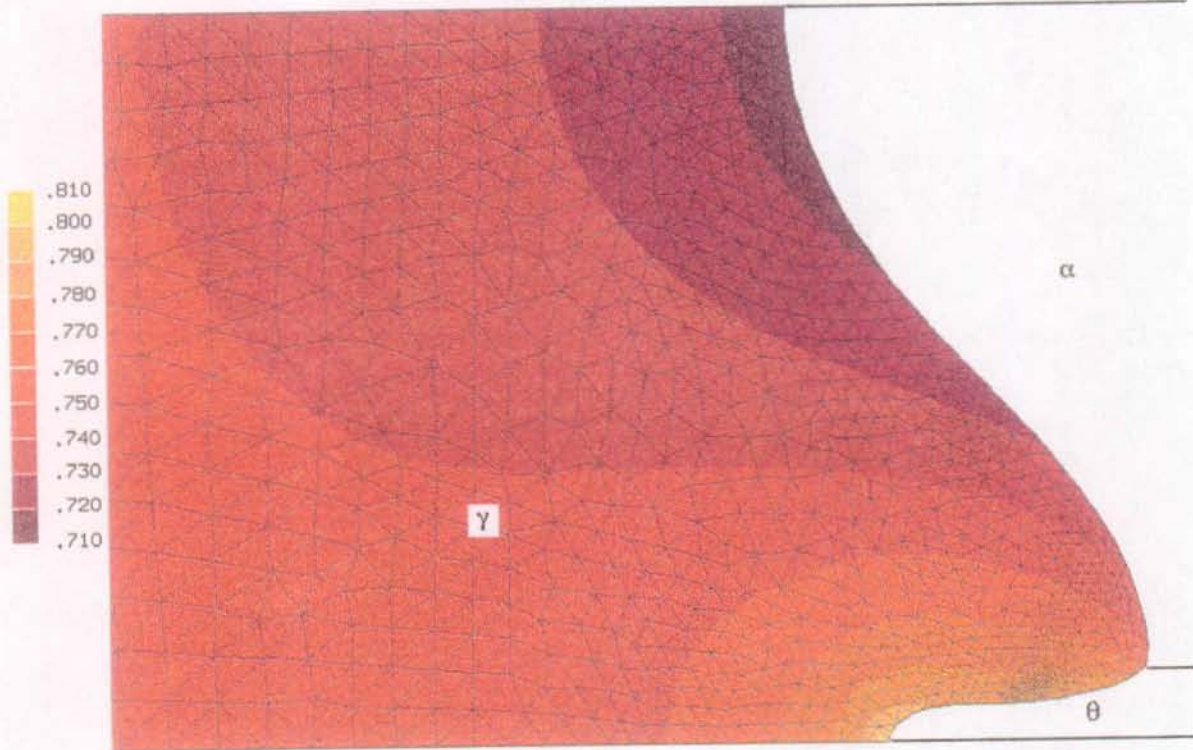


Fig. 4.14 : Champ de concentration du carbone dans l'austénite pendant la dissolution d'une microstructure perlitique ($\beta = 166^\circ$, $\lambda = 0.5 \mu\text{m}$, $\Delta T = 5^\circ\text{C}$, $D = 1.4 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$, $t = 0.15 \text{ s}$).

Le champ de concentration obtenu avec le modèle pour le cas d'une surchauffe plus élevée (calcul N°5) est illustré à la figure 4.14. L'état stationnaire n'a pas été atteint car le calcul a dû être interrompu à ce stade en raison d'une dégénérescence du maillage. En effet, l'avance rapide du point de jonction au début de la transformation conduit à une forme d'interface très creusée avec des arêtes quasiment horizontales le long de l'interface γ/θ . La procédure de déformation du maillage selon l'axe horizontal uniquement ne convient alors plus à la géométrie du domaine.

Le développement d'une interface γ/θ horizontale est lié à la différence entre les cinétiques de dissolution de la cémentite et de la ferrite. Le saut de concentration à l'interface γ/θ (environ 6%) est en effet nettement supérieur à celui de l'interface γ/α (0.75%). Les vitesses de dissolution des deux phases ne peuvent donc être équivalentes que si un gradient de concentration très fort est maintenu dans la région de la cémentite.

Le problème observé semble indiquer l'existence d'un régime de dissolution différent pour les surchauffes élevées. Il consisterait en une avance rapide de l'interface dans la région du point de jonction, accompagnée d'une dissolution préférentielle de la phase α . Cette étape serait suivie d'une dissolution latérale secondaire de la cémentite résiduelle. La différence entre ce régime de dissolution et celui décrit et modélisé précédemment est illustrée schématiquement à la figure 4.15. Le second régime semble par ailleurs avoir été observé expérimentalement pour le cas d'une microstructure perlitique grossière (v. Fig. 2.10 au chapitre 2).

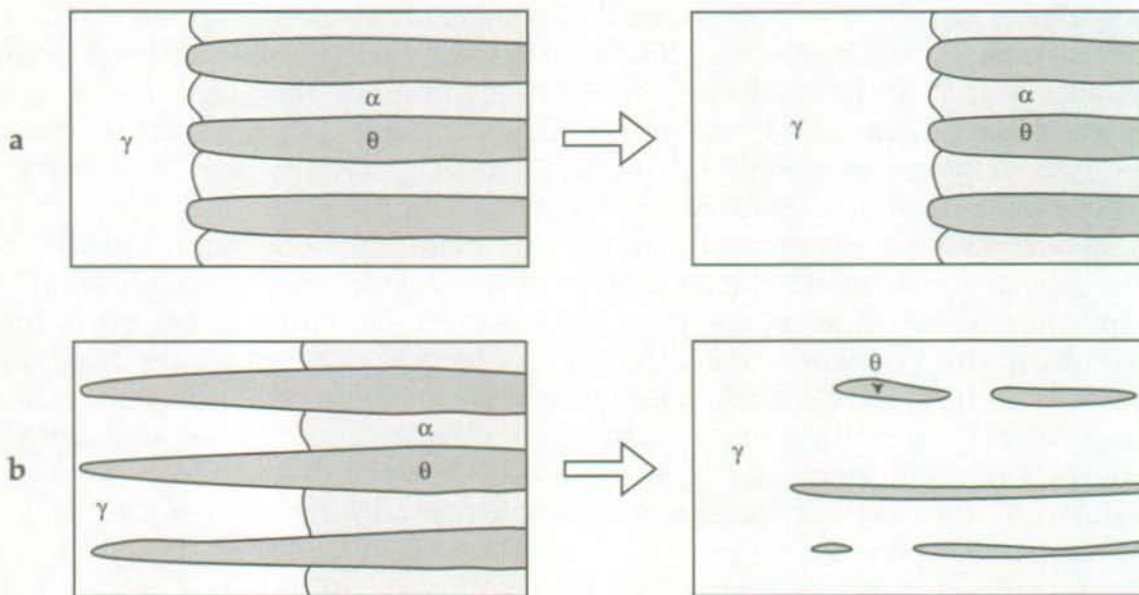


Fig. 4.15 : Régimes de dissolution de la perlite. Régime couplé à faible surchauffe (a) ou découplé à surchauffe élevée (b).

4.1.5 Conclusion

Le modèle développé permet de décrire de manière réaliste les mécanismes de dissolution d'une microstructure eutectoïde ou eutectique de morphologie lamellaire. Il permet de calculer la vitesse de transformation, la forme de l'interface ainsi que le champ de concentration dans l'austénite (ou dans le liquide) en tenant compte de l'influence de la tension de surface. Il permet donc de lever plusieurs hypothèses par rapport aux modèles analytiques antérieurs.

Le modèle a été appliqué avec succès à l'alliage Fe-C pour de faibles valeurs de surchauffe (inférieure à 3°C). La comparaison des vitesses de dissolution avec des valeurs expérimentales provenant de la littérature a en effet donné satisfaction.

En revanche, le modèle ne permet pas de décrire la dissolution à surchauffe élevée. Celle-ci est en effet supposée avoir lieu selon un régime de diffusion non couplée avec une dissolution retardée pour la cémentite. La confirmation de l'existence des deux régimes ainsi que les conditions de transition de l'un à

l'autre nécessiteraient toutefois une recherche plus approfondie. Une meilleure connaissance des propriétés physiques permettrait également d'obtenir des résultats plus réalistes. En outre, pour calculer le temps total d'austénitisation d'une microstructure perlitique, les phénomènes de germination devraient encore être pris en compte.

En dépit de ces limitations, le modèle a permis d'améliorer la compréhension des mécanismes de la dissolution en mettant notamment en évidence l'existence de différents régimes. Une adaptation du programme pour autoriser des déformations du maillage selon les deux axes permettrait d'appliquer le modèle à d'autres situations (croissance des eutectiques, autre régime de dissolution).

4.2 Dissolution de la ferrite

Lors de l'austénitisation d'un acier hypoeutectoïde normalisé, la dissolution de la perlite aboutit à une microstructure mixte composée de zones d'austénite riches en carbone (concentration voisine de celle de l'eutectoïde) et de zones non transformées constituées de ferrite proeutectoïde. Lorsque le processus d'austénitisation se poursuit, les interfaces α/γ migrent en direction des centres des zones ferritiques. A vitesse de chauffage ou température de transformation modérée, cette seconde étape est principalement gouvernée par la diffusion du carbone dans l'austénite en direction des zones de ferrite.

Le modèle présenté ici permet de décrire la dissolution de la ferrite proeutectoïde ainsi que le processus d'homogénéisation des concentrations dans l'austénite qui se déroule pendant et après la transformation. Le modèle est basé sur la résolution de l'équation de diffusion dans un domaine constitué d'une microstructure mixte de ferrite et d'austénite. Une procédure originale utilisant des éléments particuliers pour traiter l'interface α/γ a été mise au point pour appliquer les conditions aux limites requises aux interfaces. Trois versions du modèle ont été développées afin de pouvoir résoudre le problème en 1, 2 et 3 dimensions d'espace.

Après la description du modèle et des méthodes numériques utilisées, une section est consacrée à la présentation du travail expérimental. Il s'agit de mesures de la cinétique d'austénitisation de l'alliage Ck45 en fonction de la vitesse de chauffage et de la microstructure initiale. Les mesures ont été réalisées par dilatométrie sur deux séries d'échantillons ayant subi un traitement thermique préalable différent.

La section consacrée aux résultats de simulation débute par une comparaison des trois versions du modèle (1D, 2D et 3D) appliquées à un cas monodimensionnel. Les modèles 1D et 2D seront ensuite utilisés pour calculer la cinétique d'austénitisation et d'homogénéisation d'un acier hypoeutectoïde en fonction de la vitesse de chauffage. La version 3D sera quant à elle appliquée à l'étude des effets stéréologiques liés au calcul de la transformation dans un plan (modèle 2D) plutôt que dans une microstructure tridimensionnelle.

Les résultats du modèle seront discutés sur la base d'une comparaison avec des résultats expérimentaux tirés de la littérature et des mesures dilatométriques citées précédemment. La discussion portera sur les avantages et limitations du modèle ainsi que sur les mécanismes qui gouvernent la dissolution de la ferrite.

4.2.1 Description du modèle

Si l'on fait l'hypothèse que la transformation est gouvernée uniquement par la diffusion du carbone, la cinétique peut-être décrite par les équations suivantes :

$$\frac{\partial c_v}{\partial t} = \text{div} [D_v(c_v, T) \text{grad } c_v] \quad \text{dans } \Omega_v = \Omega_\alpha \text{ ou } \Omega_\gamma \quad 4.24$$

$$D_\gamma \left[\frac{\partial c_\gamma}{\partial n} \right]^* - D_\alpha \left[\frac{\partial c_\alpha}{\partial n} \right]^* = v_n (c_\alpha^* - c_\gamma^*) \quad \text{sur } \partial\Omega_{\alpha/\gamma} \quad 4.25$$

où c_v est la concentration en carbone dans la phase v (α ou γ), D_v le coefficient de diffusion associé et c_α^* et c_γ^* les concentrations à l'interface dans les domaines α et γ , respectivement. La vitesse normale à l'interface α/γ (notée $\partial\Omega_{\alpha/\gamma}$) est définie par :

$$v_n = \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \quad 4.26$$

où \mathbf{n} est la normale à l'interface dirigée vers l'extérieur du domaine considéré et \mathbf{v} son vecteur vitesse. Le symbole "*" désigne les valeurs prises à l'interface et $\partial/\partial n$ les dérivées normales (c'est-à-dire $\partial c/\partial n = \text{grad } c \cdot \mathbf{n}$).

Les conditions aux limites pour le domaine $\Omega = \Omega_\alpha \cup \Omega_\gamma$ sont celles d'un système fermé, alors que les conditions initiales pour les concentrations dans chaque domaine sont données par :

$$c_v(x, t=0) = c_v^*(T_i) \quad 4.27$$

où $c_v^*(T_i)$ est la concentration à la température initiale T_i dans la phase v . Elle est donnée par le diagramme de phase selon l'hypothèse d'une microstructure à l'équilibre thermodynamique. Le coefficient de diffusion utilisé dans chaque phase dépend de la température et de la concentration. Le champ thermique est supposé uniforme dans le domaine de calcul. Ce dernier point est à nouveau justifié par une diffusivité thermique beaucoup plus élevée que la diffusivité chimique.

Le problème ainsi posé a été résolu en 1, 2 et 3 dimensions d'espace. Les modèles sont présentés successivement dans les paragraphes suivants.

Modèle 1D

Dans le modèle 1D, la microstructure est représentée par un domaine constitué d'un segment de droite divisé en une zone de ferrite et une zone d'austénite. La taille du domaine et la fraction initiale de ferrite sont choisies en fonction de l'échelle de la microstructure et de la composition de l'alliage. La figure 4.16 illustre le domaine de calcul pour le cas d'une géométrie cylindrique ou sphérique. Le modèle s'applique toutefois aussi aux géométries cartésiennes.

La fraction initiale de ferrite, f_α , est calculée par la règle des leviers :

$$f_\alpha = \frac{c_\gamma(T_i) - c_0}{c_\gamma(T_i) - c_\alpha(T_i)} \quad 4.28$$

où c_0 est la composition nominale de l'alliage et $c_\gamma(T_i)$ et $c_\alpha(T_i)$ les concentrations dans les deux phases données par le diagramme de phase pour la température T_i .

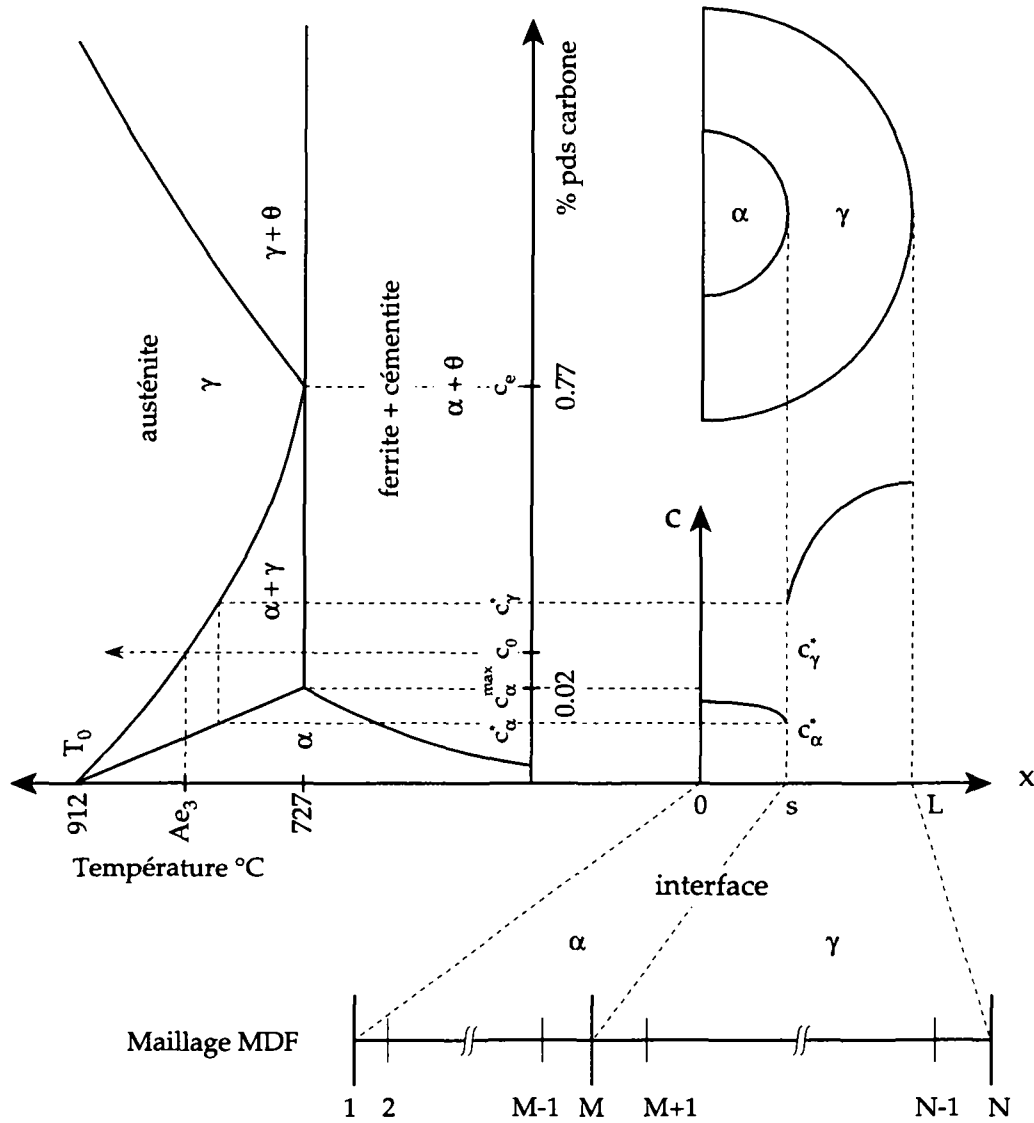


Fig. 4.16 : Représentation du domaine $[0,L]$ utilisé dans le modèle 1D, des profils de concentration dans les phases α et γ et de leur relation avec le diagramme d'équilibre.

En utilisant x comme variable d'espace et $s(t)$ pour la position de l'interface, les équations 4.24 et 4.25 deviennent :

$$\frac{\partial c_v}{\partial t} = \frac{1}{x^m} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^m D_v \frac{\partial c_v}{\partial x} \right) \quad v = \begin{cases} \alpha & \text{pour } x \in [0, s(t)] \\ \gamma & \text{pour } x \in [s(t), L] \end{cases} \quad 4.29$$

$$v (c_\alpha^* - c_\gamma^*) = D_\gamma \left(\frac{\partial c_\gamma}{\partial x} \right)^* - D_\alpha \left(\frac{\partial c_\alpha}{\partial x} \right)^* \quad \text{pour } x = s(t) \quad 4.30$$

Le paramètre géométrique m est égal à 0, 1 ou 2 pour les géométries cartésienne, cylindrique ou sphérique, respectivement. Les conditions de bord et initiales sont données par :

$$\frac{\partial c_v}{\partial x} = 0 \quad x = 0, L \quad 4.31$$

$$c(x,0) = \begin{cases} c_\alpha(T_i) & \text{pour } x \in [0, s(t)] \\ c_\gamma(T_i) & \text{pour } x \in [s(t), L] \end{cases} \quad 4.32$$

La résolution des équations 4.29 à 4.32 est effectuée au moyen d'une méthode de différences finies avec une procédure de transformation de coordonnées permettant de prendre en compte le déplacement de l'interface. Les détails de la méthode figurent dans l'annexe 7.5.

Modèle 2D

La modélisation des transformations de phases diffusives en deux dimensions introduit un problème supplémentaire par rapport à l'équivalent monodimensionnel. Il s'agit en effet de décrire la géométrie des interfaces et leur évolution en plus de la résolution de l'équation de diffusion. La description de la morphologie des phases peut parfois s'avérer très complexe, notamment lorsque l'interface est instable et adopte une morphologie cellulaire ou dendritique. Dans ce cas, la prise en compte de l'énergie de surface est indispensable car cette dernière contrôle la morphologie de la microstructure. Le cas de la transformation de ferrite en austénite lors du chauffage d'un acier hypoeutectoïde est toutefois plus simple à traiter car, comme nous le verrons plus loin, la transformation se déroule avec des interfaces α/γ stables. Les effets de l'énergie de surface peuvent donc être négligés. Cette hypothèse est à la base du modèle présenté ici.

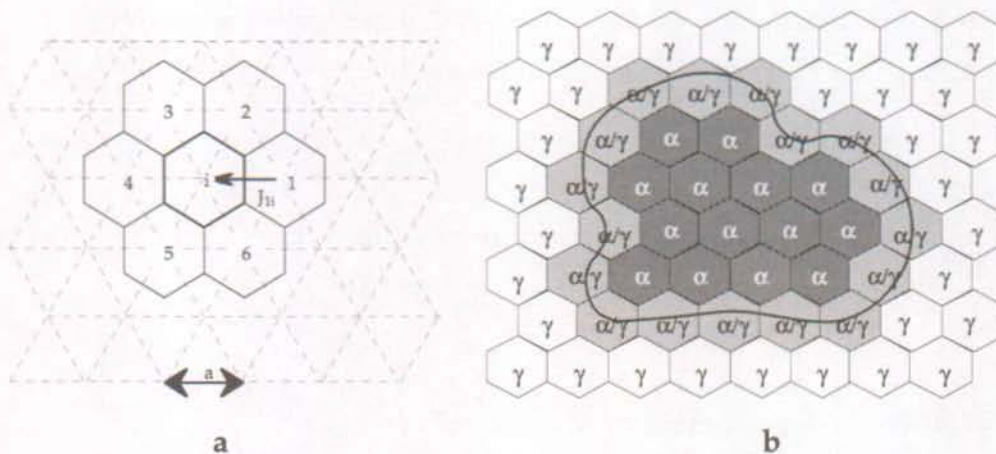


Fig. 4.17 : réseau hexagonal utilisé dans le modèle 2D pour résoudre l'équation de diffusion. La flèche indique le flux de carbone provenant du voisin 1 de la cellule i . La partie de droite illustre la couche de cellules d'interface séparant les domaines α et γ .

Le problème posé par les équations 4.24 à 4.27 est résolu par une méthode de volumes finis utilisant le maillage hexagonal régulier présenté à la figure 4.17. Chaque cellule hexagonale peut prendre trois états différents : ferritique (α), austénitique (γ) ou interface (α/γ). Les cellules ferritiques ne sont jamais en contact avec des cellules austénitiques, mais toujours séparées par une couche de cellules d'interface (v. Fig. 4.17 (b)). Chaque cellule i possède une valeur de concentration c_i et pour les cellules d'interfaces, trois variables supplémentaires, $c_i^{\alpha*}$, $c_i^{\gamma*}$ et f_i^α , qui désignent respectivement les concentrations à l'interface dans les phases α et γ et la fraction de ferrite dans la cellule. Les valeurs $c_i^{\alpha*}$ et $c_i^{\gamma*}$ sont données directement par le diagramme de phases selon l'hypothèse d'équilibre local. La fraction de ferrite dans la cellule d'interface, f_i^α , est obtenue par la règle des leviers :

$$f_i^\alpha = \frac{c_i^{\gamma^*} - c_i}{c_i^{\gamma^*} - c_i^{\alpha^*}} \quad . \quad 4.33$$

où c_i est la concentration moyenne dans la cellule.

La diffusion du carbone entre les cellules est calculée par une méthode de volumes finis. Un bilan est effectué pour chacune d'elles en considérant les concentrations des six voisins directs :

$$V \frac{\Delta c_i}{\Delta t} = \sum_{k=1}^6 S J_{ki} \quad 4.34$$

avec

$$V = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 \quad \text{et} \quad S = \frac{a}{\sqrt{3}} \quad 4.35$$

La lettre a désigne le paramètre du réseau hexagonal défini à la Fig. 4.17 et V et S la surface et la longueur des arêtes des cellules respectivement. Le symbole Δt représente le pas de temps, alors que Δc_i désigne la variation en carbone dans la cellule i et J_{ki} le flux de soluté provenant du k -ième voisin de la cellule i ($k = 1, 6$).

Le flux de soluté est calculé en fonction de l'état des cellules voisines :

a) Les cellules k et i appartiennent à la même phase v (α ou γ),

$$J_{ki} = D_v(\bar{c}, T) \frac{c_k - c_i}{a} \quad \text{avec} \quad \bar{c} = \frac{c_k + c_i}{2} \quad 4.36$$

b) La cellule i appartient à la phase v alors que la cellule k est sur l'interface :

$$J_{ki} = D_v(\bar{c}, T) \frac{c_k^{v^*} - c_i}{a} \quad \text{avec} \quad \bar{c} = \frac{c_k^{v^*} + c_i}{2} \quad 4.37$$

c) Les cellules k et i appartiennent à l'interface¹ :

$$J_{ki} = \bar{f}_\alpha D_\alpha(\bar{c}_\alpha, T) \frac{c_k^{\alpha^*} - c_i^{\alpha^*}}{a} + (1 - \bar{f}_\alpha) D_\gamma(\bar{c}_\gamma, T) \frac{c_k^{\gamma^*} - c_i^{\gamma^*}}{a} \quad \text{avec} \quad 4.38$$

$$\bar{c}_\gamma = \frac{c_k^{\gamma^*} + c_i^{\gamma^*}}{2}, \quad \bar{c}_\alpha = \frac{c_k^{\alpha^*} + c_i^{\alpha^*}}{2} \quad \text{et} \quad \bar{f}_\alpha = \frac{f_i^\alpha + f_k^\alpha}{2} \quad 4.39$$

Pour éviter les effets de bord, des conditions aux limites de type périodique sont utilisées. Les cellules situées sur le bord gauche du domaine sont donc voisines des cellules du bord droit et de même pour les bords supérieur et inférieur. Le pas de temps est défini par le critère de stabilité d'un schéma explicite :

$$\Delta t < \frac{a^2}{4 D_{\max}} \quad 4.40$$

¹ Cette formulation donne un flux $J_{ki} = 0$ si l'effet de la courbure est négligé et la température uniforme (i.e. interface donnée par une iso-concentration).

où D_{\max} est le maximum du coefficient de diffusion sur l'ensemble du domaine. La valeur de Δt varie au cours du calcul en fonction de l'évolution du coefficient de diffusion.

Pour les cellules d'interface, la concentration obtenue à la fin d'un pas de temps sont converties en une nouvelle fraction de phase, f_i^α , selon l'équation 4.33. Si la fraction de ferrite déduite tombe en dessous de zéro, la cellule est incorporée à la phase austénitique. Ses voisines à l'état ferritique prennent alors l'état de cellule d'interface afin d'éviter le contact direct entre cellules ferritiques et austénitiques. Le modèle prévoit également le cas de la transformation inverse (refroidissement), où les cellules d'interface passent dans la phase ferritique lorsque leur fraction f_i^α excède l'unité.

Modèle 3D

Le modèle tridimensionnel est basé sur une méthode très similaire à celle de la version 2D. Le maillage utilisé est toutefois différent : il est constitué d'un réseau de cellules cubiques pavant un domaine en forme de parallélépipède. Comme dans la version 2D, les cellules ont trois états possibles : α , γ ou α/γ . Une cellule α n'a jamais de face commune avec une cellule γ . En revanche, les deux cellules peuvent partager une arête ou un sommet (2^e et 3^e voisins autorisés).

L'évolution de la concentration dans les cellules est calculée avec l'équation 4.34 où la sommation est effectuée sur les six premiers voisins du réseau cubique. Les grandeurs V et S diffèrent toutefois de celles du modèle 2D :

$$V = a^3 \quad \text{et} \quad S = a^2 \quad 4.41$$

où a est la dimension (côté) des cellules cubiques.

Les équations 4.36 à 4.40 s'appliquent sans modification à l'exception du pas de temps donné par :

$$\Delta t < \frac{a^2}{6 D_{\max}} \quad 4.42$$

4.2.2 Travail expérimental

La cinétique d'austénitisation d'un acier hypoeutectoïde a été déterminée expérimentalement par dilatométrie. Le but de ces mesures était de disposer d'un jeu de données expérimental permettant d'effectuer des comparaisons avec la simulation en ayant une connaissance précise des conditions utilisées. Elles permettront également de déterminer l'influence de la microstructure initiale sur la cinétique de transformation.

Procédure

Les échantillons utilisés (cylindres de 4 mm de diamètre et 75 mm de longueur) ont été soumis à un traitement thermique préalable afin de contrôler la microstructure initiale. Pour étudier l'influence de cette dernière, deux traitements thermiques ont été appliqués. Le premier (traitement A) consiste en une austénitisation au four à 950°C avec une rampe de chauffage de 5°C/s et un temps de maintien de 300 s. Le refroidissement consécutif est effectué dans le four à la vitesse de -0.1°C/s. Dans le second traitement (B), les conditions d'austénitisation sont identiques, mais la vitesse de refroidissement est plus

élevée (-10°C/s). Chaque traitement thermique a été appliqué à 10 éprouvettes de dilatométrie. Un échantillon est destiné à la caractérisation de la microstructure par métallographie. L'acier utilisé est le Ck45, dont la composition chimique est donnée dans le tableau 3.1.

La cinétique d'austénitisation a été mesurée en fonction de la vitesse de chauffage. Les mesures à des vitesses inférieures à 2°C/s ont été réalisées à l'aide d'un dilatomètre absolu. L'appareil est constitué d'un tube en silice en forme de U transmettant les variations de la longueur de l'éprouvette par le biais d'un capteur à induction. Le chauffage est assuré par un four placé autour du système. Les mesures à des vitesses supérieures à 2°C/s ont été effectuées sur une installation Gleeble 1500 permettant de simuler des comportements thermomécaniques. La dilatation est mesurée sur le diamètre de l'éprouvette et le chauffage réalisé par la circulation d'un courant dans la pièce.

Traitement thermique	Vitesse de chauffage \dot{T} [$^{\circ}\text{C/s}$]	Dilatomètre	Température de fin d'austénitisation A_f [$^{\circ}\text{C}$]
A	0.17	absolu	795
A	0.8	absolu	807
A	0.98	absolu	804
A	1.11	absolu	804
A	2.75	Gleeble 1500	811
A	8.8	Gleeble 1500	857
A	25.1	Gleeble 1500	875
B	0.19	absolu	787
B	0.7	absolu	790
B	1.0	absolu	790
B	2.75	Gleeble 1500	795
B	8.8	Gleeble 1500	798
B	25.1	Gleeble 1500	816

Tableau 4.2 : Conditions et résultats des mesures de dilatométrie.

Résultats

Les microstructures obtenues par les traitements thermiques A et B sont illustrées à la figure 4.18. Le traitement A, qui est effectué avec une vitesse de refroidissement très faible, conduit à une microstructure proche de l'équilibre thermodynamique. La fraction volumique de ferrite mesurée atteint en effet la valeur de 0.4, alors que la règle des leviers donne un taux de 0.43 pour un alliage de 0.45%C. Le volume restant est occupé par de la perlite lamellaire.

L'échantillon issu du traitement thermique B se caractérise quant à lui par une fraction volumique de ferrite plus faible (0.29). La vitesse de refroidissement relativement rapide est responsable de la teneur réduite en phase

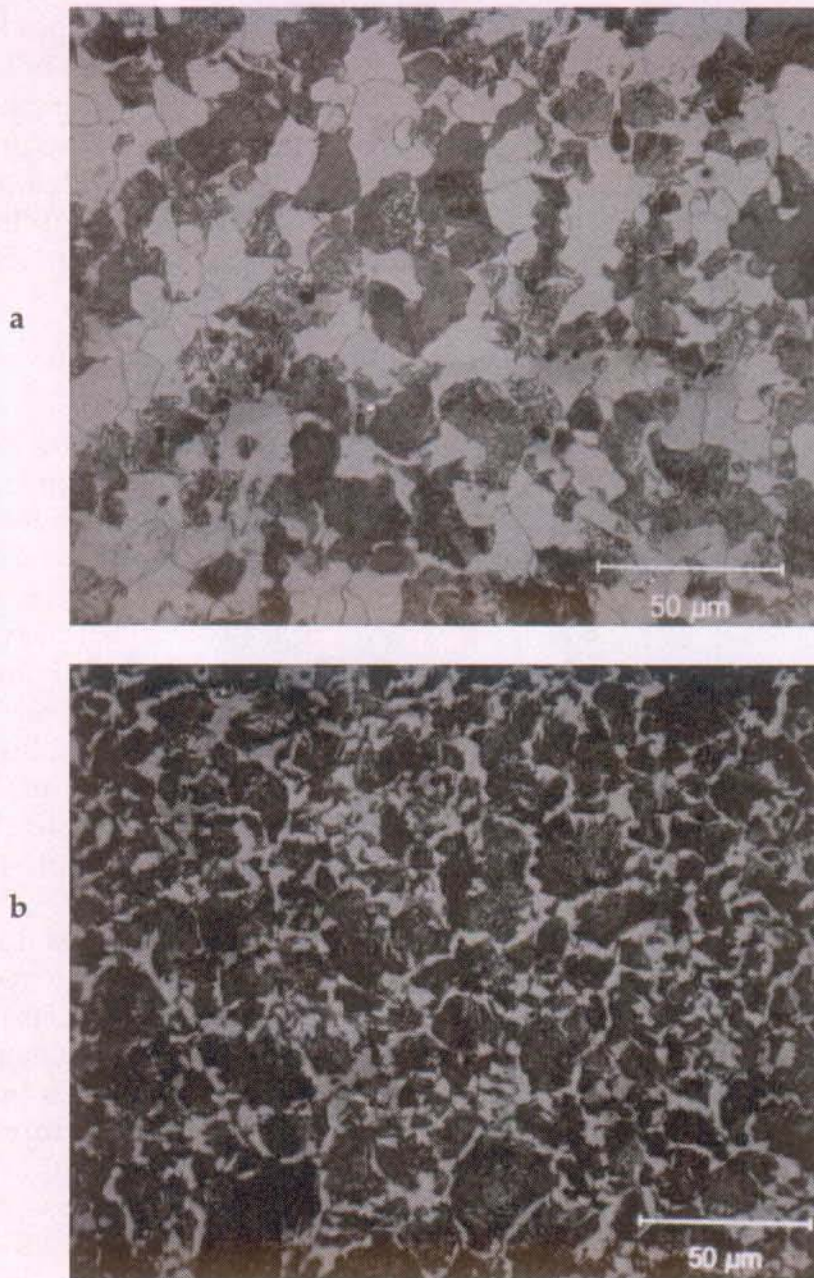


Fig. 4.18 : Microstructures avant austénitisation des échantillons ayant subi le traitement thermique A (refroidissement lent) (a) et le traitement thermique B (refroidissement rapide) (b).

proeutectoïde. La taille caractéristique des zones perlitiques est toutefois du même ordre de grandeur que celle des échantillons A. Cette observation est expliquée par une taille de grain austénitique similaire dans les deux cas (mêmes conditions d'austénitisation).

Les températures de fin d'austénitisation déterminées par dilatométrie, A_f , sont données dans le tableau 4.2 en fonction de la vitesse de chauffage, \dot{T} , et du traitement thermique initial. Comme attendu, la température de fin de transformation se situe peu au-dessus de A_{e3} (777°C) pour les vitesses de chauffage les plus faibles. Lorsque la vitesse augmente, la transformation se termine à des températures plus élevées. Cet effet traduit des conditions de transformation qui sont de plus en plus éloignées de l'équilibre thermodynamique lorsque \dot{T} augmente. Pour une vitesse de chauffage donnée, la

microstructure B montre une cinétique d'austénitisation plus rapide que la A. Ce phénomène provient de la différence entre les fractions volumiques initiales de ferrite. Le temps de dissolution de la ferrite proeutectoïde est en effet plus court pour les échantillons B car l'essentiel de la microstructure est constitué de perlite dont la transformation en austénite a lieu peu au-dessus de la température eutectoïde. Ces résultats sont présentés sous forme de graphique à la section 4.2.4 consacrée à la comparaison des résultats expérimentaux et simulés (Fig. 4.31).

4.2.3 Résultats de simulation

Validation

Les trois versions du modèle (1D, 2D et 3D) ont d'abord été appliquées à un problème monodimensionnel afin de pouvoir les comparer directement entre elles. Le cas considéré est constitué d'un domaine en forme de parallélépipède divisé en une zone de ferrite et une zone d'austénite selon une interface plane. Le calcul débute à la température eutectoïde avec des concentrations en carbone uniformes dans l'austénite et dans la ferrite (0.77% et 0.02% respectivement). La fraction de ferrite initiale est déterminée à partir de la composition nominale (0.45%) et de la règle des leviers. La température du domaine est ensuite augmentée avec une vitesse constante $\dot{T} = 0.1^\circ\text{C/s}$. L'hypothèse d'équilibre local à l'interface permet de déduire les concentrations à l'interface $c_\alpha^*(T)$ et $c_\gamma^*(t)$ en fonction de l'histoire thermique. Pour ce cas test, le coefficient de diffusion du carbone dans les deux phases a été supposé constant ($D_\alpha = 1 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$, $D_\gamma = 2.5 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$).

La figure 4.19 (a) illustre la position de l'interface α/γ et deux iso-lignes du champ de concentration obtenues avec les modèles 1D, 2D et 3D pour un temps de chauffage de 720 s. Les paramètres utilisés pour les calculs sont donnés dans le tableau 4.3. On observe que l'interface reste plane pendant le déroulement de la transformation quel que soit le nombre de dimensions considérées. Les profils de concentration obtenus avec les trois modèles peuvent être comparés directement à la figure 4.19 (b) où ils sont représentés à 7 instants différents (de 0 à 1440 s). L'accord obtenu est entièrement satisfaisant : la seule différence observable se situe dans la région de l'interface où le saut de concentration est réparti sur une couche de cellule dans les modèles 2D et 3D, alors qu'il est abrupt dans le modèle de suivi de front 1D. Le maillage plus grossier utilisé dans le modèle 3D explique la différence avec la version 2D. On peut ainsi conclure de ces calculs préliminaires que l'algorithme mis au point pour décrire le déplacement des interfaces en 2 et 3 dimensions prédit des cinétiques de transformations équivalentes à celles d'une technique de suivi de front. En outre, il n'introduit pas d'instabilités d'interface pour le cas traité.

Modèle	Maillage				Pas de temps	Temps CPU
	N_x	N_y	N_z	Taille de maille		
1D	1000	-	-	10^{-7} m	2 s	20 s
2D	200	40	-	$5 \cdot 10^{-7} \text{ m}$	0.02 s	50 min
3D	100	20	20	10^{-6} m	0.08 s	4 h

Tableau 4.3 : Paramètres utilisés pour le cas de validation.

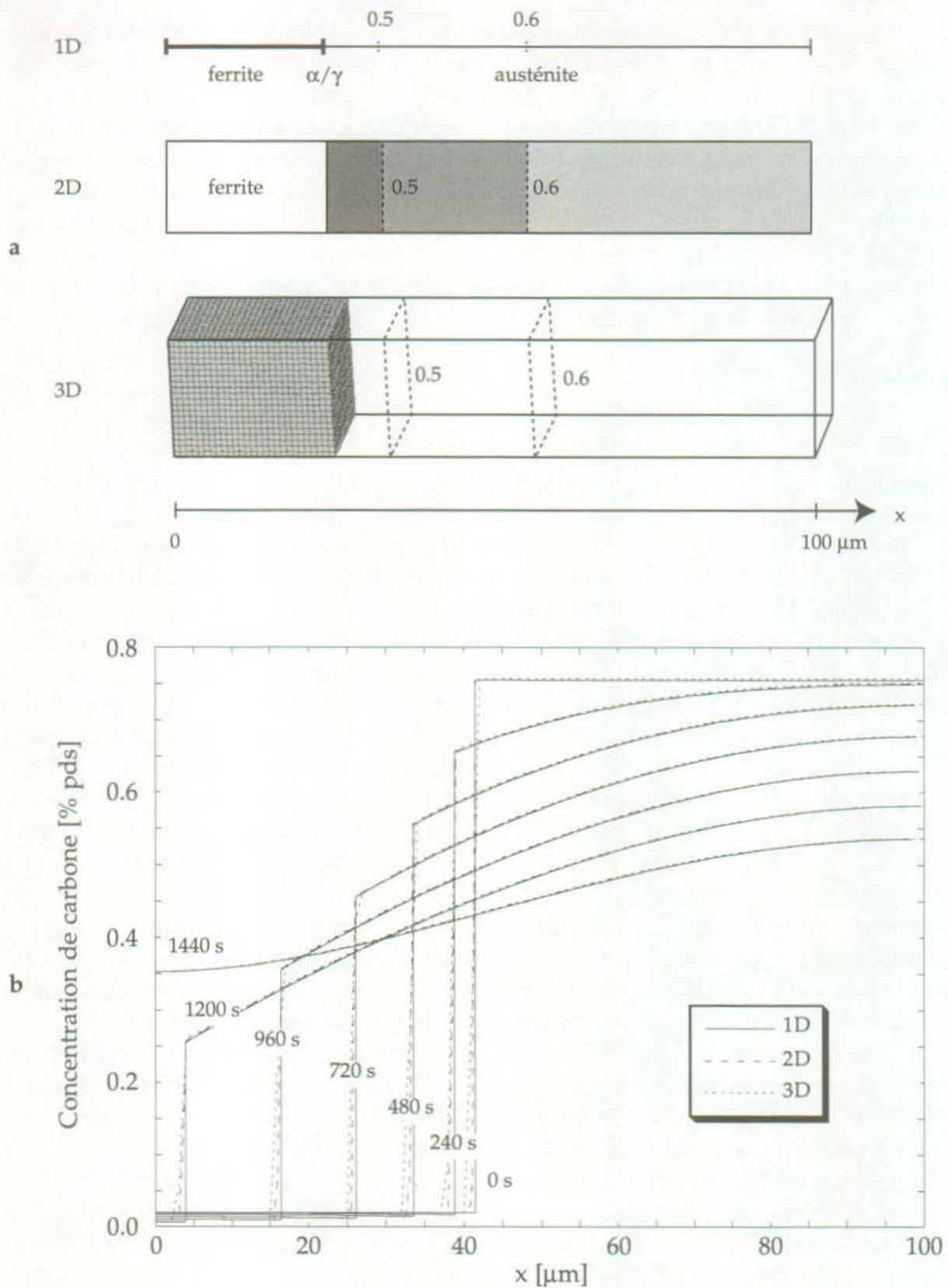


Fig. 4.19 : (a) Champ de concentration au temps $t = 720$ s prédit par les modèles 1D, 2D et 3D. Les lignes en traitsillés indiquent la position des iso-concentrations 0.5 et 0.6% C. ($\dot{T} = 0.1^\circ\text{C/s}$, $c_0 = 0.45\%$, $D_\alpha = 1 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$, $D_\gamma = 2.5 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$). (b) Comparaison des profils de concentration prédits par les trois modèles pour le même cas.

Résultats 1D

Le modèle 1D a été appliqué à la prédiction de la cinétique d'austénitisation d'un alliage Fe-0.49%C. Les calculs ont été réalisés avec différentes vitesses de chauffage (0.05, 0.22, 1, 3, 10, 30, 100, 300, 1200 et 2400°C/s) et différentes tailles de domaine (2, 5, 8, 10, 12, 15 et 20 μm). Les conditions initiales ont été déterminées selon la procédure décrite dans le paragraphe précédent. Pour obtenir des cinétiques plus réalistes, le coefficient de diffusion du carbone dans l'austénite a été considéré comme dépendant de la température et de la concentration. Les valeurs utilisées ont été reprises de l'approche de Bhadeshia (1981) (c.f. annexe 7.6). La diffusivité du carbone dans la ferrite est calculée en fonction de la température uniquement, selon la relation suivante (Wert, 1950) :

$$D_{\alpha}(T) = D_{0\alpha} \exp(-Q_{\alpha}/RT) \quad \text{avec}$$

$$D_{0\alpha} = 2 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s} \quad \text{et} \quad Q_{\alpha} = 84100 \text{ J/mol} \quad 4.43$$

Les calculs ont été réalisés avec un maillage régulier de 1000 noeuds (500 dans chaque phase).

Les températures de fin d'austénitisation, A_f , correspondant à la disparition de la phase ferritique dans le domaine ont été représentées en fonction de la vitesse de chauffage à la figure 4.20. On peut remarquer sur ce diagramme TTA que la température A_f est comprise entre 2 limites. A très faible vitesse de chauffage (0.05°C/s), la transformation se déroule à l'équilibre thermodynamique et s'achève juste au-dessus de Ae_3 (777°C, v. Fig. 4.16). La concentration en carbone reste dans ce cas uniforme dans les deux phases pendant toute la durée de la transformation. A vitesse élevée, la transformation se termine vers T_0 (912°C), température à laquelle a lieu la transformation du fer α (pur) en fer γ . Cette limite est liée à l'hypothèse d'équilibre local qui conduit à des concentrations à l'interface tendant vers zéro lorsque T_0 est approché. Les vitesses de transformation deviennent alors très élevées et forcent la transformation à se terminer avant que T_0 ne soit atteint. En réalité, l'équilibre local n'est probablement pas vérifié lorsque la vitesse de chauffage est très élevée. Une discussion sur la validité de l'hypothèse de l'équilibre thermodynamique à l'interface sera présentée plus loin dans le texte (c.f. paragraphe 4.2.4).

Les calculs effectués pour différentes tailles de domaine permettent d'étudier l'effet de la microstructure initiale sur la cinétique d'austénitisation. Les résultats présentés à la figure 4.20 montrent que l'échelle de la microstructure exerce une forte influence sur la durée de la transformation. Par exemple, en augmentant la taille du domaine de calcul de 2 μm à 20 μm , A_f passe de 775°C à 870°C. L'intervalle de température sur lequel la transformation se déroule est ainsi augmenté d'un facteur 3 environ (50°C pour la microstructure fine contre 145°C pour la plus grossière). Ce résultat démontre l'importance de la prise en compte de la microstructure initiale dans l'estimation des cinétiques d'austénitisation. Il souligne également l'utilité de la simulation en tant qu'outil complémentaire aux données expérimentales habituellement éparses dans le domaine des transformations de phase au chauffage.

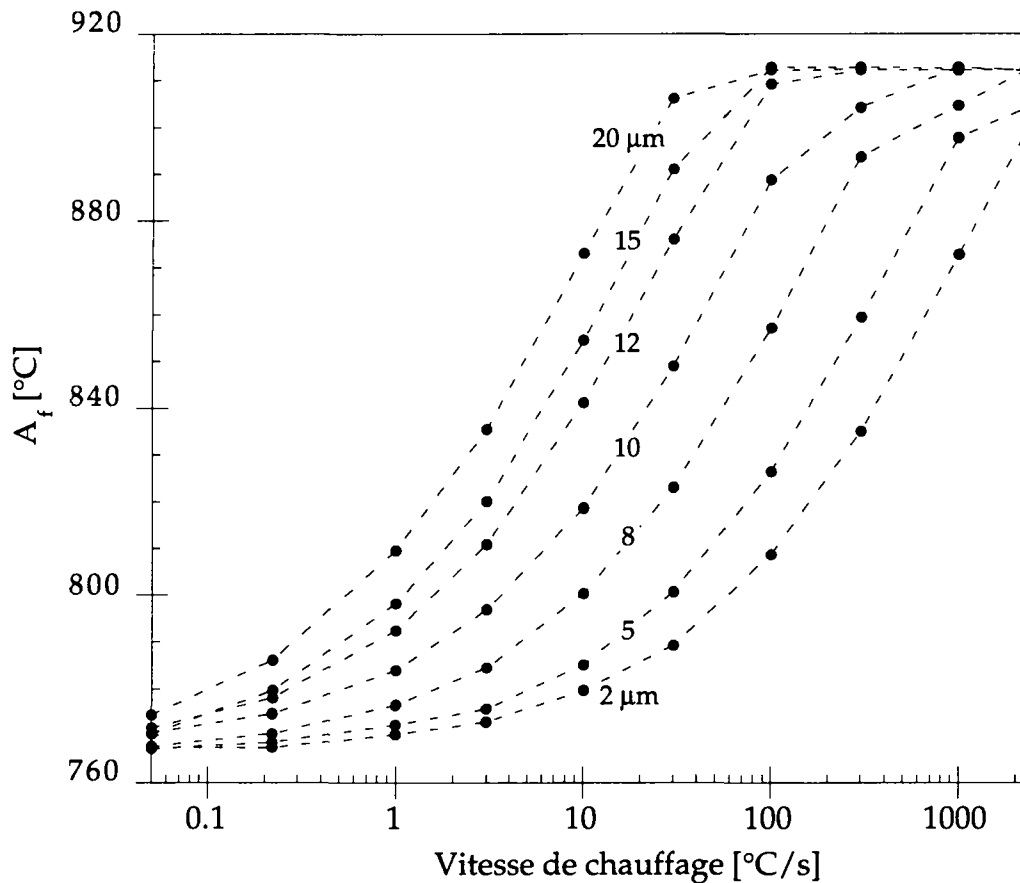


Fig. 4.20 : Température de fin d'austénitisation en fonction de la vitesse de chauffage et de la taille du domaine, calculée avec le modèle 1D pour un alliage Fe-0.49%C.

Résultats 2D

La première étape d'une modélisation bidimensionnelle est la génération d'une microstructure initiale réaliste. La procédure adoptée est basée sur un calcul numérique de la croissance d'un ensemble de grains dont la position est choisie aléatoirement dans le volume. Le calcul est poursuivi jusqu'à l'obtention d'un domaine entièrement rempli. La phase à laquelle les grains appartiennent (perlite ou ferrite) est attribuée au hasard selon une probabilité égale à la fraction volumique souhaitée. La phase attribuée à chaque cellule du réseau est calculée à partir d'un ensemble de temps de capture $\{t_j^i\}$ défini comme suit. Le temps t_j^i auquel un grain j capture la cellule i est donné par :

$$t_j^i = \tau_j + d_{ij} / v \quad 4.44$$

où v est la vitesse de croissance des grains, τ_j l'instant de germination du grain j et d_{ij} la distance qui sépare le centre du grain j de la cellule i . Le grain capturant la cellule i est celui dont le temps t_j^i est le plus petit parmi l'ensemble des temps de capture, c'est-à-dire $t_k^i = \min \{t_j^i\}$. La phase du grain j est ainsi attribuée à la cellule i . Afin de tenir compte des conditions aux limites périodiques, les grains sont dupliqués dans les huit domaines rectangulaires entourant le domaine de calcul.

Le résultat de la procédure d'initialisation est montré à la figure 4.21 (a) pour un alliage Fe-0.49%C. Cette microstructure de $12.5 \mu\text{m} \times 12.5 \mu\text{m}$ a été obtenue avec

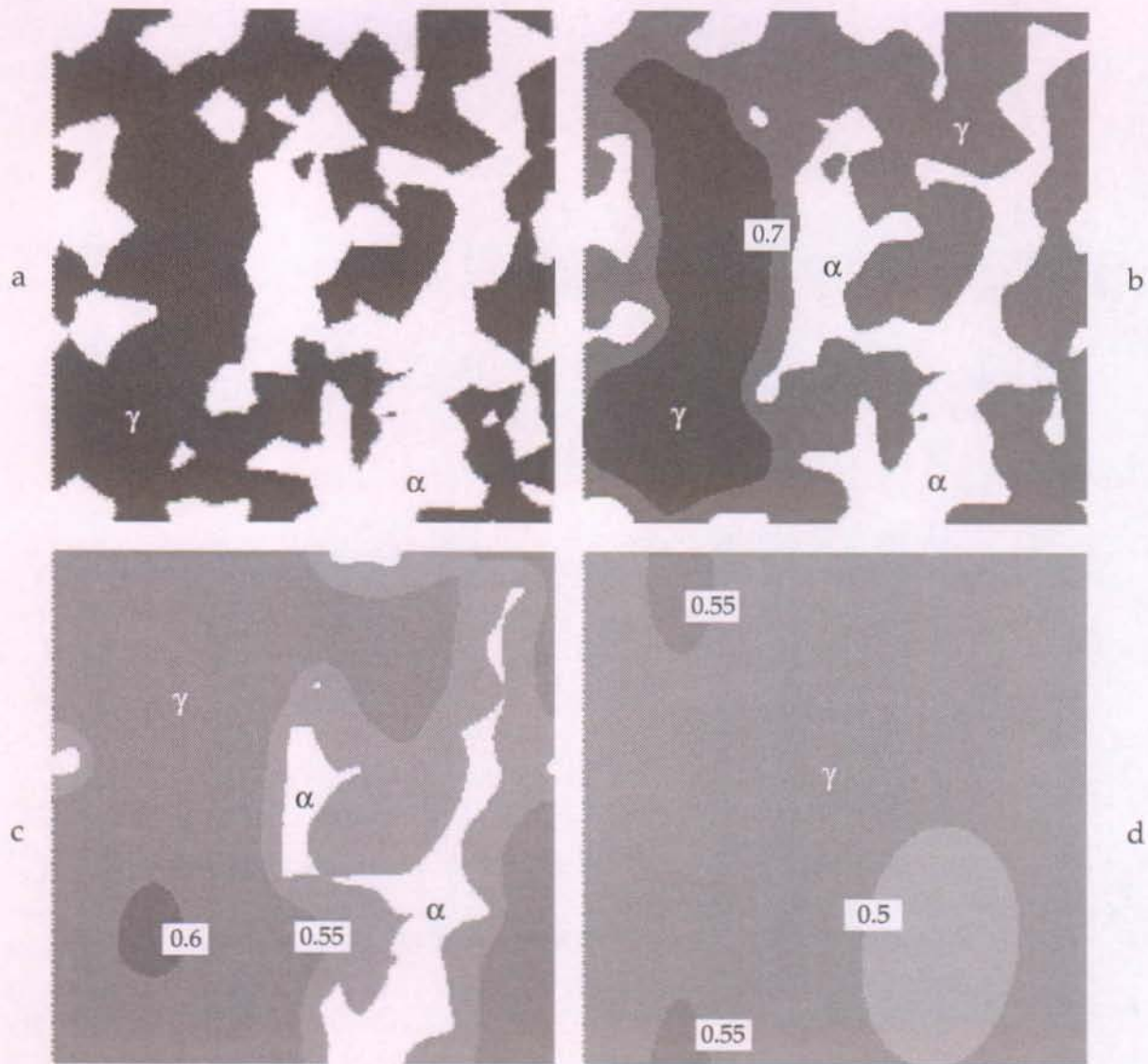


Fig. 4.21 : Evolution de la microstructure pendant l'austénitisation d'un alliage Fe-0.49%C calculée avec le modèle 2D pour une vitesse de chauffage de 10°C/s. La microstructure est présentée aux temps 0, 2.5, 5 et 8 s. Les zones blanches correspondent aux régions ferritiques qui sont progressivement dissoutes dans la matrice austénitique (en foncé). Les valeurs indiquées correspondent à des iso-lignes du champ de concentration dans l'austénite (12.5 μm x 12.5 μm , 11600 cellules).

une densité de $1 \cdot 10^{12}$ grains/ m^2 , qui, par l'agglomération des grains de même phase, mène à des zones de ferrite d'une taille moyenne d'environ 5 μm . Les zones claires représentent la phase ferritique (41% de la surface) alors que la matrice foncée correspond à l'austénite provenant de la dissolution des zones perlitiques. Les calculs ont été réalisés avec un maillage de 100 x 116 cellules, un paramètre de maille $a = 0.125 \mu\text{m}$ et un pas de temps d'environ 10^{-3} s. Le résultat de la simulation est présenté à la figure 4.21 pour 4 instants différents (0, 2.5, 5 et 8 s). Les tons de gris indiquent la répartition du carbone dans l'austénite. La figure 4.21 (d) montre un domaine entièrement austénitique et une concentration presque homogène (comprise entre 0.48 et 0.57%C). On peut observer que, durant la transformation, les angles des zones de ferrite s'arrondissent en raison d'une diffusion plus rapide dans ces régions. En revanche, aucune instabilité d'interface n'est observée. Les calculs n'ont d'ailleurs jamais conduit à des instabilités morphologiques, quelles que soient les vitesses de chauffage appliquées. La

physique du processus de dissolution, qui est similaire à celle de la solidification de gouttelettes liquides, semble être à l'origine de la stabilité observée. Une analyse de stabilité qualitative est présentée à la figure 4.22. Il apparaît en effet qu'une perturbation concave de l'interface α/γ provoque une diminution locale du gradient de concentration. La réduction de la vitesse de transformation qui en découle tend à faire disparaître la perturbation.

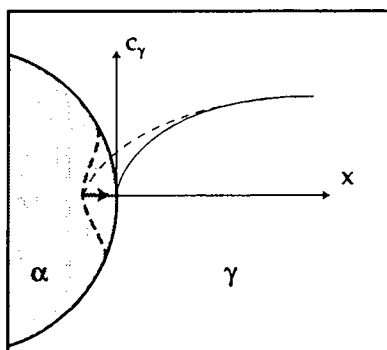


Fig. 4.22 : Analyse qualitative de la stabilité de l'interface α/γ lors de la dissolution de la ferrite. Une augmentation locale de la vitesse de dissolution (formation d'une perturbation concave) conduit à une diminution du gradient de concentration à l'interface dans la phase γ . La réduction de vitesse qui en découle tend à faire disparaître la perturbation. L'interface est donc stable.

Résultats 3D

Un exemple de résultat obtenu avec le modèle 3D est présenté à la figure 4.23. Cette vue en perspective illustre les zones ferritiques d'un alliage Fe-0.6%C après 2.4 s de chauffage à la vitesse de 10°C/s. Le calcul a été effectué dans un domaine de 54 μm x 54 μm x 13.5 μm décrit par un maillage de 1'458'000 cellules cubiques ($a = 0.3 \mu\text{m}$). La situation initiale est constituée d'une microstructure ferrito-perlitique à la température eutectoïde (727°C), générée selon la procédure décrite dans le paragraphe précédent. Comme dans les calculs 2D, les zones perlitiques sont considérées comme étant déjà transformées en austénite et possèdent une concentration uniforme de 0.77%.

Comme les calculs 3D sont très gourmands en temps CPU et en espace mémoire (12 heures CPU et 240 Mbytes de mémoire vive pour le cas décrit ci-dessus), l'application du modèle a été limitée à l'étude des effets stéréologiques. Plus précisément, le modèle a servi à quantifier les erreurs effectuées en considérant l'évolution dans une coupe (modélisation 2D) plutôt que dans un domaine tridimensionnel.

La démarche adoptée a consisté à extraire des coupes de la microstructure initiale du calcul tridimensionnel présenté ci-dessus et de les utiliser comme situation initiale pour des calculs 2D¹. La comparaison est ensuite effectuée sur la base des évolutions prédites par le modèle 2D et par les résultats 3D dans les coupes correspondantes. Le principe de la démarche est illustré à la figure 4.24 (a). Les résultats sont montrés dans la partie (b) de la même figure pour une coupe dans le plan horizontal inférieur (identique au plan supérieur selon le principe des conditions aux limites périodiques) et pour une coupe horizontale à mi-hauteur. La première ligne d'images ($t = 0$ s) montre que les microstructures initiales

¹ Une version du modèle 2D utilisant un réseau de cellules carrées a été développée spécialement pour cette comparaison. La formulation est semblable à celle de la version 3D.

utilisées dans la modélisation 2D sont identiques à celles de la coupe dont elles sont issues. Le processus de dissolution, illustré par les images des lignes suivantes (à 3, 6 et 9 s), se déroule à des vitesses comparables pour les calculs 2D ou 3D. La cinétique semble toutefois être légèrement plus rapide dans le cas tridimensionnel. Les résultats à 6 s montrent en effet un domaine presque entièrement austénitique dans les coupes du domaine 3D, alors que les microstructures 2D correspondantes contiennent encore une fraction de ferrite relativement importante.

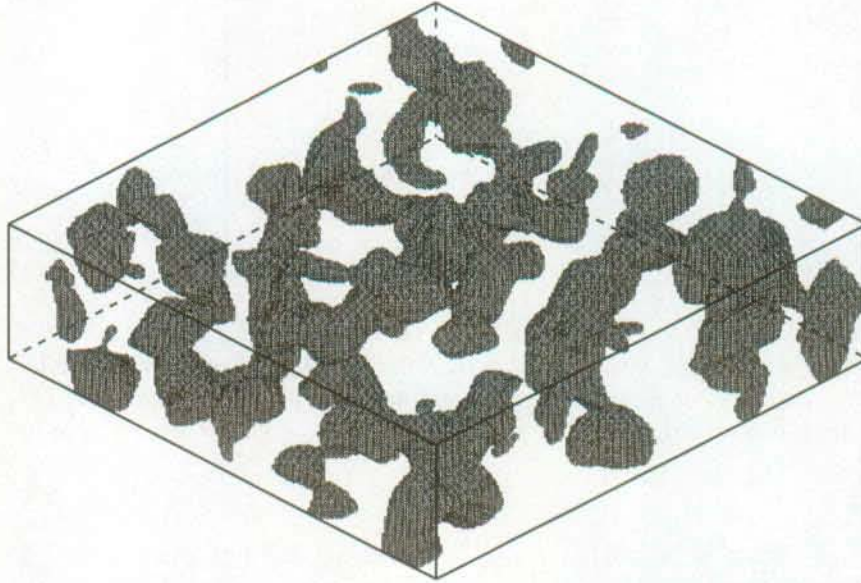


Fig. 4.23 : Exemple d'une microstructure simulée avec le modèle 3D. Les zones foncées correspondent aux zones ferritiques en cours de dissolution, alors que la matrice transparente représente la phase austénitique. (Alliage Fe-0.6%C, $\dot{T} = 10^\circ\text{C/s}$, $t = 2.4$ s).

Les vitesses de dissolution peuvent être comparées plus aisément à la figure 4.25 qui montre l'évolution de la fraction de ferrite calculée avec le modèle 3D pour l'ensemble du domaine et avec le modèle 2D dans quatre coupes horizontales à 0, 25, 50 et 75% de la hauteur du domaine. Il apparaît que les durées de transformation sont du même ordre de grandeur, avec toutefois une décroissance de la fraction volumique de ferrite légèrement plus rapide pour la modélisation tridimensionnelle. La courbe du modèle 3D montre en effet des temps de dissolution environ 15% plus faibles que le modèle 2D. Les faibles écarts observés entre les 4 courbes du modèle 2D permettent d'affirmer que cette différence ne provient pas de fluctuations statistiques dues à un domaine ou à un nombre de grains trop petit. Le résultat traduit par conséquent un effet stéréologique. Ce phénomène peut être mis en parallèle avec la différence observée entre la vitesse de dissolution d'une particule sphérique et celle d'une particule cylindrique. Malgré l'existence d'un effet stéréologique, la modélisation dans une coupe fournit des résultats assez proches d'un calcul tridimensionnel. L'usage du modèle 2D semble donc légitime pour l'estimation des cinétiques d'austénitisation. L'effet démontré ici doit cependant être gardé en tête lorsque les résultats du modèle sont utilisés pour effectuer des comparaisons sur des points précis.

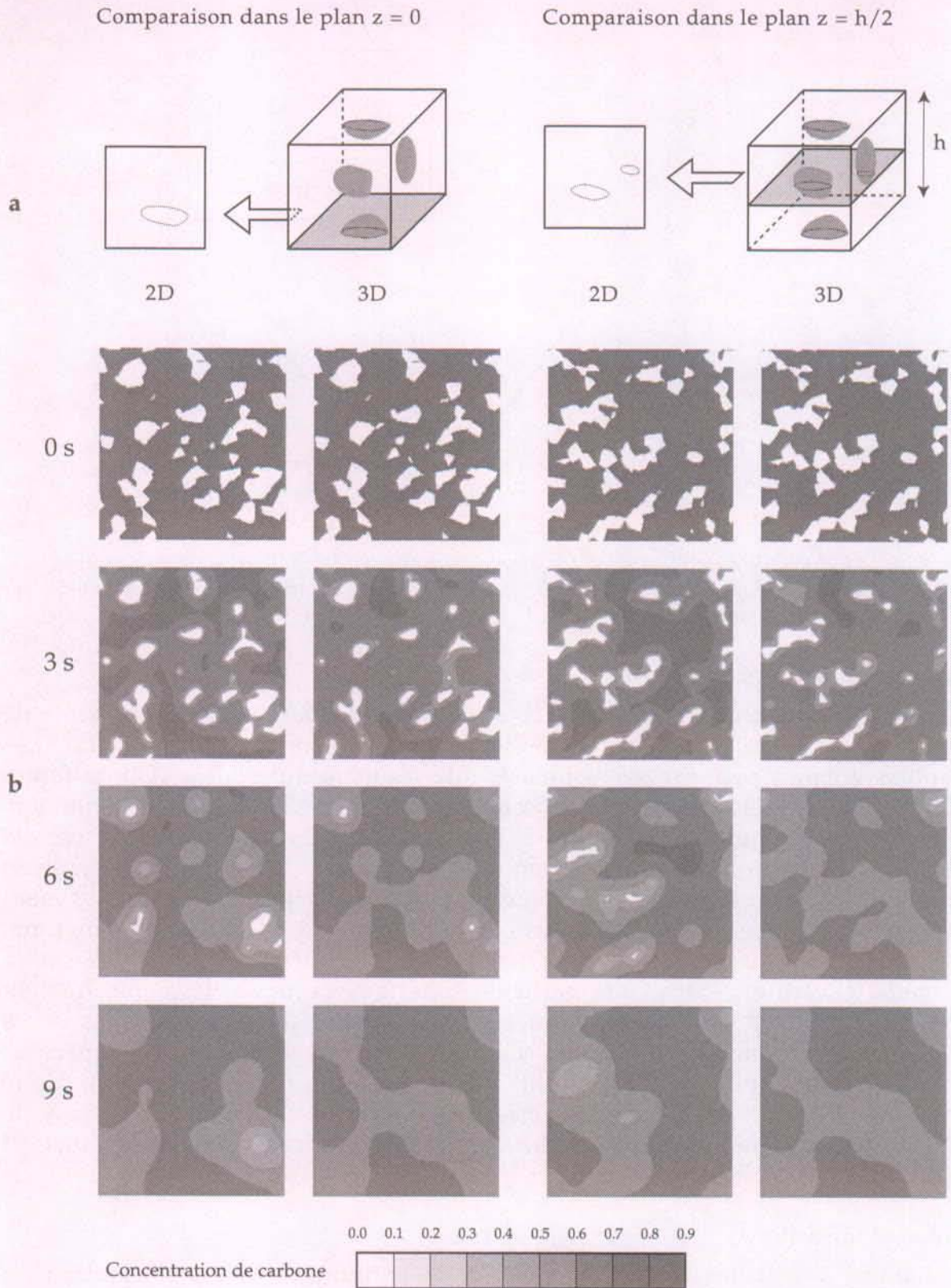


Fig. 4.24 : Comparaison des résultats obtenus avec les modèles 2D et 3D. Les microstructures initiales utilisées dans les calculs 2D sont extraites de la structure tridimensionnelle selon le schéma indiqué dans la partie (a). En (b), leur évolution est comparée à la coupe correspondante dans le domaine 3D. Les zones blanches correspondent aux régions ferritiques. (Fe-0.6\%C , $\dot{T} = 10^\circ\text{C/s}$, $t = 0, 3, 6$ et 9 s).

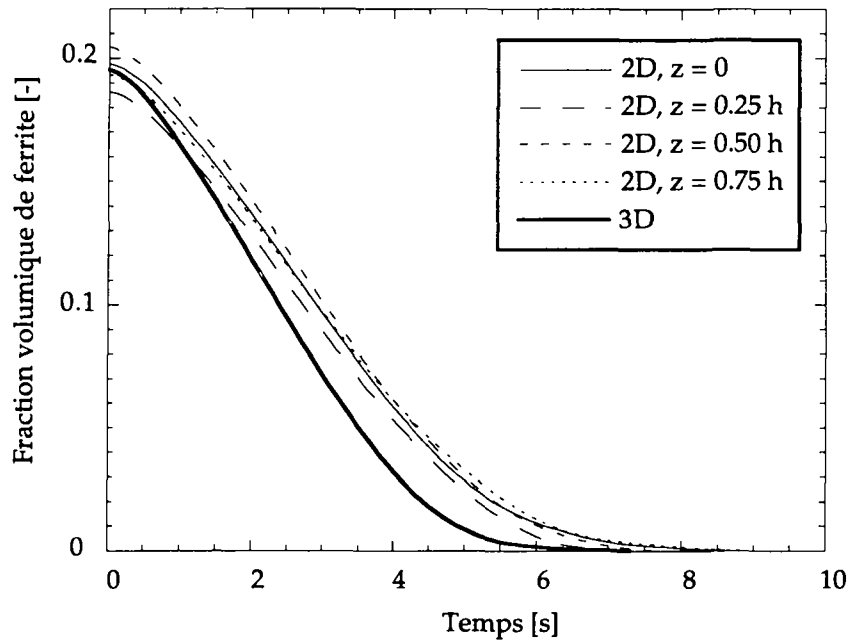


Fig. 4.25 : Cinétique de dissolution de la ferrite prédite par les modèles 2D et 3D. Les microstructures initiales utilisées dans le modèle 2D ont été extraites de la microstructure tridimensionnelle par quatre coupes à des hauteurs différentes.

Calcul de diagrammes TTA

Le calcul 2D présenté à la figure 4.21 a été répété en faisant varier la vitesse de chauffage entre 0.05 et 2400°C/s afin de construire un diagramme TTA. Les résultats obtenus peuvent être comparés aux résultats du modèle 1D à la figure 4.26 (a). Les températures indiquées correspondent à la disparition de la dernière cellule de ferrite ou d'interface. Les calculs 1D présentés sur cette figure ont été réalisés avec un domaine de 4 μm en considérant les trois types de géométries (cartésienne, cylindrique et sphérique). Les trois courbes 1D sont quasiment superposées (à l'exception du modèle cartésien qui montre une cinétique légèrement plus rapide). Ce résultat signifie qu'un cylindre de ferrite se dissout à la même vitesse df_{α}/dt qu'une particule sphérique occupant la même fraction volumique initiale. Les vitesses d'interface différentes (plus rapides dans le cas sphérique en raison d'une diffusion selon les trois dimensions) sont compensées par les rayons initiaux (rayon plus faible dans le cas cylindrique). Cette observation tend à confirmer que l'erreur effectuée en calculant la cinétique de transformation dans une coupe plutôt que dans un domaine tridimensionnel est d'une ampleur limitée.

Homogénéisation

Le modèle a également été appliqué à la description de l'homogénéisation du carbone dans l'austénite après la dissolution de la ferrite. La prédiction d'un temps ou d'une température d'homogénéisation nécessite l'usage d'un critère. Dans les calculs présentés ici, la microstructure a été considérée comme homogène lorsque la différence entre le maximum et le minimum de la concentration dans le domaine était inférieure à 0.5% de la composition nominale. La figure 4.26 (b) montre une comparaison des résultats de simulation obtenus avec les modèles 1D et 2D. Les températures d'homogénéisation, H_f , sont

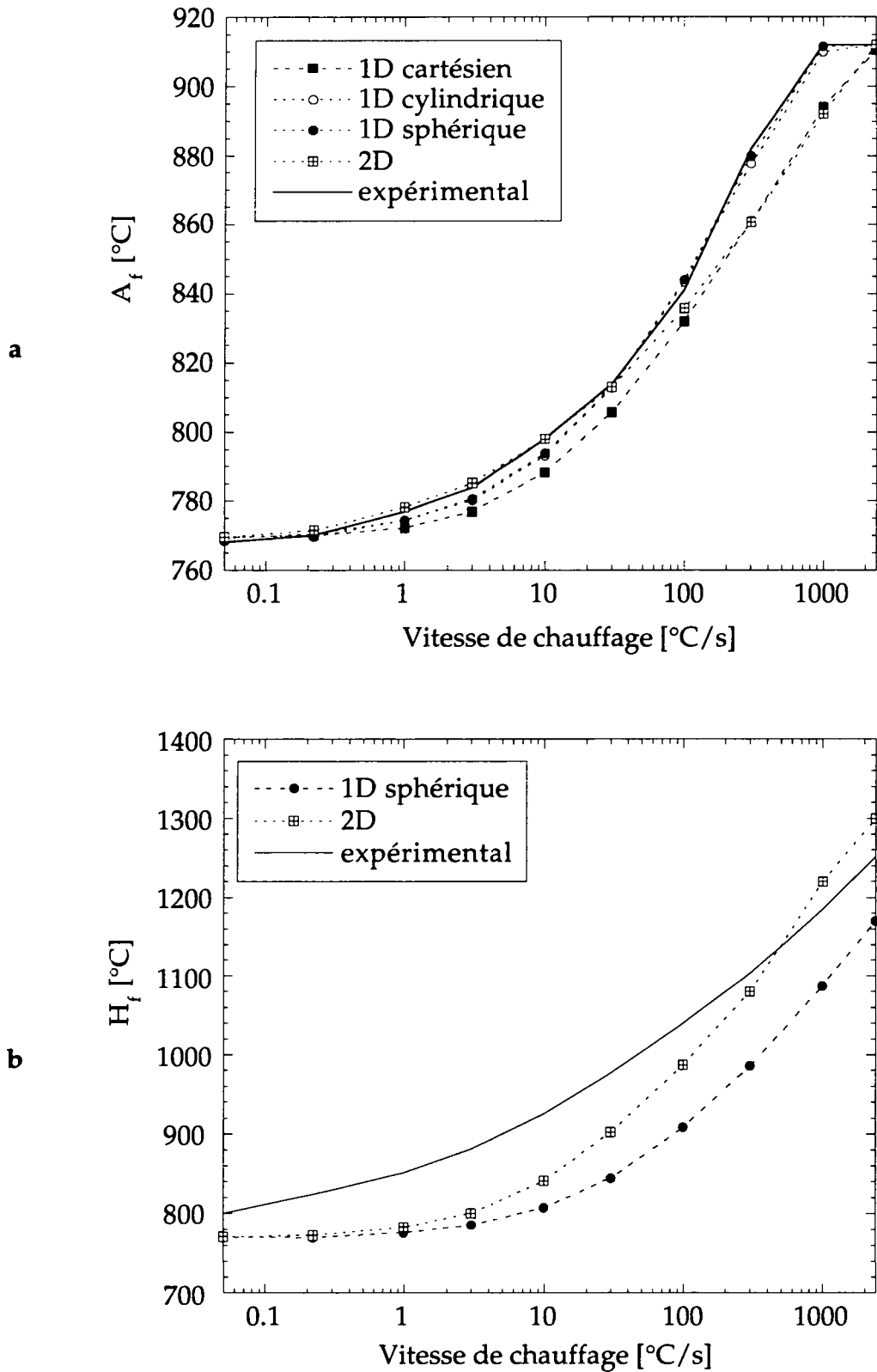


Fig. 4.26 : Température de fin d'austénitisation, A_f , et de fin d'homogénéisation, H_f , en fonction de la vitesse de chauffage calculée pour un alliage Fe-0.49%C. Les résultats expérimentaux sont repris de (Orlich, 1954).

représentées en fonction de la vitesse de chauffage, selon le principe des diagrammes TTA précédents. Les températures calculées avec le modèle 2D sont en moyenne plus élevées que celles obtenues avec le modèle 1D. Cet effet est attribué à l'existence d'une distribution de taille pour les zones de ferrite dans la microstructure bidimensionnelle. La présence de quelques grains de ferrite de taille plus importante retarde en effet l'homogénéisation par rapport au calcul monodimensionnel basé sur une taille moyenne. A très faible vitesse de chauffage, les concentrations restent quasiment uniformes dans les deux phases tout au long de la transformation et la température d'homogénéisation correspond à celle de la fin de la transformation. L'écart entre les modèles 1D et 2D disparaît dans ce cas.

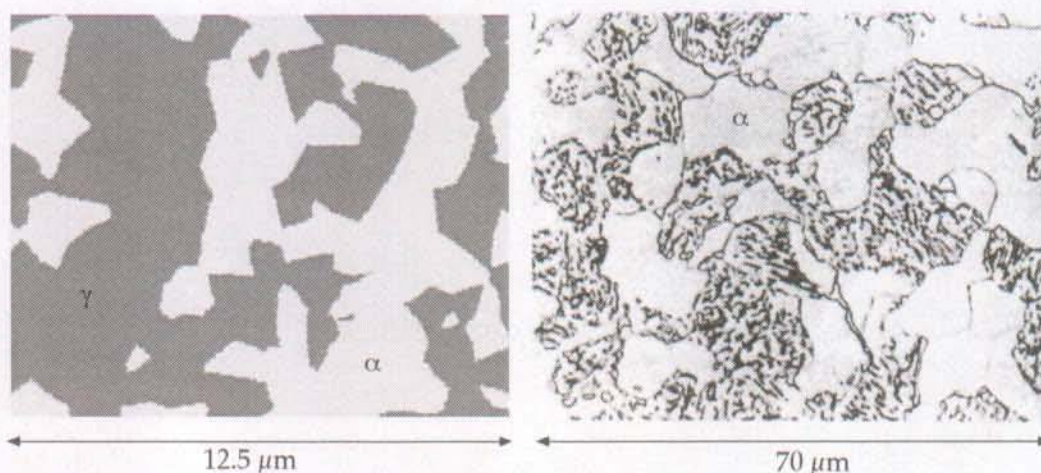


Fig. 4.27 : Microstructures initiales correspondant aux résultats de la figure 4.26. (a) Situation initiale de la simulation 2D. (b) Micrographie d'un échantillon avant austénitisation (Orlich, 1954).

4.2.4 Comparaison et discussion

Comparaison avec les résultats de la littérature

Les résultats expérimentaux de l'"Atlas zur Wärmebehandlung der Stähle" (Orlich, 1954) ont été superposés au diagramme TTA à la figure 4.26 (a). La comparaison indique que les modèles 1D et 2D permettent de reproduire fidèlement le diagramme TTA expérimental. Cette bonne correspondance a été obtenue à partir de la microstructure initiale montrée à la figure 4.27 (a). La comparaison avec la micrographie des échantillons utilisés pour les mesures (Orlich, 1954) (Fig. 4.27 (b)) montre que les morphologies des microstructures sont similaires, mais qu'il y a presque un facteur 6 dans les échelles de dimension ! Cette observation signifie qu'il est possible de reproduire correctement le diagramme TTA expérimental, mais que la microstructure initiale de la simulation doit être nettement plus fine que celle des échantillons. Autrement dit, dans le cas de microstructures initiales équivalentes, le modèle prédit des cinétiques de transformation trop lentes par rapport aux expériences.

Afin de vérifier ce phénomène, le modèle a été appliqué à une microstructure initiale obtenue directement de la micrographie montrée à la figure 4.27 (b). Le résultat de la procédure de digitalisation et de traitement d'images qui a permis de générer la microstructure de départ est montré à la figure 4.28 avec la micrographie d'origine. Les zones d'austénite de la microstructure initiale du

modèle correspondent aux régions de perlite de la micrographie. Leur concentration initiale (supposée uniforme) a été ajustée afin d'obtenir une concentration moyenne globale de l'alliage égale à la valeur expérimentale (0.49%C). Un calcul a été effectué pour chaque vitesse de chauffage donnée sur le diagramme expérimental. L'absence de périodicité dans la microstructure a nécessité l'utilisation de conditions aux limites de type adiabatique.

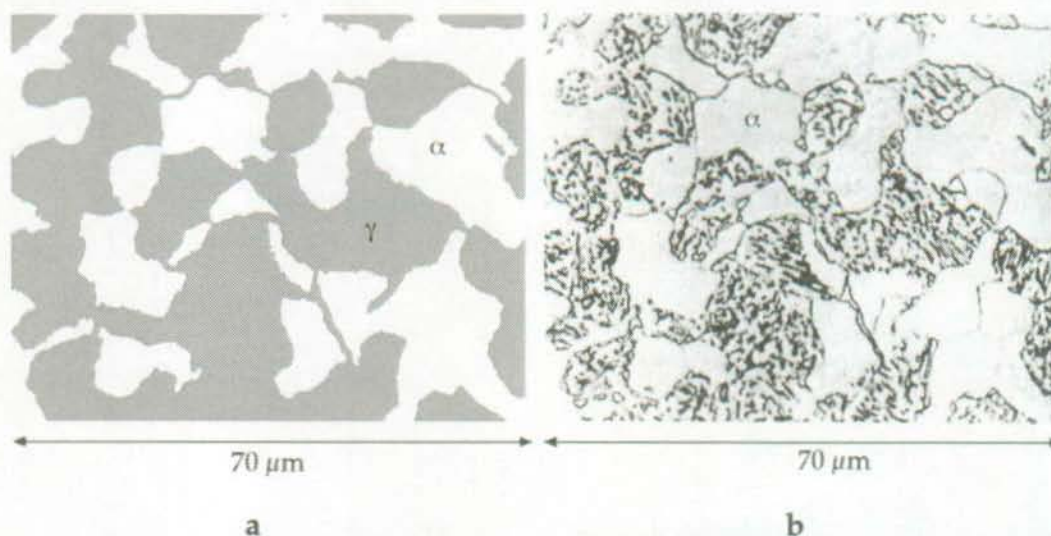


Fig. 4.28 : Microstructures initiales correspondant aux résultats de la figure 4.29. (a) Situation initiale de la simulation. (b) Micrographie d'un échantillon avant austénitisation (Orlich, 1954).

Les résultats obtenus sont présentés à la figure 4.29, où les températures correspondant à 95% d'austénite, à 98% d'austénite et à la fin de transformation (disparition de la dernière cellule α ou α/γ) peuvent être comparées aux valeurs expérimentales. Comme attendu, les températures calculées sont supérieures aux valeurs mesurées. Toutefois les écarts observés sont fortement réduits si l'on considère la fin de la transformation à un taux de 95% d'austénite plutôt que de 100%. Le choix d'un critère de fin de transformation inférieur à 100% est par ailleurs justifié par la nature même des résultats expérimentaux. Ceux-ci sont en effet généralement déduits de courbes dilatométriques qui indiquent les températures de début et de fin de transformation, mais ne donnent pas d'informations précises sur les fractions volumiques correspondantes. Parfois, les mesures par dilatométrie sont complétées par des observations métallographiques d'échantillons trempés en cours de transformation. Il s'avère que les valeurs obtenues par dilatométrie correspondent généralement à des taux de transformation d'environ 95%. En dépit de ces remarques, le modèle prédit une cinétique d'austénitisation légèrement trop lente. Les causes possibles de ce phénomène seront évoquées plus loin, après la comparaison avec les résultats expérimentaux de la section 4.2.2.

Le diagramme TTA du Ck45 de (Orlich, 1954) contient également des informations sur les durées de chauffage nécessaires pour obtenir une austénite homogène en concentration. Les températures de fin d'homogénéisation indiquées sur ce diagramme ont été reprises et superposées aux courbes calculées à la figure 4.26 (b). La comparaison montre que les valeurs expérimentales sont généralement supérieures aux températures obtenues par simulation. Toutefois, le critère d'homogénéisation des données expérimentales n'est pas clairement défini. En outre, les temps indiqués tiennent probablement compte de la présence

d'impuretés, de carbures et d'éléments d'alliage dont les temps de dissolution et d'homogénéisation sont souvent supérieurs à ceux d'un alliage Fe-C pur. Les durées d'homogénéisation fournies par le modèle ne peuvent donc être utilisées directement pour optimiser des traitements thermiques sur des alliages commerciaux. Le modèle permet en revanche de calculer la répartition du carbone dans l'austénite avant la trempe. On pourra estimer de cette manière si le traitement thermique conduit à la formation de martensite homogène ou hétérogène.

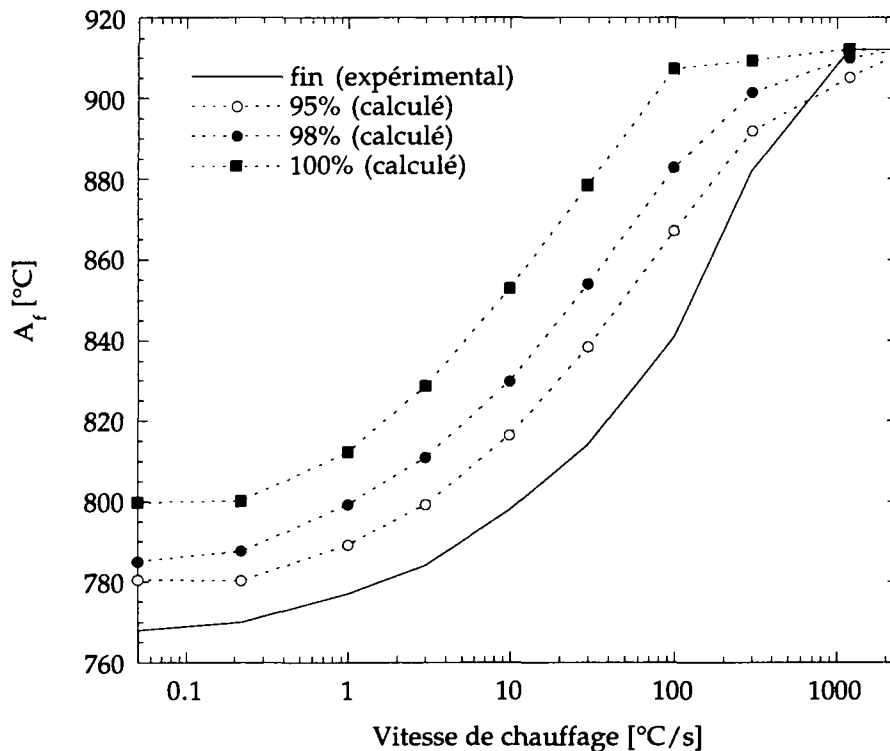


Fig. 4.29 : Comparaison des températures de fin d'austénitisation expérimentales et prédites par le modèle pour la même microstructure initiale. Résultats expérimentaux d'après (Orlich, 1954).

Comparaison avec les résultats expérimentaux

Le modèle 2D a ensuite été utilisé pour essayer de reproduire les résultats expérimentaux de la section 4.2.2. Afin de disposer des conditions les plus proches possibles de celles des mesures, les microstructures initiales ont été générées directement à partir des micrographies présentées à la figure 4.18. Une zone caractéristique des microstructures A et B a ainsi été prélevée sur les deux images par une procédure de digitalisation. Le résultat est montré à la figure 4.30 avec les micrographies d'origine.

Le modèle a ensuite été appliqué aux microstructures digitalisées en reprenant les vitesses de chauffage utilisées dans les expériences. Les calculs ont été réalisés sur un maillage de 200 x 200 cellules carrées avec des conditions aux limites de type adiabatique. La concentration du carbone dans l'austénite a été ajustée afin d'obtenir une concentration nominale égale à celle de l'alliage expérimental (0,45%C)¹.

¹ valeur moyenne donnée par le fabricant.

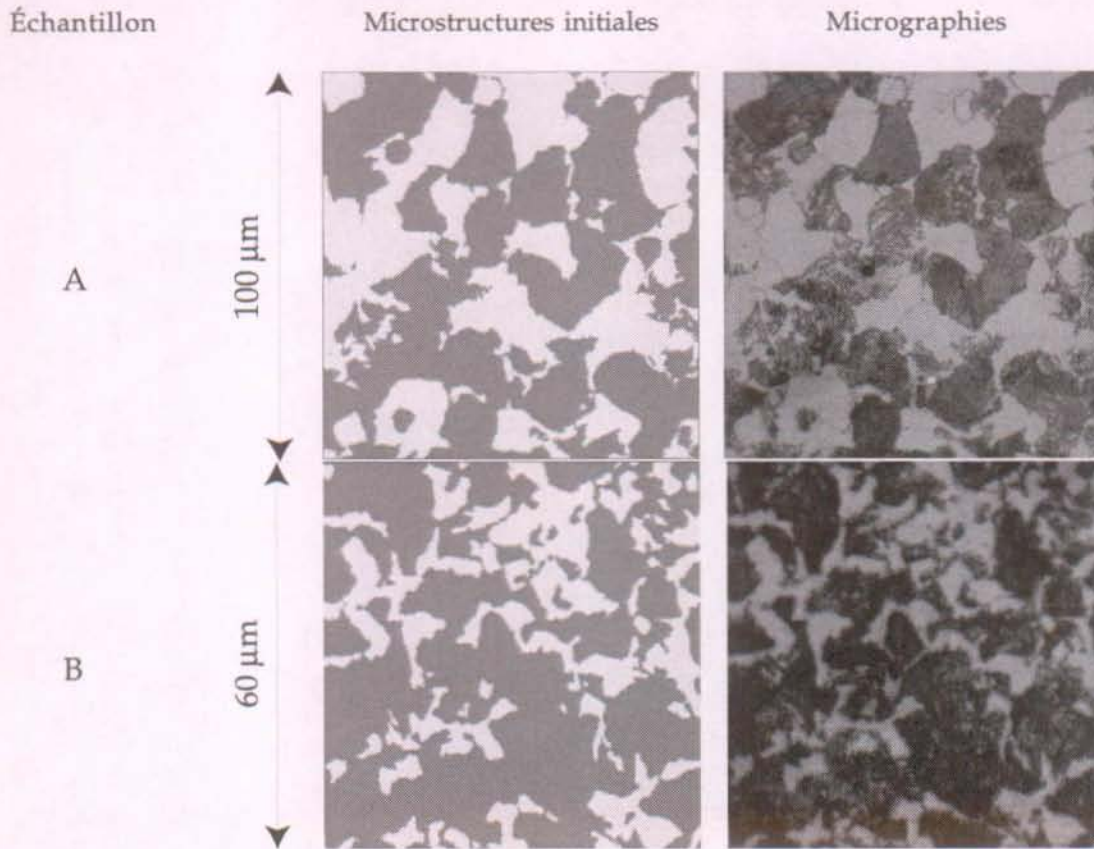


Fig. 4.30 : Microstructures initiales utilisées dans la simulation. Les images ont été obtenues par la digitalisation des micrographies montrées à la colonne de droite.

Les résultats obtenus sont présentés à la figure 4.31. Les températures de fin d'austénitisation indiquées pour la simulation correspondent à un taux de transformation de 98%. La comparaison avec les valeurs expérimentales montre que la tendance générale est bien reproduite, notamment à haute vitesse pour la microstructure A et aux faibles vitesses de chauffage pour les deux microstructures. Pour les autres conditions, les températures de fin de transformation obtenues avec le modèle sont 10 à 20°C supérieures aux valeurs mesurées. En moyenne, le modèle prédit donc une cinétique légèrement trop lente par rapport aux observations. Ce résultat confirme la tendance observée au paragraphe précédent lors des comparaisons avec les données de la littérature. L'écart semble toutefois être moins important.

Discussion

La prédiction par simulation d'une cinétique d'austénitisation légèrement trop lente par rapport aux observations peut paraître surprenante car plusieurs phénomènes susceptibles de ralentir la transformation n'ont pas été considérés dans le modèle. Il s'agit en particulier du temps nécessaire pour la germination de l'austénite dont la prise en compte conduirait à des températures de fin d'austénitisation encore plus élevées. D'autre part, le temps de dissolution de la perlite est négligé dans le modèle. Les cinétiques trop lentes obtenues avec le modèle laissent donc présager que ces phénomènes n'exercent qu'une influence mineure sur la durée globale de la transformation. Les calculs présentés à la section 4.4 permettront de vérifier cette affirmation pour la question du temps de dissolution de la perlite.

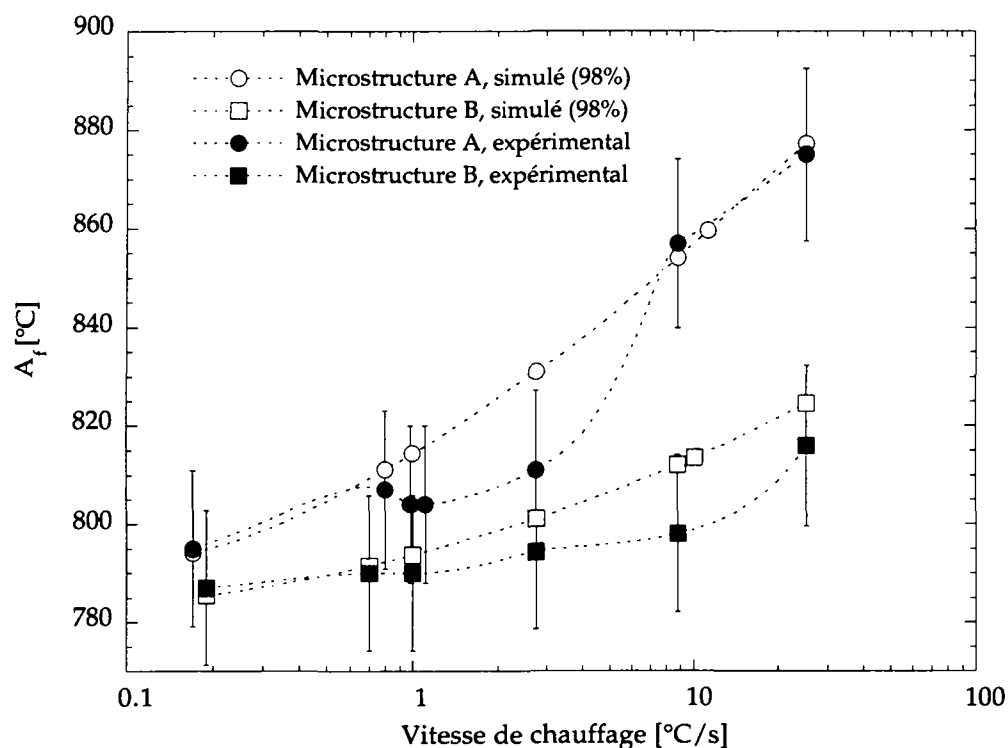


Fig. 4.31 : Températures de fin d'austénitisation en fonction de la vitesse de chauffage calculées avec le modèle et mesurées par dilatométrie pour un alliage Fe-0.49%C. Les microstructures initiales sont illustrées à la Fig. 4.30.

L'écart observé entre la simulation et les expériences pourrait provenir d'une différence de diffusivité. L'alliage expérimental contient en effet des éléments substitutionnels tels que Mn (0.74%) et Cr (0.16%) qui augmentent la diffusivité du carbone dans l'austénite par un mécanisme de déformation du réseau cristallin. L'importance de ce phénomène peut être estimée à la figure 7.6.2 donnée en annexe où le coefficient de diffusion du carbone dans l'austénite est représenté en fonction de la température et de la concentration en Mn. Il s'avère toutefois qu'à des concentrations inférieures à 1%, l'influence du manganèse peut être négligée. Les autres éléments d'alliage, présents en faible concentration, jouent certainement un rôle moins important encore.

La diffusivité du carbone dans l'alliage expérimental pourrait également être affectée par les joints de grains présents dans l'austénite. Les défauts du réseau cristallin constituent en effet des chemins privilégiés pour les atomes de carbone. Ce phénomène de court-circuit diffusionnel pourrait expliquer les vitesses de transformation élevées observées expérimentalement. On peut cependant supposer qu'il n'a qu'une influence limitée aux températures où a lieu l'austénitisation. Il intervient en effet plutôt à basse température lorsque la diffusivité dans la masse chute en raison de l'énergie d'activation très élevée.

La comparaison des calculs effectués sur des domaines bi- et tridimensionnels a montré que le modèle 2D prédisait des temps d'austénitisation supérieurs à ceux du modèle 3D pour la même microstructure initiale (environ 15% de différence pour le cas traité). Cet effet stéréologique contribue certainement de manière significative à l'écart observé entre la simulation 2D et les mesures. Il constitue donc une explication plausible pour les différences visibles à la figure 4.31 où les écarts de température sont compris entre 0 et 30% de l'intervalle $A_f - A_1$. Il

semble en revanche que cet effet n'est pas suffisant pour expliquer les écarts plus importants observés à la figure 4.29.

Les données thermodynamiques utilisées dans le modèle doivent également être comparées à celles valables pour l'alliage expérimental. La présence de manganèse dans l'acier Ck45 modifie en effet l'équilibre du système fer-carbone. Il agit en particulier sur la température de transition Ae_3 du diagramme de phase (intersection de la nappe $(\alpha+\gamma)/\gamma$ avec la verticale de la composition nominale). Pour un alliage contenant 0.8%Mn et 0.45%C, Ae_3 est d'environ 16°C inférieure à la valeur de l'alliage binaire Fe-0.45%C (v. Fig. 7.6.3 en annexe). Ceci indique qu'un alliage contenant du manganèse se transforme à des températures plus basses que l'équivalent binaire. L'influence du manganèse sur la cinétique d'austénitisation des alliages Fe-C-X a par ailleurs été montrée par Atkinson *et al* (1995) pour le cas de microstructures initiales composées de cémentite et de ferrite. Le modèle théorique développé par ces auteurs prédit, pour des alliages contenant 1% de manganèse seulement, des temps de transformation sensiblement plus courts que ceux du binaire. Ce résultat semble confirmer que les éléments substitutionnels contenus dans l'alliage expérimental modifient de façon significative l'équilibre thermodynamique. Ce mécanisme constitue donc une seconde explication pour les écarts observés entre les résultats expérimentaux et simulés.

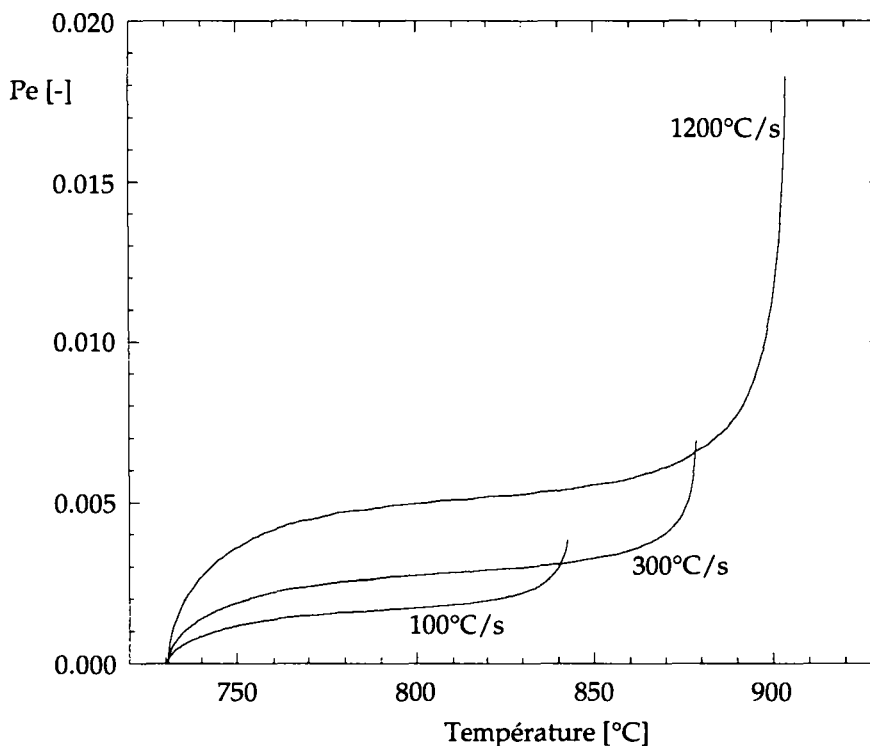


Fig. 4.32 : Nombre de Péclet calculé avec le modèle 1D au cours de la transformation pour trois vitesses de chauffage (mêmes conditions que Fig. 4.26).

La validité de l'hypothèse d'équilibre local utilisée dans le modèle peut également être mise en doute, notamment pour les conditions de chauffage les plus rapides (1200 et 2400°C/s). A haute sursaturation, il est en effet envisageable que la vitesse de réarrangement des atomes de la structure cubique centrée en structure cubique faces centrées soit voisine ou supérieure à la vitesse de

diffusion du carbone dans le fer. Une telle situation conduirait à la formation d'austénite avec une concentration voisine de celle de la ferrite. L'équilibre thermodynamique ne serait alors plus respecté à l'interface. L'importance de ce phénomène - connu en solidification sous le nom de piégeage de soluté - peut être estimée par le nombre de Péclet calculé pour l'interface. Ce dernier est défini par (Kurz, 1989) :

$$P_i = \frac{\delta_i v}{D_i} \quad 4.45$$

où δ_i est l'épaisseur de l'interface (environ 10 fois la distance interatomique), v la vitesse d'avance de l'interface et D_i le coefficient de diffusion à l'interface. Le piégeage de soluté devient important lorsque P_i est supérieur à 0.1 environ. Le nombre de Péclet à l'interface obtenu durant la dissolution de la ferrite a été estimé à l'aide du modèle 1D. Le calcul a été effectué sur un domaine sphérique de 4 μm de rayon et pour un alliage Fe-0.49%C contenant 35% de ferrite au départ. L'épaisseur d'interface, δ_i , intervenant dans le calcul de P_i a été estimée à 2 nm et la valeur du coefficient de diffusion à l'interface, D_i , prise égale à celle dans l'austénite pour la composition nominale et la température momentanée. L'évolution de P_i calculée au cours du chauffage a été représentée à la figure 4.32 pour trois vitesses de chauffage différentes (100°C/s, 300°C/s et 1200°C/s). Les valeurs obtenues, qui atteignent au maximum 0.02, indiquent que l'hypothèse d'équilibre local est valable même pour la vitesse de chauffage de 1200°C/s. Ce résultat doit cependant être considéré avec prudence car le coefficient de diffusion à l'interface peut être nettement plus faible que la valeur utilisée (valeur dans la masse). En tenant compte de cette remarque, on peut juger que le modèle est utilisable jusqu'à des vitesses de chauffage supérieures à 100°C/s au moins.

4.2.5 Conclusion

Un modèle a été développé pour décrire la transformation de ferrite en austénite dans un domaine mono-, bi- ou tridimensionnel. Il permet, par la résolution de l'équation de diffusion et la prise en compte de l'équilibre thermodynamique à l'interface, de calculer la cinétique de transformation en fonction de la température et de la microstructure initiale.

La comparaison des cinétiques de transformation calculées et déterminées expérimentalement a montré que le modèle décrit de manière satisfaisante le processus de dissolution de la ferrite. Néanmoins, les vitesses de transformation calculées sont en général plus faibles que les valeurs expérimentales. Cet effet est attribué à la présence d'éléments d'alliage dans l'acier Ck45 utilisé pour les échantillons. Le manganèse contenu dans cet acier modifie en effet l'équilibre thermodynamique de manière significative. L'autre explication avancée est un effet stéréologique dû à la résolution de l'équation de diffusion dans une coupe plutôt que dans un domaine tridimensionnel. Cet effet a été vérifié par la comparaison de simulations en 2 et 3 dimensions.

La présence d'éléments d'alliage et le ralentissement de la transformation peu avant sa fin rendent difficile la comparaison entre résultats expérimentaux et simulés. Une analyse plus rigoureuse nécessiterait d'effectuer des mesures sur un alliage Fe-C très pur et de compléter ces dernières par des trempes en cours de transformation. Cette démarche permettrait d'utiliser des critères de fin de transformation équivalents pour les mesures et pour la simulation.

Les temps nécessaires à la germination de l'austénite et à la dissolution de la perlite sont négligés dans le modèle. Cette hypothèse constitue une limitation importante du point de vue phénoménologique. Toutefois, la prédiction d'une cinétique de transformation en général trop lente tend à confirmer que ces phénomènes n'influencent que faiblement le temps total de transformation. De même, l'estimation du nombre de Péclet pour l'interface a montré que l'hypothèse de l'équilibre local à l'interface est raisonnable pour le cas traité, même dans le cas de vitesses de chauffage supérieures à 100°C/s.

Le modèle a permis de montrer la forte influence qu'exerce la microstructure initiale sur la cinétique de transformation. Dans ce contexte, le modèle 2D présente plusieurs avantages par rapport à la version 1D. Il permet notamment de décrire les microstructures de façon plus réaliste en tenant compte de la morphologie et de la distribution de taille des particules. Il permet également d'utiliser des micrographies digitalisées pour générer la microstructure initiale.

Étant donné la généralité des équations résolues, le modèle peut être appliqué aisément à d'autres transformations de phase diffusives. Une tentative de modélisation de la solidification équiaxe et a été effectuée dans ce sens (Jacot, 1997). Le modèle a également été appliqué à la description de la formation de grains globulitiques dans des alliages d'aluminium ternaires inoculés (Doré, 1996). Ces applications nécessitent toutefois la prise en compte des effets de la tension de surface qui gouvernent en particulier la morphologie de la phase solide.

4.3 Croissance du grain austénitique

Dans les sections précédentes, des modèles ont été développés pour décrire la dissolution de la perlite, la transformation de ferrite proeutectoïde en austénite et l'homogénéisation. Pour compléter la description du processus d'austénitisation, cette dernière section est consacrée à l'étude de l'évolution de la taille du grain dans l'austénite.

Lors d'un traitement d'austénitisation, la croissance granulaire débute dès l'apparition des premiers grains d'austénite. Toutefois, elle ne devient véritablement importante qu'à des températures ou des durées de maintien élevées, généralement lorsque les transformations de phase sont terminées. Cette observation a conduit à considérer le phénomène de croissance granulaire indépendamment des transformations de phase qui ont lieu durant le traitement. Les travaux présentés ici concernent donc des microstructures entièrement austénitiques. Ils portent sur l'évolution du réseau formé par les joints de grains au cours d'un maintien à haute température.

La croissance du grain a d'abord été abordée sous l'angle de la modélisation. Comme on l'a vu au chapitre 2, ce sujet a été abondamment traité dans la littérature. Cette constatation a conduit à effectuer une comparaison des modèles disponibles plutôt qu'un développement d'une technique nouvelle. Deux modèles bidimensionnels de croissance granulaire ont été étudiés. Le premier est basé sur une méthode de Monte Carlo formulée pour un réseau de cellules hexagonales. La procédure utilisée est celle de la publication originale de Anderson *et al* (1984). Le second modèle est une méthode mécanique inspirée du modèle de Frost *et al* (1988) résumé au chapitre 2. Il consiste à décrire l'évolution des joints de grains en calculant leur vitesse de migration en fonction de la

courbure locale. La comparaison des deux modèles porte sur les exposants de la loi de croissance et sur la distribution du nombre de voisins des grains.

L'approche de modélisation a été complétée par des mesures de la cinétique de croissance du grain dans l'alliage Ck45 en conditions isothermes. Ces mesures, complétées par des résultats provenant d'autres sources, ont servi à effectuer des comparaisons entre la simulation et les cinétiques expérimentales. Pour cela, une méthodologie de calibrage des différents paramètres des modèles a été développée et appliquée au cas de l'acier Ck45. Le choix de cet acier a été motivé par son usage tout au long des précédents chapitres. Sa faible pureté constitue un handicap pour une comparaison détaillée avec la modélisation, mais permettra en revanche d'examiner si les modèles développés peuvent être facilement appliqués à un alliage commercial.

4.3.1 Description des modèles

Modèle de Monte Carlo

Le modèle de Monte Carlo présenté ici est directement repris des travaux de Anderson *et al* (1984) résumés au chapitre 2. La microstructure est décrite par un réseau de cellules hexagonales possédant chacune un nombre S compris entre 1 et Q (v. Fig. 4.33). Ce nombre, que l'on appellera orientation, correspondant à une identification du grain auquel la cellule appartient. Q est choisi suffisamment grand (typiquement 40) pour que la rencontre de grains de même orientation soit relativement rare. Le but du modèle consiste à réduire progressivement l'énergie contenue dans les interfaces, ces dernières étant définies par les frontières entre les cellules d'indices S différents. Mathématiquement, il s'agit de minimiser l'Hamiltonien :

$$H = \frac{J}{2} \sum_{\text{cellules } i} \sum_{\text{voisins } j} (1 - \delta_{S_i S_j}) \quad 4.46$$

où J est un paramètre représentant l'énergie d'interface, δ le symbole de Kronecker et S_i et S_j les indices des cellules i et j . La minimisation est effectuée par un processus stochastique qui consiste à choisir une cellule i aléatoirement dans le système ainsi qu'une nouvelle orientation S_i' également prise au hasard parmi les $(Q-1)$ orientations restantes. La transition d'indice $S_i \rightarrow S_i'$ est alors effectuée avec une probabilité W dépendant de la différence d'énergie associée aux deux états :

$$W = \begin{cases} \exp(-\Delta G/RT) & \Delta G > 0 \\ 1 & \Delta G \leq 0 \end{cases} \quad \text{avec} \quad 4.47$$

$$\Delta G = \frac{J}{2} \sum_{\text{voisins } j} (\delta_{S_i S_j} - \delta_{S_i' S_j}) \quad 4.48$$

L'usage de la température T dans cette formulation sert uniquement à définir une distribution de probabilités qui, lorsque $T > 0$, permet d'effectuer des transitions allant à l'encontre d'une réduction d'énergie. Le désordre ainsi introduit permet d'éviter certains effets d'anisotropie (Anderson, 1984).

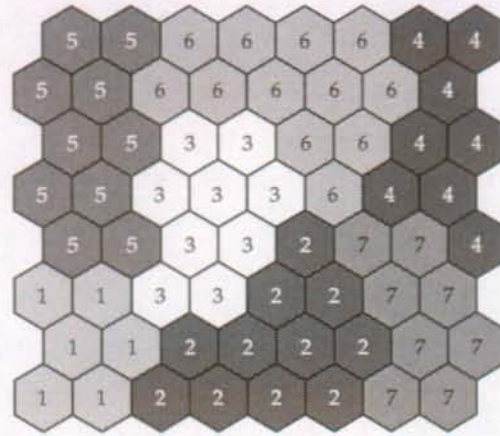


Fig. 4.33 : Représentation d'une structure de grains par un réseau de cellules (méthode de Monte Carlo).

L'influence de la température sur la cinétique de croissance est véritablement prise en compte dans la relation de conversion des échelles de temps présentée ci-dessous (éq. 4.49). Le paramètre J utilisé dans le calcul des probabilités ne peut être relié directement à l'énergie d'interface, bien qu'il soit utilisé dans l'expression de l'Hamiltonien. Comme ce dernier n'est jamais directement calculé, J n'apparaît en définitive que dans l'expression 4.48. Il peut donc être considéré uniquement comme un paramètre de la distribution de probabilités.

L'unité de temps de la simulation est le pas de Monte Carlo (MCS) défini comme étant N tirs aléatoires de cellules, où N est le nombre total de cellules dans le système. Le pas de temps de Monte Carlo est converti en un intervalle de temps réel, Δt , selon une relation proposée par Radhakrishnan (1995b) :

$$1 \text{ MCS} = K_{\text{MCS}} \exp\left(\frac{-Q_{\text{MCS}}}{RT}\right) \Delta t \quad 4.49$$

où K_{MCS} et Q_{MCS} sont des paramètres à ajuster. Le pas de temps réel associé à 1 MCS varie donc au cours du calcul si des conditions anisothermes sont utilisées.

L'unité d'espace est la cellule du réseau. Les tailles de grains mesurées dans cette unité, \bar{d}_c , peuvent être converties en tailles réelles, \bar{d} , par la relation

$$\bar{d} = a \bar{d}_c \quad 4.50$$

où a est la taille des cellules.

La microstructure initiale est générée numériquement par la croissance d'un nombre choisi de grains germés à des instants différents et positionnés aléatoirement dans le domaine. La procédure d'attribution d'un indice de grain à chaque cellule est basée sur le calcul des temps de capture déjà décrit au paragraphe 4.2.3. Les conditions aux limites sont de type périodique. Les cellules possèdent ainsi toujours 6 voisins quelle que soit leur position dans le domaine de calcul.

Modèle mécanique

Le modèle de croissance granulaire présenté ici est inspiré des travaux de Frost *et al* (1988, 1990, 1993) résumés au chapitre 2. La microstructure est représentée par un ensemble de points situés soit sur les arêtes des grains, soit aux intersections (v. Fig. 4.34 (a)). L'évolution de la microstructure est décrite par le déplacement

des points calculé en fonction de la courbure locale et des équilibres mécaniques aux points de jonction. Les opérations effectuées au cours d'un pas de temps peuvent être résumées par les trois étapes suivantes : (i) déplacement des points d'interface en fonction de la courbure locale, (ii) déplacement des points de jonction des arêtes (sommets) afin de satisfaire l'équilibre mécanique, (iii) modifications topologiques.

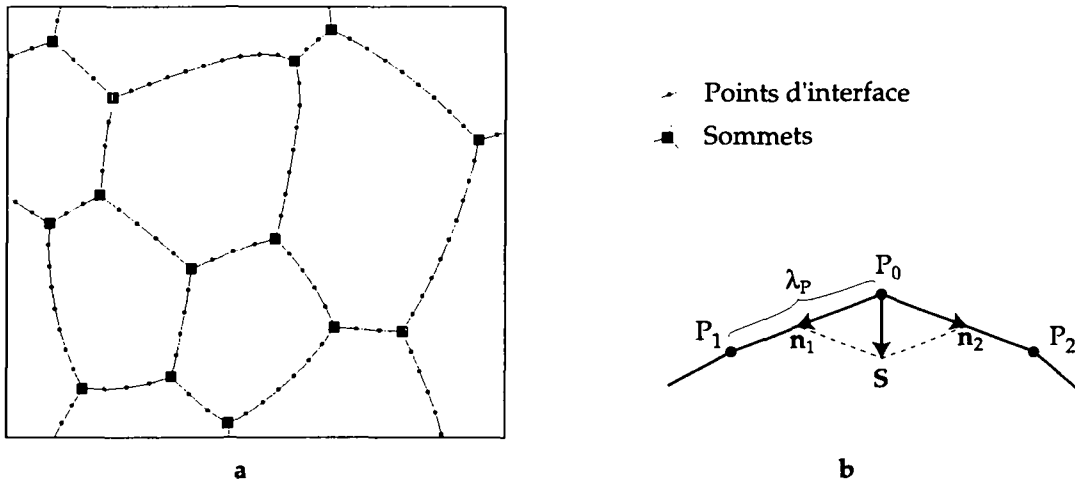


Fig. 4.34 : Modèle mécanique de croissance granulaire. (a) Représentation de la structure de grains par deux types de points (points d'interface et sommets). (b) Procédure de déplacement d'un point d'interface P_0 .

(i) Déplacement des points d'interface

La vitesse, v_0 , d'un point P_0 de coordonnées x_0 situé sur une arête est calculée à partir de la mobilité, μ , de la tension de surface, γ , et des positions x_1 et x_2 des deux points voisins P_1 et P_2 :

$$v_0(x_0, x_1, x_2) = \mu \gamma \frac{S}{\lambda_p} \quad \text{avec} \quad S = \frac{x_1 - x}{|x_1 - x|} + \frac{x_2 - x}{|x_2 - x|} \quad 4.51$$

où λ_p est la distance moyenne entre deux points voisins. Le vecteur S est la somme des vecteurs unitaires donnant la direction des segments P_0P_1 et P_0P_2 (v. Fig. 4.34 (b)). Il représente la force exercée sur l'interface au point P_0 . On peut montrer (v. annexe 7.7) que, si les points sont équidistants, la relation 4.51 équivaut à l'expression connue :

$$v = \mu \gamma K n \quad 4.52$$

où n est la normale au joint de grains et K la courbure de l'arc de cercle passant par les points P_0 , P_1 et P_2 .

La nouvelle position du point P_0 , x_0' , est calculée à chaque pas de temps à partir des anciennes positions x_0 , x_1 et x_2 . Elle est obtenue avec le schéma explicite suivant :

$$x_0' = x_0 + v_0(x_0, x_1, x_2) \Delta t \quad 4.53$$

où Δt est le pas de temps. Celui-ci est calculé à l'aide d'un critère de stabilité obtenu empiriquement :

$$\Delta t < 0.002 \frac{\lambda_p^2}{\mu(T) \gamma} \quad 4.54$$

Le pas de temps varie donc au cours du calcul si la mobilité dépend de la température et que des conditions anisothermes sont appliquées.

(ii) *Déplacement des sommets*

Le déplacement des sommets est effectué selon une procédure similaire. La vitesse d'un sommet Q de coordonnées x_Q est calculée à partir des positions x_1 , x_2 et x_3 des voisins P_1 , P_2 et P_3 :

$$v = \mu_S \gamma \frac{S}{\lambda_P} \quad \text{avec} \quad S = \frac{x_1 - x_Q}{|x_1 - x_Q|} + \frac{x_2 - x_Q}{|x_2 - x_Q|} + \frac{x_3 - x_Q}{|x_3 - x_Q|} \quad 4.55$$

La valeur utilisée pour la mobilité des sommets, μ_S , est environ 5 fois plus élevée que celle de μ , si bien que les sommets trouvent rapidement une position proche de l'équilibre mécanique (angles de 120° entre les segments QP_1 , QP_2 et QP_3).

(iii) *Transformations topologiques*

Le déplacement des interfaces en direction de leur centre de courbure ne suffit pas à décrire la croissance du grain. La procédure conduit en effet rapidement à des situations de dégénérescence telles que des longueurs d'arêtes ou des tailles de mailles tendant vers zéro. Ces configurations particulières sont traitées par l'application d'une des deux transformations topologiques fondamentales présentées au chapitre 2 (v. Fig. 2.12). Lorsqu'une arête possède une longueur inférieure à un seuil fixé, l'opération d'échange de voisins (Fig. 2.12 (a)) est appliquée. De même, l'opération de suppression de maille (Fig. 2.12 (b)) est effectuée lorsqu'une maille à trois arêtes présente une surface inférieure à une valeur critique. Ces opérations - a priori triviales - engendrent un certain nombre de difficultés informatiques. Toutes les informations sur le voisinage des grains, des points et des sommets doivent en effet être modifiées après chaque transformation.

Génération de la microstructure initiale

La microstructure initiale est générée à partir d'une microstructure du modèle de Monte Carlo. Les informations stockées sous la forme d'indices d'orientation de cellules sont converties en données topologiques. Plus précisément, l'opération consiste à identifier les mailles, les arêtes et les sommets formés par les frontières entre les cellules d'orientations différentes. La procédure débute par le recensement des sommets, définis par les intersections entre trois cellules d'orientations différentes. L'inventaire des arêtes est ensuite obtenu par le parcours des frontières entre cellules d'orientations différentes. Le trajet qui débute à un sommet et se termine à la rencontre d'un autre est accompagné de l'enregistrement d'une série de points d'interface. Finalement, les mailles (grains) sont identifiées en partant des sommets et en parcourant les arêtes dans le sens trigonométrique jusqu'au retour au point initial. Les conditions aux limites utilisées sont de type périodique. Le modèle fonctionne ainsi même pour un faible nombre de grains.

4.3.2 Travail expérimental

Les mesures présentées ici décrivent la cinétique de croissance du grain austénitique dans l'acier Ck45 dans des conditions isothermes. Les tailles de grains mesurées par analyse d'image sur des échantillons trempés à différents

temps de maintien permettront de disposer de données expérimentales pour la comparaison avec la simulation. Le choix d'un alliage de pureté médiocre permettra de confronter les modèles à des cinétiques de croissance granulaire observées dans un alliage commercial.

Procédure

Des cylindres de 6 mm de diamètre et 8 mm de hauteur en acier Ck45 (v. tableau 3.1 pour la composition) ont été enveloppés dans une feuille en acier inoxydable pour limiter l'oxydation et placés dans four préalablement chauffé à 900°C. Un thermocouple placé entre l'échantillon et la feuille de protection indique la montée en température. Le chronomètre est enclenché 300 s après l'entrée de l'échantillon dans le four. Ce délai correspond au temps nécessaire pour obtenir une température uniforme et stable dans l'échantillon. Après le temps de maintien désiré, l'échantillon est sorti du four et refroidi à l'air comprimé. Les vitesses de refroidissement obtenues (environ 40°C/s) conduisent à la formation d'une microstructure constituée de perlite fine avec un liseré de ferrite révélant les joints de grains de l'austénite présente avant le refroidissement.

La taille du grain austénitique a été déterminée sur des micrographies optiques obtenues par polissage et attaque chimique au Nital (Alcool + 5% HNO₃). L'analyse de l'image a été effectuée par ordinateur sur la base d'une image numérisée du réseau formé par les joints de grains. Le programme mesure par une procédure de coloriage la surface des grains entiers (grains sans intersection avec les bords de la zone d'analyse). La surface moyenne obtenue, \bar{A} , permet d'estimer le diamètre moyen :

$$\bar{d}_a = \sqrt{\frac{4\bar{A}}{\pi}} \quad 4.56$$

où \bar{d}_a est le diamètre d'un disque d'aire équivalente à \bar{A} . Le diamètre moyen a également été estimé par la méthode des segments interceptés. Un réseau de lignes horizontales et verticales a permis de calculer la distance moyenne d'interception, \bar{l} , et d'en déduire le diamètre moyen :

$$\bar{d}_l = \frac{4\bar{l}}{\pi} \quad 4.57$$

Cette relation repose également sur l'hypothèse de grains circulaires.

Les diamètres moyens obtenus avec les relations 4.56 et 4.57 sont valables pour les structures bidimensionnelles observées sur les micrographies. Le diamètre des grains considérés dans leur volume est en réalité supérieur aux valeurs obtenues. Une relation permettant d'estimer la densité de grains dans le volume, N_V , à partir de la mesure de \bar{A} et de \bar{l} a été proposée par Hanson (1979) :

$$N_V = (2.4150 \sqrt{\bar{A}} - 1.4552 \bar{l})^{-3} \quad 4.58$$

Cette relation a été déduite au moyen d'une étude sur ordinateur de différentes géométries de grains remplissant l'espace.

La taille du grain dans les métaux est souvent caractérisée à l'aide du système ASTM. La taille du grain en unités ASTM peut être déduite de \bar{d}_a par la relation suivante (ASTM, 1981) :

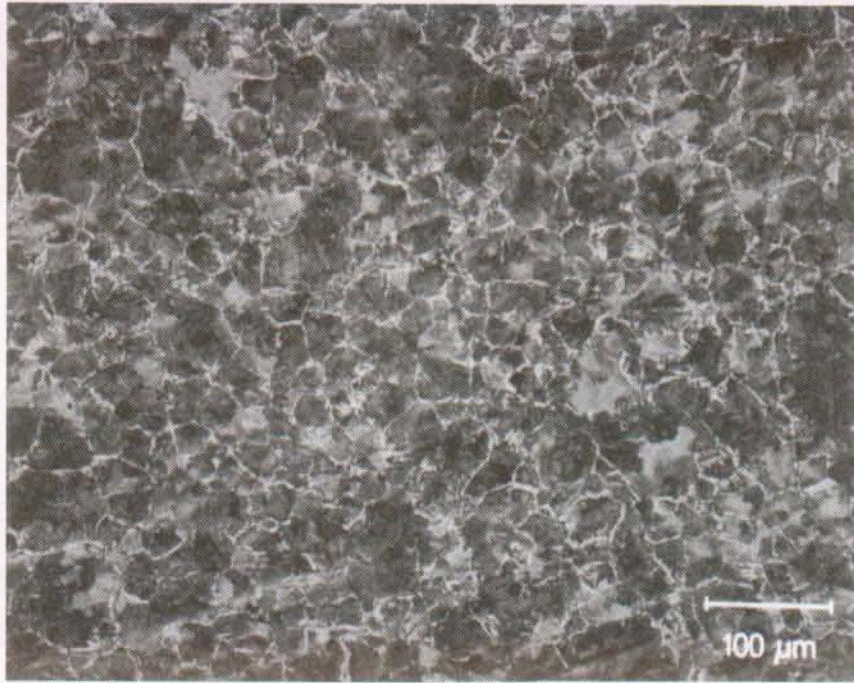


Fig. 4.35 : Microstructure d'un échantillon d'acier Ck45 austénitisé 600 s à 900°C. (Trempe à l'air à environ 40°C/s). Le réseau de lignes claires formé par la ferrite indique les joints de grains de l'austénite présente avant le refroidissement.

$$G_{ASTM} = -2.9542 + 3.33219 \log_{10} \frac{4 \cdot 10^6}{\pi \bar{d}_a} \quad 4.59$$

où \bar{d}_a est exprimé en microns.

Résultats

La taille du grain austénitique a été mesurée pour des temps de maintien à 900°C de 0, 120, 200, 600, 1000, 1800 et 4000 s. La figure 4.35 montre la microstructure obtenue après un maintien de 600 s et une trempe à l'air. On observe un réseau de lignes claires qui correspondent à la ferrite formée aux joints de grains dans l'austénite au début du refroidissement. On observe également par endroits de la ferrite de Widmanstätten sous forme d'aiguilles partant des joints de grains. Le reste de la microstructure est de la perlite fine formée à des températures inférieures. Les échantillons traités avec les autres durées de maintien présentent des microstructures similaires. Leurs micrographies se trouvent dans l'annexe 7.8.

Les tailles moyennes de grain mesurées sont représentées en fonction du temps de maintien à la figure 4.36. Les courbes tracées indiquent les valeurs obtenues par la méthode planimétrique (éq. 4.56), la méthode des segments interceptés (éq. 4.57) et le diamètre ASTM équivalent. On remarque sur cette figure que les diamètres moyens \bar{d}_1 sont supérieurs d'environ 15 à 20% aux diamètres \bar{d}_a . Cet écart est attribué d'une part à l'épaisseur des interfaces sur l'image numérisée (environ 3 µm). Les diamètres \bar{d}_a ont été corrigés en additionnant cette épaisseur aux valeurs déduites de la surface moyenne des grains sans leur frontière. Une correction équivalente n'a pu être effectuée sur \bar{d}_1 , alors que la fréquence des intersections est également affectée par l'épaisseur des joints de grains

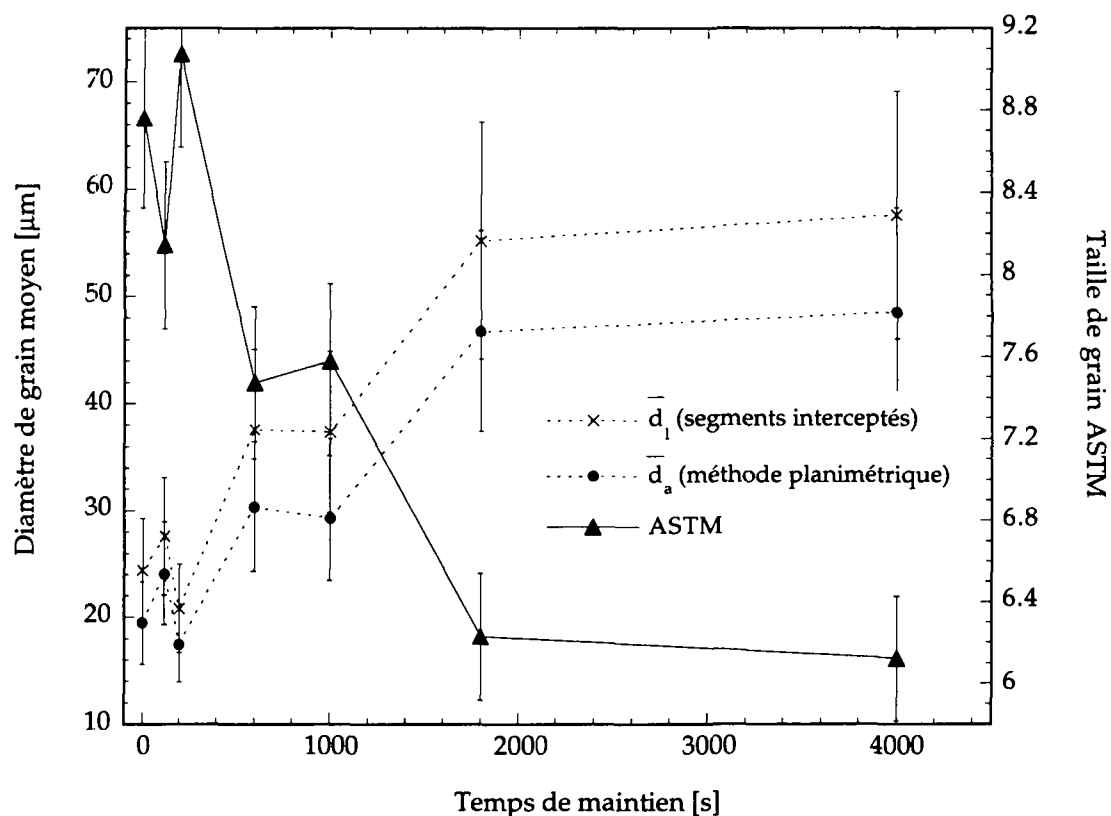


Fig. 4.36 : Diamètre moyen du grain austénitique dans l'acier Ck45 en fonction du temps de maintien à 900°C. Valeurs mesurées sur des micrographies par les méthodes planimétriques et des segments interceptés.

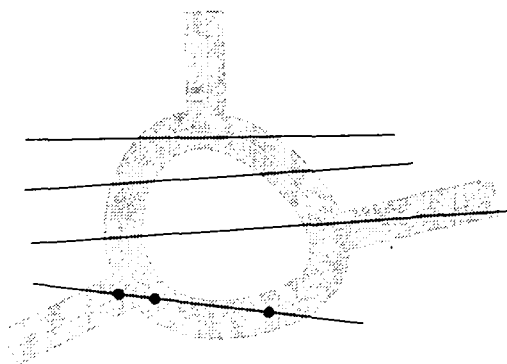


Fig. 4.37 : Influence de l'épaisseur des joints de grains sur la distance moyenne d'intersection. Les joints épais représentés en gris conduisent à un nombre d'intersections plus faible que les joints minces en blanc.

(v. Fig. 4.37). Les valeurs mesurées pour \bar{l} et par conséquent pour \bar{d}_l sont donc probablement surévaluées. D'autre part, les diamètres \bar{d}_a et \bar{d}_l ne sont équivalents que dans le cas de grains circulaires. Il n'est donc pas surprenant que leurs valeurs diffèrent pour des grains de forme quelconque.

L'incertitude de mesure sur les diamètres moyens a été estimée à 20%. Cette valeur importante est justifiée par des contours de grains parfois peu distincts et par la présence d'impuretés qui rendent l'image difficile à analyser. En outre, il existe probablement des joints de grains qui ne sont pas révélés par la présence de

ferrite (la trempe à l'air est assez peu reproductible). D'autre part, les mesures qui ont été réalisées sur des zones de taille réduite (typiquement $400 \mu\text{m} \times 400 \mu\text{m}$) sont soumises à une dispersion relativement importante.

En dépit des problèmes mentionnés, les résultats obtenus donnent un ordre de grandeur pour la vitesse de croissance du diamètre moyen. On retrouve également la forme parabolique de type $t^{1/n}$ caractéristique de la croissance granulaire. Les résultats ne sont toutefois pas assez précis pour effectuer une estimation du paramètre n . Les mesures nécessiteraient d'être répétées sur plusieurs micrographies et sur plusieurs échantillons traités dans les mêmes conditions.

4.3.3 Résultats de simulation

Modèle de Monte Carlo

Le modèle de Monte Carlo a été appliqué à 4 situations choisies dont les conditions sont indiquées dans le tableau 4.4. Les paramètres variés sont le nombre d'orientations Q et le paramètre $J/2R$ intervenant dans la loi exponentielle 4.47. Les probabilités de transition correspondant aux paramètres des calculs 1, 2 et 3 ont été représentées à la figure 4.38. Le paramètre $\Delta_{S-S'}$ utilisé en abscisse correspond à la variation du nombre de voisins d'orientations différentes associée à la transition (v. éq. 4.48). Il est défini par :

$$\Delta_{S-S'} = \sum_{\text{voisins } j} (\delta_{S_i S_j} - \delta_{S'_i S'_j}) \quad 4.60$$

Par rapport au calcul 1 qui sert de standard, les fréquences de transition sont plus faibles dans le calcul 2 et plus élevées dans le calcul 3.

Calcul N°	Nombre d'orientations Q	Paramètre de probabilité $J/2R$ [K ⁻¹]	Température	Nombre de grains initial	Maillage
1	40	2000	1173 K	2000	300 x 300
2	40	5000	1173 K	2000	300 x 300
3	40	1000	1173 K	2000	300 x 300
4	80	2000	1173 K	2000	300 x 300

Tableau 4.4 : Paramètres utilisés dans la modélisation de Monte Carlo.

Les microstructures obtenues avec le calcul N°1 sont représentées à la figure 4.39 à 4 stades différents. Le nombre de grains initial (Fig. 4.39 (a)) est de 1841. Ce nombre a été obtenu en comptant simplement les zones formées par des cellules contiguës de même orientation. Il est inférieur au nombre de grains utilisés pour générer la microstructure initiale, car ceux-ci s'agglomèrent lorsqu'ils possèdent une frontière commune et la même orientation. Le nombre de grains défini de cette façon peut en revanche augmenter momentanément. Un amas de cellules de même orientation peut en effet être divisé en deux zones par le jeu des transitions.

Les grains visibles sur les images simulées présentent une forme assez irrégulière. Des marches sont observées fréquemment le long des frontières et les angles aux points d'intersection diffèrent souvent de 120° . Ces irrégularités traduisent la nature stochastique du modèle.

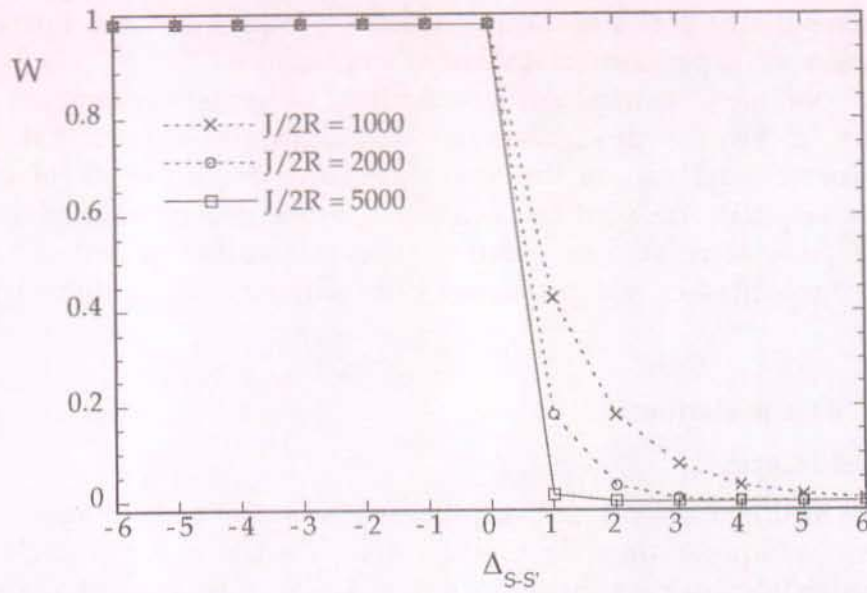


Fig. 4.38 : Probabilités de transition utilisées dans la simulation de Monte Carlo.

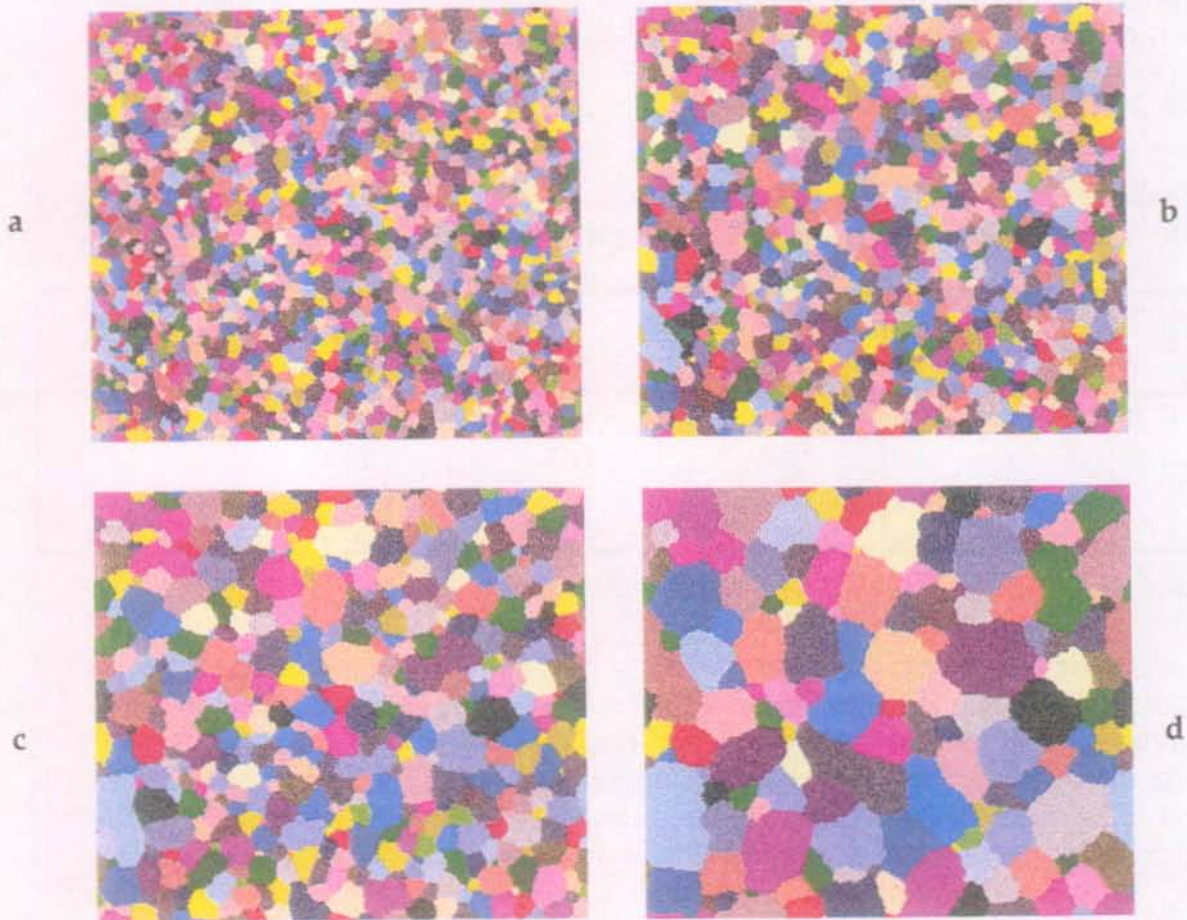


Fig. 4.39 : Évolution de la structure de grains simulée avec le modèle de Monte Carlo. États aux pas de temps MCS = 0 (a), MCS = 1480 (b), MCS = 5000 (c), MCS = 19'500 (d). Les nombres de grains correspondants sont 1841, 993, 438 et 137.

Diamètres moyens

La connaissance de la surface du domaine et du nombre de grains (définis par les agglomérats de cellules de même orientation) permet d'estimer le diamètre de grain moyen \bar{d}_c avec la relation 4.56. Les valeurs ainsi obtenues ont été représentées à la figure 4.40 en fonction de l'avancement du calcul. Les unités de temps et d'espace utilisées sur cette figure sont respectivement le pas de temps de Monte Carlo (MCS) et la cellule du réseau hexagonal. Ces unités sont proportionnelles aux grandeurs réelles (v. éq. 4.49 et 4.50).

Les calculs 3 et 4 fournissent une cinétique de croissance plus lente que les calculs 1 et 2. Le nombre d'orientations plus élevé dans le calcul 4 contraint en effet à effectuer un plus grand nombre d'itérations avant d'obtenir une transition réalisable. La cinétique est ainsi ralentie par rapport à un cas comportant un nombre d'orientations plus faible. Quant au calcul 3, il se distingue par une probabilité de transition élevée même pour des valeurs positives de $\Delta_{S-S'}$ (v. Fig. 4.38). Il en résulte que les transitions proposées sont souvent réalisées, même si elles conduisent à une situation moins favorable du point de vue énergétique. Cette situation introduit un désordre important dans la microstructure qui se traduit par des partages de grains fréquents et des interfaces très irrégulières (v. Fig. 4.41). La fréquence des transitions allant à l'encontre d'une réduction de l'énergie d'interface explique les faibles vitesses de croissance obtenues pour le calcul 3.

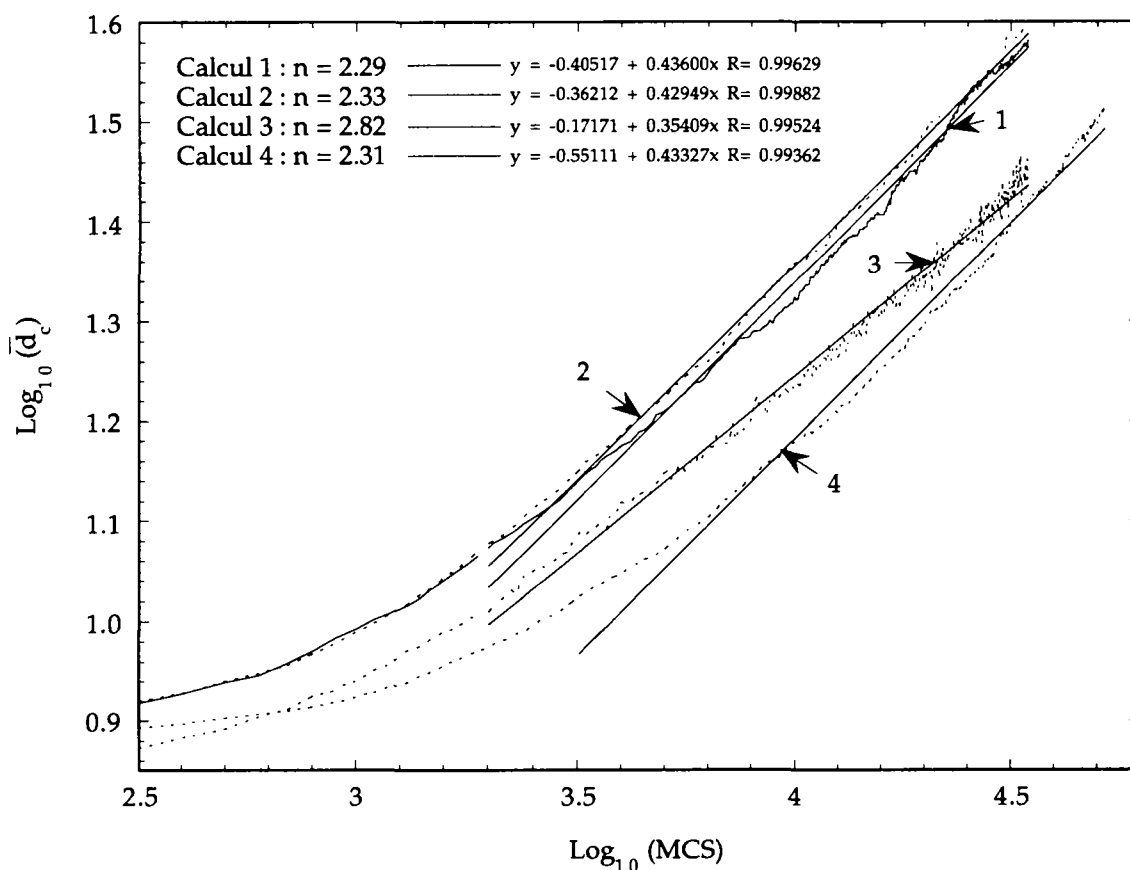


Fig. 4.40 : Exposants n de la loi de croissance granulaire $\bar{d} = K t^{1/n}$ déduits pour les 4 calculs effectués avec la méthode de Monte Carlo.

Exposant de la loi de croissance

La représentation sur des échelles logarithmiques du diamètre moyen en fonction du temps permet de déduire l'exposant de la loi de croissance $\bar{d} = K_r t^{1/n}$ par une régression linéaire :

$$\text{Log } \bar{d} = \text{Log } K_r + \frac{1}{n} \cdot \text{Log } t \quad 4.61$$

La fonction de conversion 4.49 et la relation d'échelle 4.50 permettent d'exprimer cette relation en fonction des unités de la simulation :

$$\text{Log } \bar{d}_c = L_0 + \frac{1}{n} \text{Log } \text{MCS} \quad \text{avec} \quad 4.62$$

$$L_0 = \text{Log} \left(\frac{K_r}{a} \right) - \frac{1}{n} \text{Log} \left[K_{\text{MCS}} \exp \left(\frac{-Q_{\text{MCS}}}{RT} \right) \right] \quad 4.63$$

L'exposant de croissance peut donc être déduit d'une représentation dans les unités de la simulation si l'on fait l'hypothèse que celles-ci sont proportionnelles aux grandeurs réelles.

Les droites de régression et leurs équations respectives obtenues pour les 4 calculs ont été représentées à la figure 4.40. Les premiers instants de la modélisation (jusqu'à 4000 MCS environ) n'ont pas été considérés dans la régression car ils correspondent à un régime de croissance transitoire. Les exposants n obtenus sont situés autour de 2.3 à l'exception du calcul 3 où il vaut 2.82.



Fig. 4.41 : Extrait d'une microstructure obtenue par une simulation de Monte Carlo avec une probabilité de transition élevée (calcul N°3).

Les exposants déduits de la simulation sont supérieurs à la valeur de 2 prédite par la théorie. Cette déviation est attribuée au caractère stochastique du modèle et à la nature discrète des déplacements d'interfaces. Les modèles théoriques sont basés sur une relation reliant linéairement la vitesse de migration à la courbure du joint de grains. Or, dans le modèle de Monte Carlo, les mouvements des interfaces sont décrits par des transitions d'orientation qui sont certes réalisées avec une probabilité plus élevée dans la direction du centre de courbure du joint de grains, mais qui peuvent occasionnellement avoir lieu dans le sens opposé. Comme on l'a signalé précédemment, ces transitions génératrices de désordre ont pour effet de ralentir la migration. Elles se traduisent mathématiquement par un

exposant n plus élevé que celui obtenu avec un modèle calculant le déplacement directement en fonction de la courbure. Le phénomène qui est particulièrement marqué à haute température, ou plus exactement lorsque le rapport $J/(2RT)$ est faible (calcul N°3, $n=2.83$), opère probablement aussi dans les autres cas ($n=2.3$).

La discrétisation de la microstructure par un réseau de cellules hexagonales introduit également des irrégularités géométriques susceptibles de perturber la cinétique de croissance. En effet, si le nombre de cellules disponibles est trop faible, la courbure des joints de grains est mal décrite et la cinétique de croissance risque d'être biaisée. Des travaux récents (Radhakrishnan, 1995a) basés sur un algorithme optimisé ont par ailleurs montré que des simulations effectuées avec des nombres de cellules et d'itérations très élevés aboutissaient à des exposants de croissance proches de 2. Ce résultat explique l'écart observé entre l'exposant obtenu (2.3) et la valeur $n=2.43$ déduite par Anderson (1984) à partir d'un maillage plus grossier (200×200 cellules).

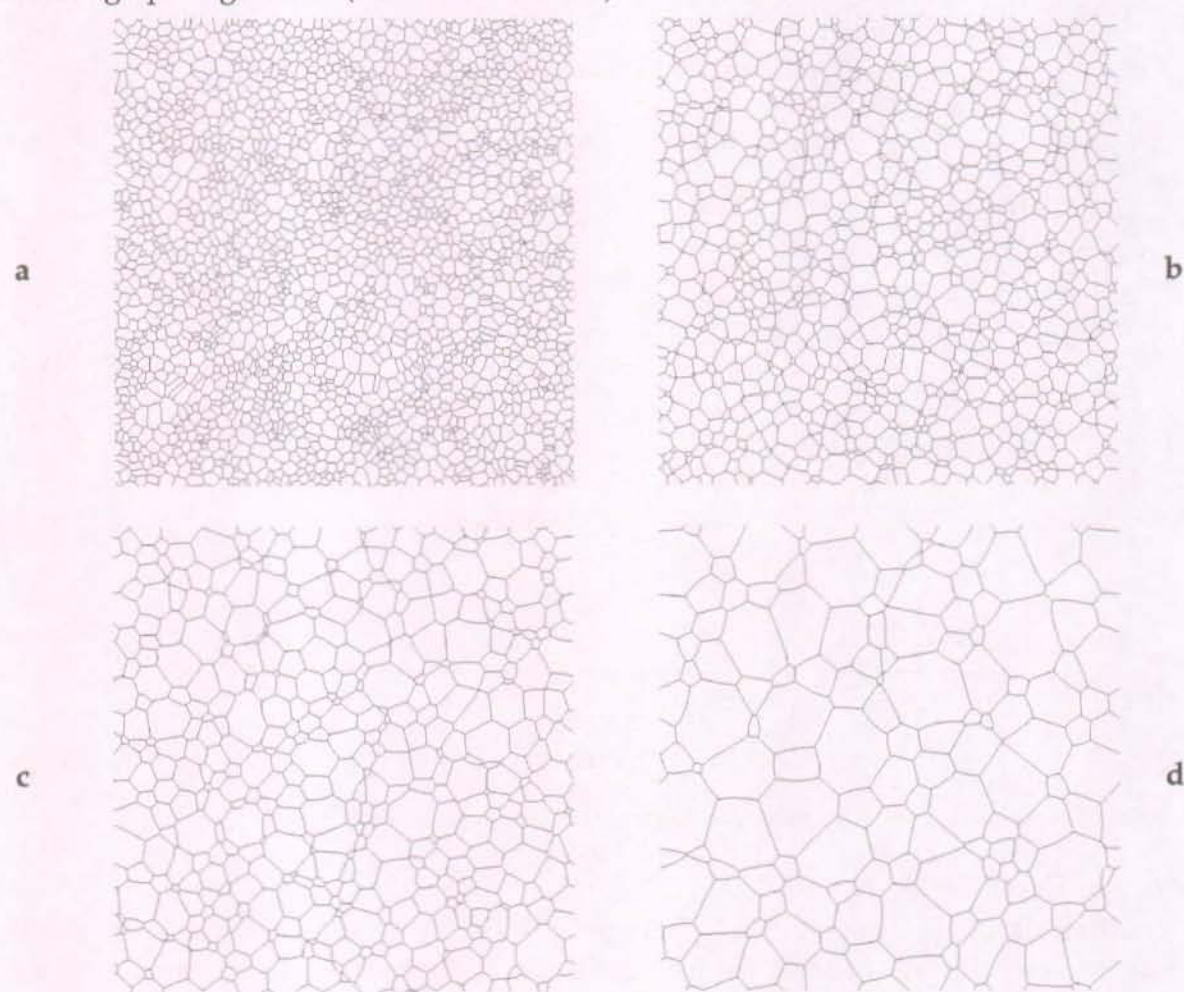


Fig. 4.42 : Evolution de la structure de grains simulée avec le modèle mécanique. Etats aux pas de temps 0 (a), 24100 (b), 55220 (c) et 200000 (d). Les nombres de grains correspondants sont 2000, 1000, 440 et 137. ($\Delta t = 1$ s, $\gamma = 1$ N/m, $\mu = 2 \cdot 10^{-8}$ m³ N⁻¹ s⁻¹).

Modèle mécanique

Une simulation à l'aide du modèle mécanique a été réalisée à partir d'une microstructure initiale contenant 2000 grains. Des images de la structure obtenues à 4 différents stades du calcul sont présentées à la figure 4.42. Comme pour la simulation de Monte Carlo, l'échelle de temps indiquée est arbitraire (nombre de

pas de temps). Un calcul effectué avec des paramètres calibrés sur des valeurs expérimentales sera proposé au paragraphe suivant.

Les joints de grains décrits par le modèle possèdent une forme régulière avec une courbure pratiquement constante entre deux sommets. Cette régularité évoque les structures formées par les bulles de savon. Les grains dans les métaux possèdent en général des formes moins régulières. La migration des joints de grains est en effet moins libre que dans les systèmes liquide/gaz en raison de la lenteur de la diffusion des atomes à travers les interfaces. La présence d'impuretés et les effets d'anisotropie du réseau cristallin peuvent de surcroît faire obstacle au mouvement des joints de grains et leur conférer une forme irrégulière.

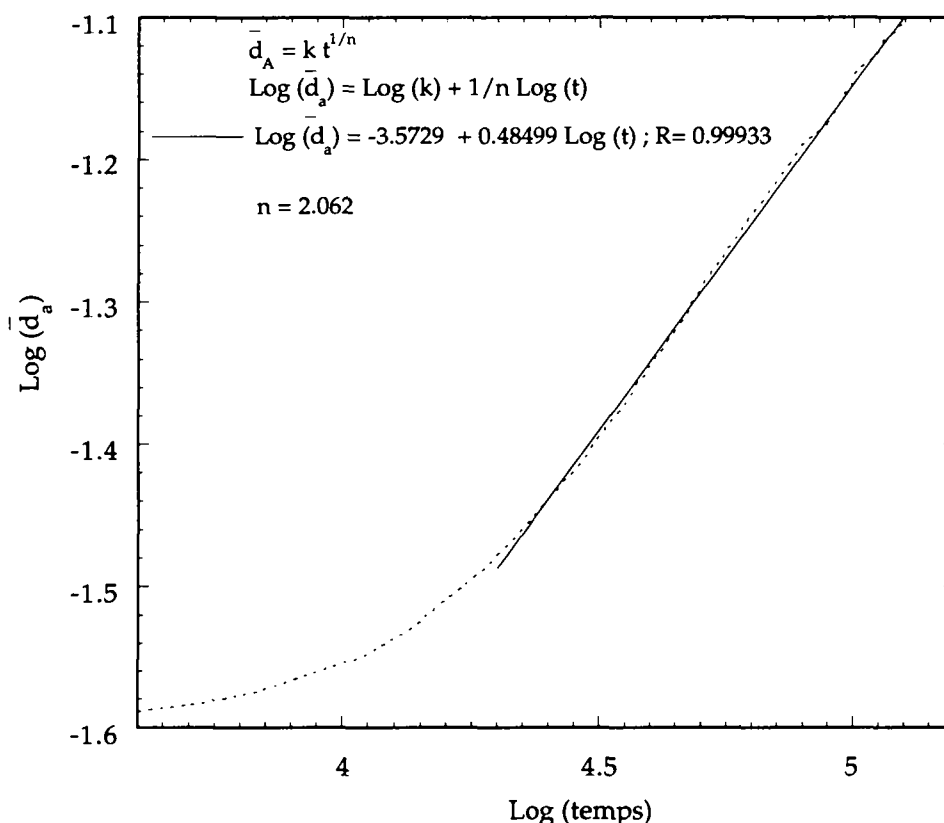


Fig. 4.43 : Détermination de l'exposant de croissance obtenu avec le modèle mécanique.

Coefficient de la loi de croissance

Le coefficient de la loi de croissance prédit par le modèle mécanique a été déterminé selon la procédure déjà appliquée à la modélisation de Monte Carlo. La figure 4.43 montre la régression linéaire effectuée sur la courbe du diamètre moyen du grain représenté en fonction du temps. La pente obtenue est de 0.485, ce qui correspond à un exposant de croissance égal à 2.03. Ce résultat est en accord avec la valeur de $n = 2$ prédite par les modèles analytiques du chapitre 2 (à l'exception du modèle de Rhines et Craig (1974)). La correspondance entre les modèles analytique et numérique est expliquée par l'usage de la même relation pour la vitesse de migration d'un joint de grains (éq. 4.52). La simulation permet de montrer que l'approche moyenne telle qu'effectuée par Burke et Turnbull (éqs. 2.25-2.26) est correcte pour une microstructure contenant des grains de formes et de tailles diverses.

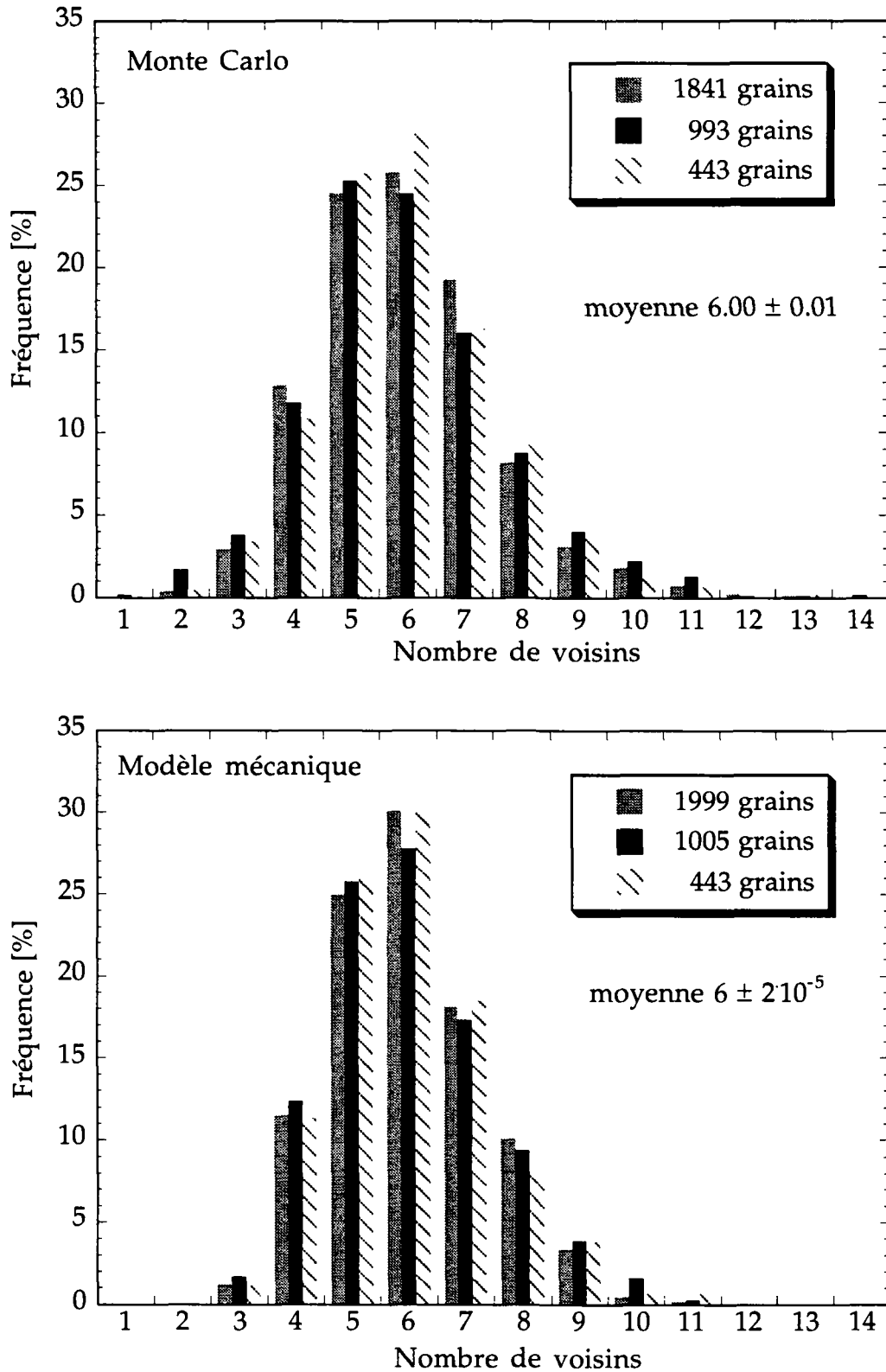


Fig. 4.44 : Distributions du nombre de voisins obtenues avec le modèle de Monte Carlo (a) et avec le modèle mécanique (b). Les nombres de grains indiqués correspondent à différents stades du calcul (microstructure initiale de 2000 grains).

Comparaison des distributions du nombre de voisins

La figure 4.44 illustre les distributions du nombre de voisins calculées dans les structures de grains obtenues avec la méthode de Monte Carlo et le modèle mécanique. Pour les deux cas, la moyenne calculée est de 6. Ce résultat peut être déduit de manière théorique à partir de l'équation d'Euler (éq. 2.28) et de l'hypothèse que le nombre d'arêtes reliées à un sommet est trois dans tous les cas. Les distributions varient peu avec le nombre de grains au cours de la croissance. La distribution obtenue avec la méthode de Monte Carlo est plus étalée que celle provenant du modèle mécanique. Les grains à 1 ou 2 voisins n'existent en effet que dans le premier cas. Ce phénomène est lié au processus stochastique du modèle de Monte Carlo qui peut conduire à la scission d'un grain et à l'enclavement de cellules (v. Fig. 4.41). Ce processus qui est particulièrement fréquent à haute température entraîne en contrepartie la formation de grains possédant un nombre de voisins élevé. (Les classes 12, 13 et 14 sont encore représentées à la figure 4.44 (a)). Ces grains comportent généralement plusieurs cellules enclavées et se distinguent par une taille supérieure à la moyenne. Le modèle mécanique interdit quant à lui l'existence de grains à moins de trois faces. Les grains lenticulaires (2 voisins) sont en effet éliminés de la microstructure initiale avant de commencer le calcul. En outre, les transformations topologiques opérées par la suite ne peuvent jamais aboutir à des grains comportant moins de trois voisins.

4.3.4 Calibrage des paramètres des modèles

Données expérimentales

Les mesures présentées au paragraphe 4.3.2 sont trop limitées pour permettre de calibrer les paramètres des modèles sur une plage de temps et de température intéressante. Pour cette raison, la méthodologie présentée ici a été appliquée à des données expérimentales provenant d'autres sources. Les mesures utilisées (Orlich, 1954) indiquent l'évolution de la taille moyenne du grain austénitique dans l'acier Ck45 en fonction de la température et de la vitesse de chauffage (v. Fig. 4.45 (a)). Cette information n'est cependant pas directement utilisable pour le calibrage des modèles, car la méthodologie adoptée nécessite des données isothermes. Une procédure de méthodes inverses, décrite dans l'annexe 7.9, a été développée spécialement pour convertir ces informations en données isothermes. Le résultat de cette opération est présenté à la figure 4.45 (b).

Procédure

La première étape consiste à choisir un nombre de grains et une taille de domaine (ou le facteur d'échelle a de l'équation 4.50) permettant de disposer d'une taille de grain initiale correspondant à celle des données expérimentales. Le calcul est alors réalisé en utilisant une échelle de temps arbitraire, t_{sim} (par exemple MCS pour le modèle de Monte Carlo). Le diamètre moyen obtenu au cours de la simulation est ensuite représenté en fonction du temps $t = \alpha t_{sim}$, où α est un paramètre ajusté afin d'obtenir le meilleur accord possible avec la courbe expérimentale de la température correspondante. La répétition de l'opération pour différentes températures de maintien permet de tracer une courbe $\alpha(T)$. Une loi de conversion pour les échelles de temps peut alors être déduite à l'aide d'une fonction ajustée.

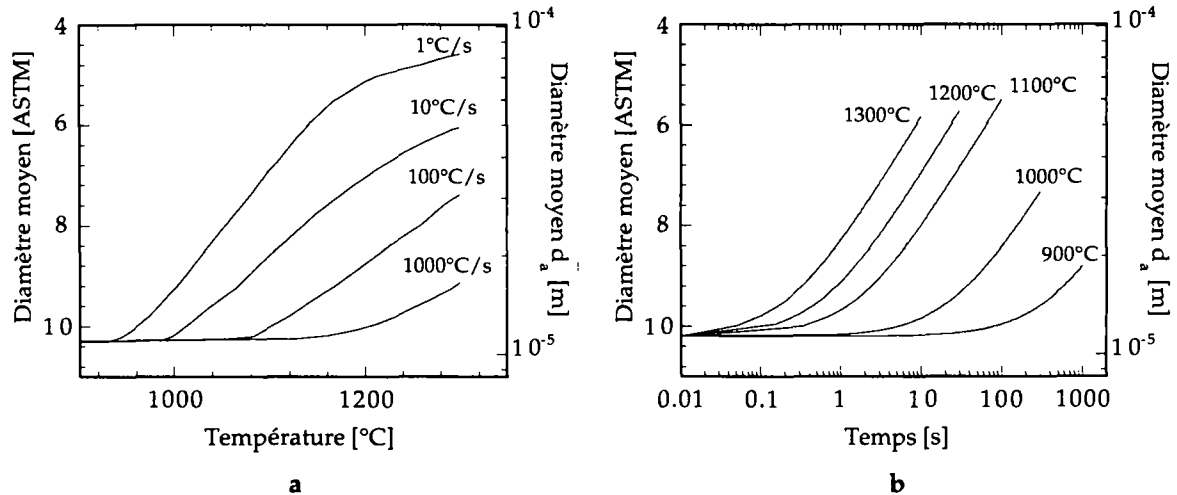


Fig. 4.45 : Données expérimentales sur la croissance du grain austénitique dans l'acier Ck45 utilisées pour calibrer les paramètres des modèles. La figure (b) a été calculée par méthode inverse à partir des données anisothermes de (Orlich, 1954) en (a).

Application au modèle de Monte Carlo

Les calculs utilisés pour le calibrage ont été effectués avec les conditions du cas N°3 données dans le tableau 4.4. Le seul paramètre modifié est la température qui n'influence par ailleurs que légèrement les probabilités de transition dans la plage étudiée (entre 900°C et 1300°C). Cinq calculs (900°C, 1000°C, 1100°C, 1200°C et 1300°C) ont été réalisés avec une taille de cellule a fixée à 1.5 μm . Cette valeur a été déterminée à partir du nombre de grains initial (2000) et du nombre total de cellules (300x300) afin d'obtenir une taille moyenne de grain initiale de 12 μm (10.2 ASTM). Les tailles moyennes calculées aux 5 températures de maintien peuvent être comparées aux valeurs expérimentales à la figure 4.46 (a). L'échelle de temps de la simulation (MCS) a été multipliée par un coefficient α dont les valeurs sont données dans le tableau 4.5. Ce coefficient correspond à l'intervalle de temps Δt associé à 1 MCS. La représentation graphique de $\ln(\alpha)$ en fonction de $1/T$ (Fig. 4.47 (a)) montre que la relation d'Arrhénius 4.49 est une loi de conversion adaptée (coefficient de corrélation de 0.988). Les paramètres déduits de la régression linéaire mènent à l'expression suivante :

$$1 \text{ MCS} = 3.07 \cdot 10^{13} \exp\left(\frac{-288'595}{RT}\right) \Delta t \quad 4.64$$

où R est la constante des gaz parfaits (8.31 $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$).

Température de maintien	Monte Carlo $\alpha = \Delta t$	Modèle mécanique $\mu = 1/\alpha$
900°C	0.30	$2.5956 \cdot 10^{-13}$
1000°C	0.025	$4.4923 \cdot 10^{-12}$
1100°C	0.0015	$5.4579 \cdot 10^{-11}$
1200°C	0.0005	$2.1236 \cdot 10^{-10}$
1300°C	0.0002	$1.3965 \cdot 10^{-09}$

Tableau 4.5 : Coefficients de calibrage.

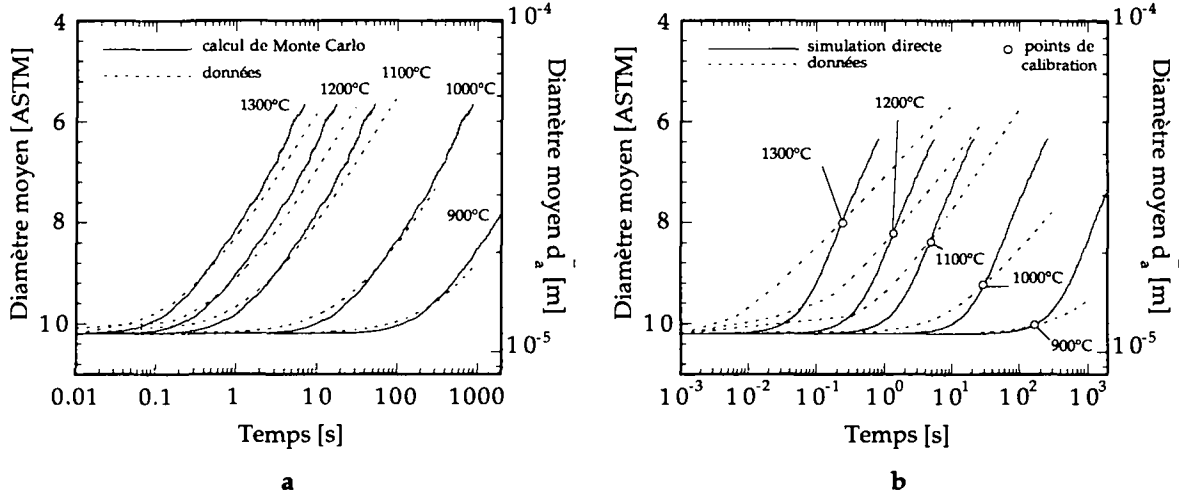


Fig. 4.46 : Comparaison des données expérimentales isothermes avec les courbes calculées avec le modèle de Monte Carlo (a) et le modèle mécanique (b). Les résultats de simulation ont été représentés en fonction du temps réel en multipliant le temps de la simulation par un coefficient ajusté.

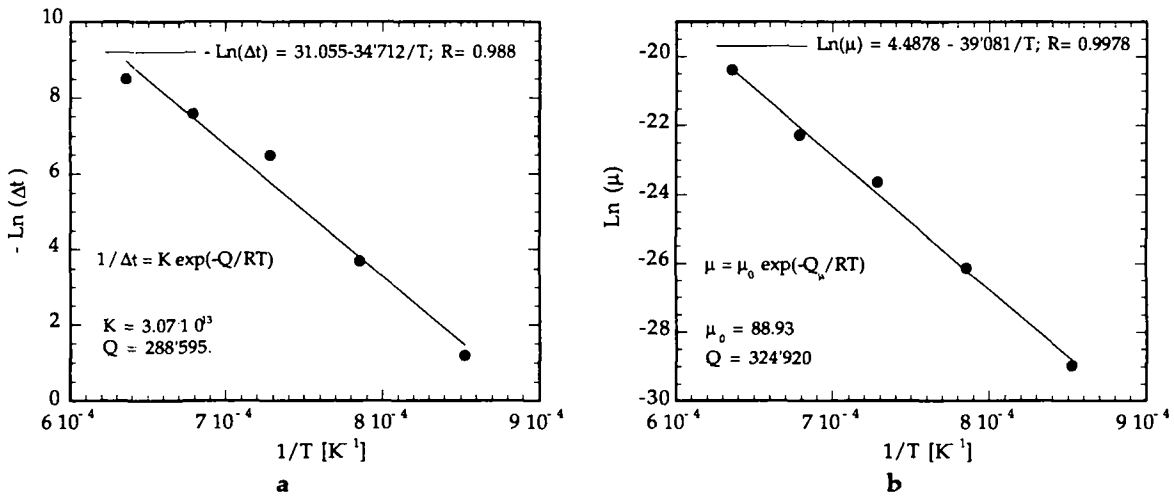


Fig. 4.47 : Détermination des paramètres de la fonction de conversion des échelles de temps pour le modèle de Monte Carlo (a) et de la loi exprimant la mobilité en fonction de la température pour le modèle mécanique (b).

Application au modèle mécanique

Contrairement au modèle de Monte Carlo basé sur des échelles de temps et d'espace arbitraires, les grandeurs utilisées dans le modèle mécanique possèdent toutes une signification physique. Cependant, la mobilité des joints de grains et dans une moindre mesure la tension de surface sont des grandeurs souvent mal connues. Une étape de calibrage peut donc s'avérer nécessaire avant d'appliquer le modèle à un alliage particulier.

La procédure précédemment appliquée au modèle de Monte Carlo a été reprise pour déterminer la mobilité et sa dépendance en température. La démarche est fondée sur l'hypothèse que la tension de surface $\gamma = 0.7 \text{ N/m}$ (Murr, 1975) est connue et indépendante de la température et que la mobilité obéit à une fonction de la forme :

$$\mu = \mu_0 \exp\left(\frac{-Q_\mu}{RT}\right) \tag{4.65}$$

où μ_0 et Q_μ sont les paramètres à déterminer.

Cinq calculs ont été effectués avec une température de maintien valant respectivement (900°C, 1000°C, 1100°C, 1200°C, 1300°C) et une mobilité fixée arbitrairement à 1. La microstructure initiale comporte 2000 grains d'une taille moyenne de 12 μm .

Les courbes de tailles moyennes obtenues aux 5 températures de maintien sont représentées en fonction du temps $t = \alpha t_{\text{sim}}$ à la figure 4.46 (b). Les coefficients α donnés dans le tableau 4.5 ont été ajustés afin d'obtenir une correspondance convenable avec les résultats expérimentaux. Comme la cinétique de croissance est directement proportionnelle à la mobilité, cette dernière est donnée par la relation :

$$\mu = 1/\alpha \quad 4.66$$

La représentation de $\ln(\mu)$ en fonction de $1/T$ permet de déduire les coefficients μ_0 et Q_μ de la relation 4.65 (v. Fig. 4.47 (b)). L'expression obtenue est la suivante :

$$\mu = 88.93 \exp\left(\frac{-324'920}{RT}\right) \quad 4.67$$

Comparaisons

Les paramètres obtenus ont ensuite été utilisés pour recalculer la cinétique de croissance granulaire avec les vitesses de chauffage des données expérimentales (1°C/s, 10°C/s, 100°C/s et 1000°C/s). Le pas de temps réel (modèle de Monte Carlo) et la mobilité (modèle mécanique) ont ainsi été modifiés au cours du calcul pour tenir compte de la température momentanée. Les résultats obtenus avec les deux modèles ont été superposés aux courbes expérimentales à la figure 4.48. L'accord entre la simulation et les expériences s'avère assez médiocre, en particulier pour les résultats du modèle mécanique. Les tailles de grain prédites par la modélisation se montrent en effet trop faibles en début de croissance, mais augmentent fortement au cours du calcul pour finalement dépasser les valeurs expérimentales. Ces pentes plus élevées traduisent une différence entre les exposants de croissance de la simulation (2 pour le modèle mécanique et 2.3 pour la méthode de Monte Carlo) et celui associé aux mesures, estimé à 4 (v. paragraphe 7.9.3 en annexe). Cet effet est également visible sur les courbes de calibrage de la figure 4.46, en particulier pour le modèle mécanique.

Les paramètres calibrés ont également été utilisés pour calculer la cinétique de croissance à 900°C et la comparer aux résultats expérimentaux de la section 4.3.1. Le résultat présenté à la figure 4.49 peut être jugé satisfaisant si l'on tient compte de l'erreur de mesure et du fait que les paramètres ont été déduits d'une base de données anisotherme pour une plage de température comprise entre 950°C et 1300°C.

Les modèles développés sont basés sur l'hypothèse d'une croissance du grain dite "idéale". Ce terme signifie que les interfaces migrent en direction de leur centre de courbure avec une vitesse dépendant de la température et de la courbure locale uniquement. (La vitesse de migration est donnée soit directement par une fonction de la courbure et de la mobilité, soit de manière indirecte par une probabilité de migration dépendant du nombre de cellules de chaque côté de l'interface). En réalité, lorsque le métal n'est pas extrêmement pur, la migration des joints de grains est ralentie par un effet de drainage des éléments en solution.

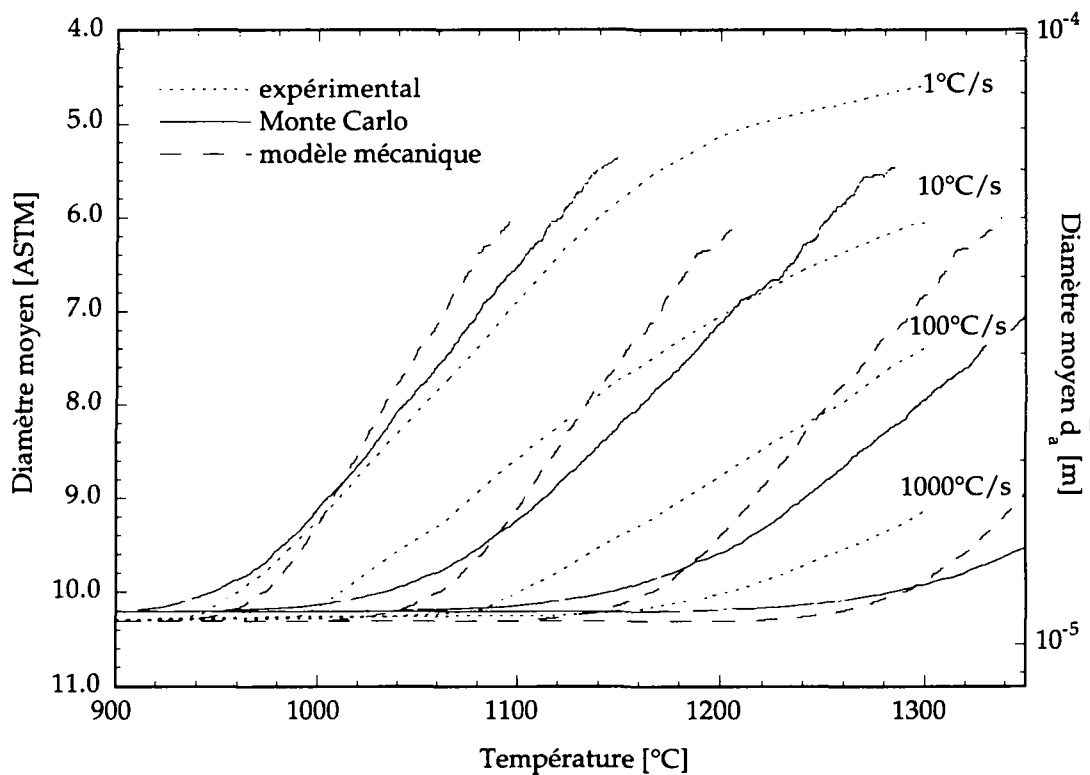


Fig. 4.48 : Comparaison des cinétiques de croissance granulaire expérimentales et calculées avec les paramètres calibrés. Courbes expérimentales de (Orlich, 1954).

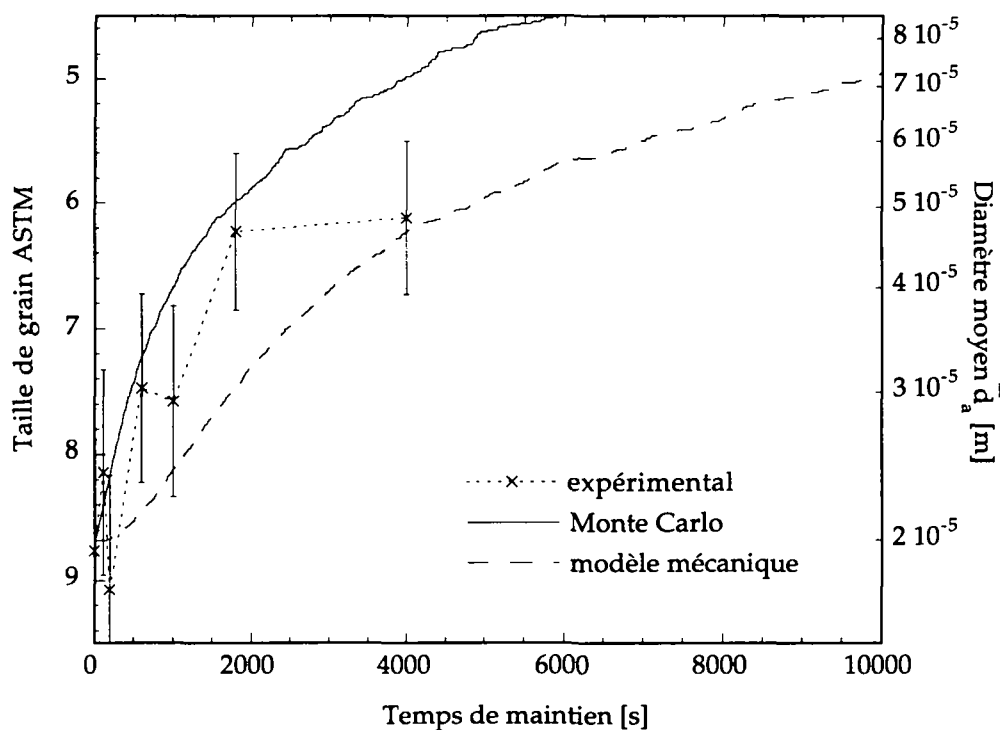


Fig. 4.49 : Cinétiques de croissance granulaire à 900°C obtenues expérimentalement et par calcul.

Les impuretés sous la forme de particules de phase étrangère constituent également des obstacles qui retardent la croissance granulaire. Ces phénomènes se traduisent mathématiquement par des exposants de croissance supérieurs à 2.

Les hypothèses à la base des modèles sont donc trop restrictives pour permettre de reproduire fidèlement les résultats expérimentaux. Des solutions pour prendre en compte les effets des impuretés et des particules sur la cinétique de croissance ont été proposées aussi bien pour les modèles mécaniques (Frost, 1993) que pour la méthode de Monte Carlo (Srolovitz, 1984b). Ces techniques nécessitent toutefois de calibrer un plus grand nombre de paramètres avant d'obtenir un résultat réaliste.

4.3.5 Conclusion

Deux modèles de simulation de la croissance granulaire ont été développés et comparés. Le premier est basé sur une approche mécanique. Il possède l'avantage de décrire de manière réaliste la croissance *idéale* d'une structure de grains telle qu'elle a lieu dans les systèmes liquide/gaz. Le déplacement des joints de grains est calculé en fonction des grandeurs physiques réelles telles que le temps, la courbure d'interface, la tension de surface et la mobilité. Il aboutit à un exposant de la loi de croissance égal à 2.

Le second modèle est basé sur une méthode de Monte Carlo. Cette approche inspirée des mécanismes atomistiques ne possède guère de fondement à l'échelle de la simulation. Le modèle prédit toutefois une cinétique de croissance en meilleur accord avec les mesures. L'exposant de croissance $n = 2.3$ qui provient de la nature aléatoire du modèle est en effet plus proche des valeurs expérimentales. L'irrégularité du mouvement des joints de grains liée au processus stochastique reproduit en quelque sorte l'effet des impuretés présentes dans les cas réels.

Contrairement au modèle mécanique, la méthode de Monte Carlo utilise des échelles de temps et d'espace arbitraires. La procédure de calibrage décrite et appliquée permet de pallier à cet inconvénient lorsque des données expérimentales isothermes sont disponibles. La même procédure de calibrage peut en outre être utilisée pour déterminer la mobilité utilisée dans le modèle mécanique lorsque ce paramètre est mal connu.

La comparaison des résultats expérimentaux et simulés s'est avérée relativement satisfaisante. La faible valeur de l'exposant de croissance associé aux modèles constitue toutefois une limitation importante à l'application des modèles à des alliages commerciaux tels que le Ck45. La prise en compte des obstacles au mouvement des joints de grains (impuretés et particules) permettrait d'augmenter la valeur de l'exposant n et d'améliorer la prédiction.

4.4 Combinaison des modèles présentés au chapitre 4

Jusqu'ici, l'austénitisation d'un acier hypoeutectoïde a été abordée avec l'hypothèse que le processus peut être dissocié en 3 étapes : (i) dissolution de la perlite, (ii) transformation de la ferrite en austénite et homogénéisation et (iii) croissance du grain austénitique. Chaque étape a donné lieu à un ou plusieurs modèles dans lesquels les autres phénomènes ont été négligés ou pris en compte de manière indirecte.

Dans cette dernière section, un premier pas est effectué vers une modélisation de l'ensemble du processus d'austénitisation. L'approche effectuée a consisté à modifier le modèle de volumes finis 2D présenté à la section 4.2 afin de pouvoir décrire la dissolution de la perlite, la transformation de la ferrite en austénite et l'homogénéisation avec un même modèle. La croissance du grain austénitique reste décrite de manière séparée, mais un calcul basé sur le résultat du modèle de transformations de phase sera proposé comme exemple de couplage.

4.4.1 Méthode

Formation de l'austénite à partir de la perlite et de la ferrite, homogénéisation

Le modèle bidimensionnel de volumes finis présenté à la section 4.2 a été modifié afin de pouvoir décrire également la transformation de perlite en austénite. La microstructure initiale utilisée dans le calcul est constituée de zones de ferrite et de perlite. Cette image peut être générée numériquement ou obtenue par la digitalisation d'une micrographie. Les cellules du réseau de volumes finis possèdent au départ trois états possibles : ferritique (α), perlitique (P) ou interface ferrite/perlite (α/P). Au cours du calcul, des états supplémentaires sont considérés : austénitique (γ) et interface (α/γ). La diffusion du carbone dans la structure est calculée selon la procédure décrite à la section 4.2.1. Le calcul est cependant limité aux domaines ferritique et austénitique. La concentration dans la perlite est en effet supposée constante, de même que les interfaces ferrite/perlite sont considérées comme immobiles et "imperméables".

La germination de l'austénite est décrite par l'apparition simultanée à la température eutectoïde d'un nombre de grains donné par la relation suivante :

$$N_{\text{grains}} = N_A w_x w_y (1 - f_\alpha) \quad 4.68$$

où w_x et w_y désignent les dimensions du domaine, N_A la densité de sites de germination dans une microstructure entièrement perlitique et f_α la fraction volumique initiale de ferrite. Les coordonnées des sites de germination sont obtenues par le choix d'une cellule au hasard parmi les cellules des zones perlitiques. Les probabilités de germination utilisées sont plus élevées pour les cellules de type (α/P) que celle de type (P). Cette différence permet de favoriser l'apparition des grains d'austénite sur les interfaces entre les colonies de perlite et les régions ferritiques.

La croissance des grains d'austénite dans la matrice perlitique est décrite par une relation cinétique $v(T)$ donnant la vitesse de croissance en fonction de la température. (Cette dernière est donnée sous la forme d'une histoire thermique $T(t)$). La relation $v(T)$, qui doit être adaptée à l'espacement interlamellaire perlitique, peut être obtenue expérimentalement ou avec le modèle présenté à la section 4.1. Elle permet de calculer le rayon (unique) des grains au cours du temps à l'aide de la relation :

$$R_t = R_{t-\Delta t} + v(T(t)) \Delta t \quad 4.69$$

où Δt est le pas de temps de la simulation et $R_{t-\Delta t}$ le rayon au pas précédent.

La croissance des grains est décrite numériquement par la capture au temps t de toutes les cellules perlitiques dont la distance du centre de germination le plus proche est inférieure à R_t . Ces cellules prennent alors l'état (γ) ou (α/γ) selon leur état précédent ((P) ou (α/P)).

La croissance des grains d'austénite dans les zones de ferrite est calculée selon la procédure normale basée sur la résolution de l'équation de diffusion (v. section 4.2). Le calcul est toutefois limité aux cellules de types (α) , (γ) et (α/γ) . Aucun échange de carbone n'est considéré avec les cellules de type P ou α/P . Le calcul est poursuivi jusqu'à l'obtention d'un domaine entièrement austénitique homogène en carbone.

Croissance du grain austénitique

La croissance du grain austénitique a été décrite par le modèle de Monte Carlo et les fonctions de conversion obtenues à la section 4.3. Le couplage avec le modèle précédent a consisté uniquement à reprendre la taille moyenne du grain austénitique mesurée dans la microstructure à la fin de la transformation. Le diamètre moyen initial utilisé dans la simulation de Monte Carlo a donc été déduit des paramètres du modèle précédent avec la relation :

$$\bar{d}_a = \sqrt{\frac{4 w_x w_y}{\pi N_{\text{grains}}}} \quad 4.70$$

où N_{grains} , w_x et w_y sont les paramètres définis dans l'équation 4.68.

La simulation de Monte Carlo a dû cependant être effectuée sur un domaine de taille supérieure à $w_x w_y$ afin de disposer d'un nombre de grains suffisant pour décrire le grossissement jusqu'à un stade avancé.

4.4.2 Résultats et discussion

La microstructure initiale utilisée dans la simulation est constituée de l'image digitalisée montrée à la figure 4.30 (A). Il s'agit d'un extrait d'une micrographie des échantillons (A) de l'acier Ck45 utilisés dans le travail expérimental de la section 4.2.2. Le domaine de $100 \mu\text{m} \times 100 \mu\text{m}$ est composé de zones de ferrite (en clair) et de zones de perlite (en foncé). La perlite est supposée posséder un espacement interlamellaire de $0.5 \mu\text{m}$.

Les calculs ont été réalisés avec une densité de grains d'austénite $N_A = 5 \cdot 10^9 \text{ m}^{-2}$. En tenant compte d'une fraction initiale de ferrite de 41%, le nombre de grains se réduit à 29 pour le domaine utilisé. Les sites de germination ont été choisis au hasard parmi les cellules perlitiques avec une probabilité 10 fois plus élevée pour les cellules de type (α/P) . La cinétique de croissance des grains austénitiques dans la perlite a été calculée à partir de la courbe $v(T)$ présentée à la figure 4.11. Plus précisément, les vitesses de croissance utilisées sont fournies par la courbe expérimentale de Roberts (1943) dont les valeurs sont très proches des résultats obtenus numériquement. Cette courbe présente en outre l'avantage de s'appliquer à des températures plus élevées. La vitesse de chauffage utilisée est de 1°C/s . Le coefficient de diffusion du carbone dans l'austénite est estimé en fonction de la concentration locale et de la température selon les courbes décrites à la figure 7.6.1.

Le résultat du calcul est présenté à la figure 4.50 où sont montrées des images de la microstructure à différents instants au cours du chauffage. La ferrite est représentée en brun (gris foncé), alors que l'austénite et la perlite apparaissent respectivement en orange (gris moyen) et en jaune (gris clair). Les différents tons visibles dans l'austénite décrivent le champ de concentration du carbone dans le

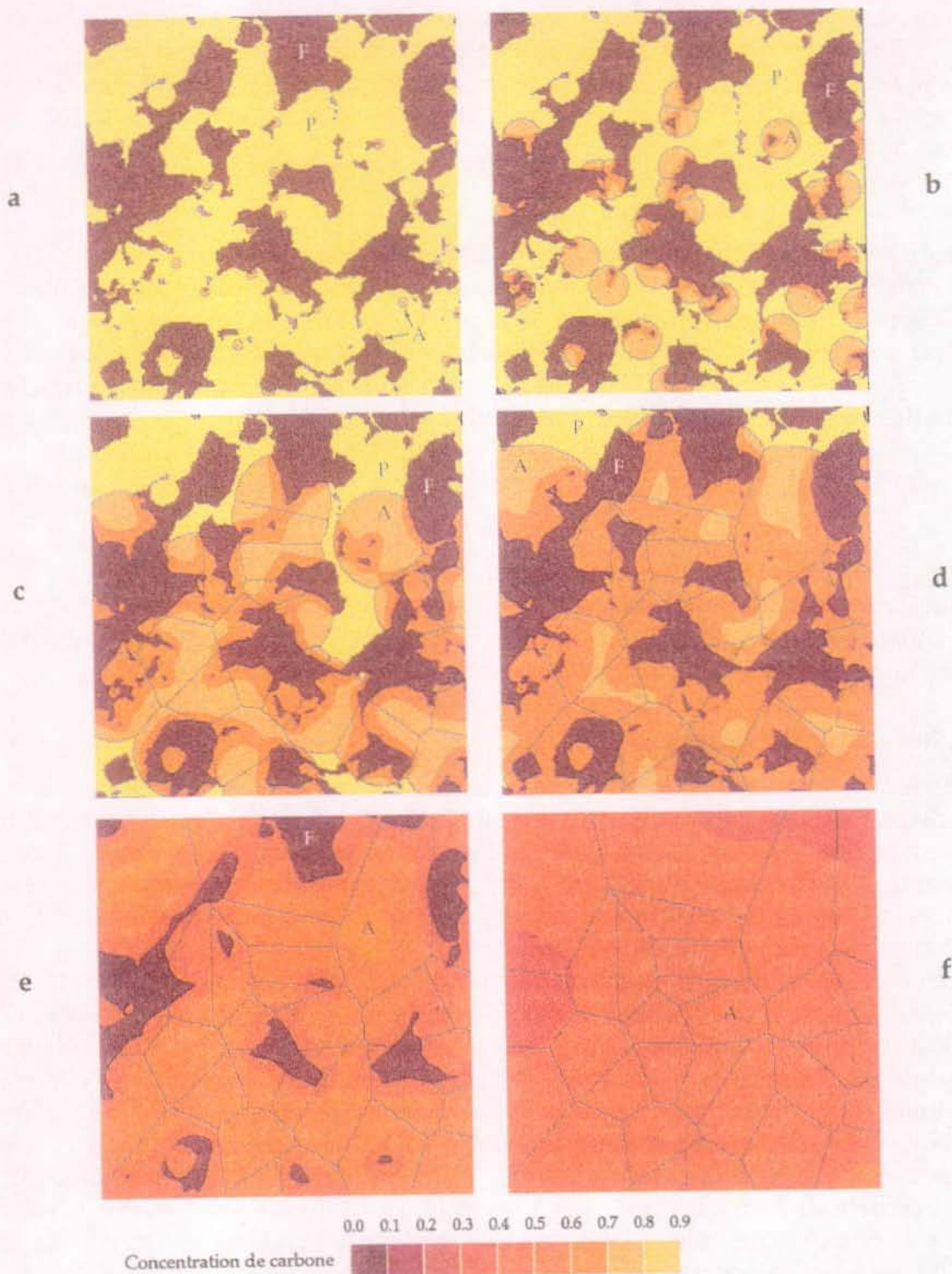


Fig. 4.50 : Evolution de la microstructure pendant l'austénitisation d'un alliage Fe-0.45%C calculée avec le modèle de différences finies 2D. Les zones de perlite (P), représentées en clair, ainsi que les zones de ferrite (F), en foncé, sont progressivement dissoutes dans les grains d'austénite (A). Les images correspondent aux températures suivantes : 732°C (a), 737°C (b), 742°C (c), 747°C (d), 779°C (e), 857°C (f). Les autres conditions sont (domaine de 100 μm x 100 μm , 40'000 cellules, $\dot{T} = 1^\circ\text{C/s}$, $N_A = 5 \cdot 10^9$ grains/ m^2 , $\lambda_{\text{perlite}} = 0.5 \mu\text{m}$).

domaine. L'image (a) montrant la microstructure juste après le début de la transformation indique que la germination a lieu principalement sur les interfaces entre la perlite et la ferrite. L'austénite envahit ensuite rapidement le domaine perlitique (images (b), (c), (d)) et, plus tardivement, les zones de ferrite (images (d), (e), (f)). Après 130 s de chauffage (image (f)), le domaine est complètement austénitique et possède une concentration de carbone relativement homogène (entre 0.39 et 0.5%C).

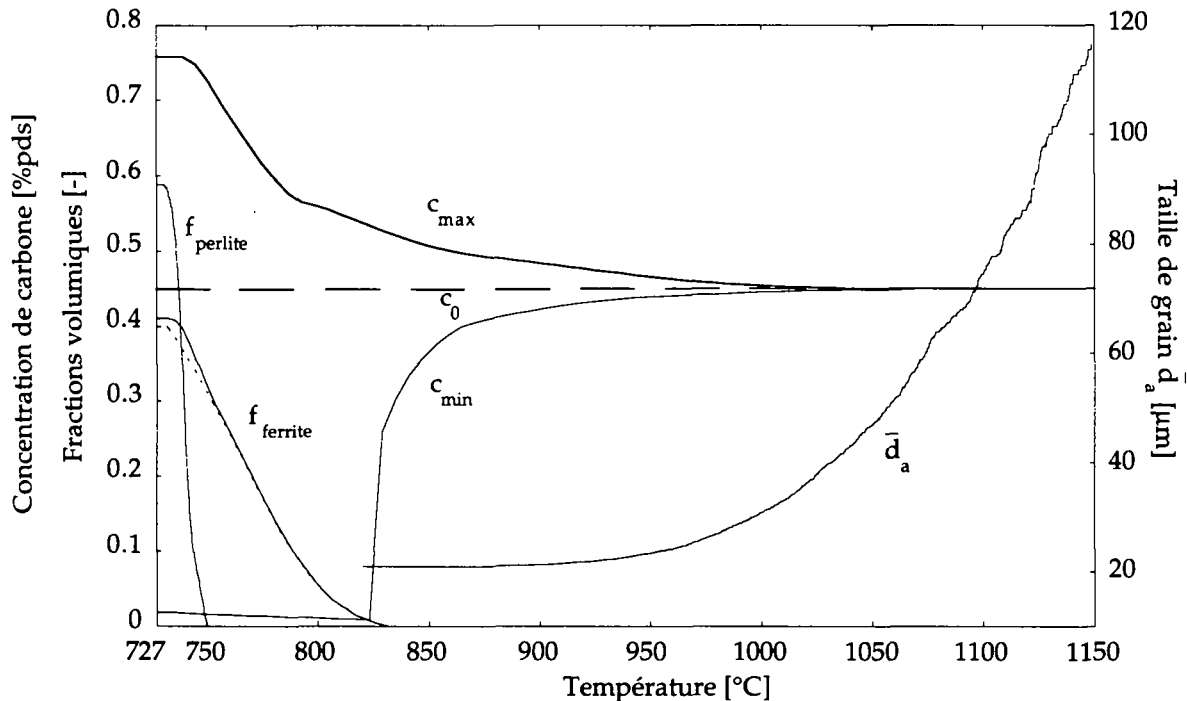


Fig. 4.51 : Cinétiques d'austénitisation, d'homogénéisation et de croissance granulaire dans un acier Fe-0.45%C calculées avec le modèle de différences finies 2D et le modèle de Monte Carlo pour une vitesse de chauffage de 1°C/s. La courbe de la fraction volumique de ferrite tracée en traits tillés a été obtenue par un calcul fondé sur l'hypothèse d'une dissolution instantanée de la perlite à 727°C. Les fractions volumiques de ferrite et de perlite représentées en traits continus correspondent au calcul illustré à la figure 4.50. L'homogénéisation est décrite par les concentrations minimales (c_{min}) et maximale (c_{max}) dans le domaine au cours du calcul.

Les cinétiques d'austénitisation et d'homogénéisation obtenues avec ce calcul peuvent être analysées plus en détail à la figure 4.51. Les fractions volumiques représentées sur cette figure permettent notamment de comparer la cinétique de dissolution des zones perlitiques avec celle de la phase ferritique. Il s'avère que pour les conditions utilisées, la perlite disparaît beaucoup plus rapidement que la ferrite. La disparition complète de la perlite intervient en effet à 750°C alors qu'à la même température la ferrite occupe encore 33% du volume. La microstructure devient entièrement austénitique à 830°C et homogène en carbone vers 1000°C. La fraction volumique de ferrite calculée pour les mêmes conditions mais avec le modèle de la section 4.2 (c'est-à-dire avec l'hypothèse que la transformation de perlite en austénite est instantanée) a également été représentée à la figure 4.51. La courbe obtenue (traits tillés) est quasiment superposée à celle du nouveau modèle, à l'exception des premiers instants de la transformation. La prise en compte de la dissolution de la perlite retarde en effet légèrement la

transformation à ses débuts. En revanche, les deux modèles prédisent la même température de fin de transformation.

Ce résultat tend à confirmer l'hypothèse faite dans la section 4.2, consistant à considérer que le temps de dissolution de la perlite peut être négligé dans le calcul du temps total de transformation. Toutefois, il faut tenir compte des conditions particulières utilisées dans le calcul présenté ici. La germination de la perlite a été décrite par une loi très rudimentaire qui ne tient compte d'aucune surchauffe et d'aucune dispersion sur les instants de germination. En outre, la vitesse de dissolution de la perlite peut être nettement plus faible en réalité, si l'espacement interlamellaire se trouve être plus important.

Les deux derniers aspects évoqués soulignent l'intérêt que présente le modèle couplé. Une loi de germination plus réaliste, de même qu'une base de donnée plus complète pour la cinétique de dissolution de la perlite en fonction de la température et de l'espacement interlamellaire pourraient facilement être introduites dans le modèle. Celui-ci permettrait alors de décrire la cinétique d'austénitisation de manière complète et réaliste.

Croissance du grain austénitique

Le calcul de la croissance du grain austénitique a été effectué avec le modèle de Monte Carlo sur un domaine de $780 \mu\text{m} \times 780 \mu\text{m}$. Ces dimensions ont été ajustées afin de disposer d'environ 2000 grains au départ avec une taille moyenne correspondant à celle de la microstructure montrée à la figure 4.50 (f) ($\bar{d}_a \cong 20 \mu\text{m}$). Le calcul a débuté à la température de la fin de la transformation de la ferrite en austénite (830°C). A un facteur d'échelle près, l'évolution topologique de la microstructure se présente comme celle montrée à la figure 4.39.

La taille de grain obtenue au cours du calcul est représentée à la figure 4.51 en fonction de la température. Cette courbe indique qu'à la vitesse de chauffage de $1^\circ\text{C}/\text{s}$, la croissance granulaire est très lente au départ (le diamètre se maintient à $20 \mu\text{m}$ pendant un temps assez long). Le grossissement du grain n'intervient véritablement qu'au-delà de 950°C , lorsque la mobilité des joints de grains devient importante. Ce calculé montre donc que, dans le cas d'un alliage binaire Fe-C, la croissance du grain qui a lieu durant les transformations de phase peut être négligée.

4.5 Conclusion du chapitre 4

Plusieurs modèles ont été développés pour décrire l'austénitisation des aciers au carbone de composition hypoeutectoïde. Ils ont permis de simuler les différents phénomènes observés lors de la transformation : dissolution de la perlite, transformation de la ferrite en austénite, homogénéisation et croissance du grain austénitique. Dans un premier temps, ces phénomènes ont été considérés de manière séparée avec l'hypothèse qu'ils constituent des étapes successives du processus. Les conclusions dégagées dans les sections relatives à chaque étape peuvent être résumées comme suit :

- Le modèle d'éléments finis développé pour décrire la dissolution de la perlite a permis de calculer la vitesse de croissance d'un grain d'austénite dans une microstructure eutectoïde lamellaire. La prise en compte des effets de la tension de surface dans la résolution de l'équation de diffusion du carbone a permis en outre de calculer la forme stationnaire de l'interface. Le modèle ne s'applique cependant qu'à de faibles valeurs de surchauffe (de 0 à 3°C environ) au-delà desquelles un régime de transformation différent semble avoir lieu.
- Le modèle de volumes finis développé pour décrire la transformation de la ferrite en austénite a permis de calculer la cinétique d'austénitisation et d'homogénéisation en fonction de la température et de la microstructure initiale. La comparaison des cinétiques expérimentales et calculées a montré que le modèle prédit une vitesse de transformation légèrement plus faible que celle mesurée. Cet écart est attribué à la présence de manganèse dans l'alliage expérimental. Un effet stéréologique dû à la résolution de l'équation de diffusion dans une coupe plutôt que dans un domaine tridimensionnel a également été mis en évidence.
- La croissance du grain austénitique a été décrite par deux modèles basés respectivement sur une méthode de Monte Carlo et une approche mécanique. L'approche mécanique s'est révélée parfaitement adaptée à la description de la croissance de grain idéale. Cependant, la cinétique de croissance obtenue avec le modèle de Monte Carlo est en meilleur accord avec les mesures en raison d'un certain désordre microstructural reproduisant "fortuitement" l'effet des impuretés. Les faibles valeurs de l'exposant de croissance associé aux deux modèles ($n=2$ et $n=2.3$ respectivement) constituent toutefois une limitation importante pour l'application à des alliages commerciaux, pour lesquels n est compris entre 2 et 4.

Une procédure permettant de réunir les résultats des différents modèles dans une même simulation a été présentée à la section 4.4. Elle a permis de vérifier que la dissolution de la perlite se déroule beaucoup plus rapidement que celle de la ferrite. Elle a permis de montrer également que la croissance du grain austénitique n'intervenait véritablement que bien après la transformation en austénite. L'hypothèse consistant à dissocier le processus d'austénitisation en trois étapes : (i) dissolution de la perlite, (ii) transformation de la ferrite en austénite et homogénéisation, (iii) croissance du grain austénitique a donc pu être justifiée par cette démarche.

Le modèle combiné proposé dans la section 4.4 constitue un premier pas vers un modèle unique permettant de simuler l'ensemble du processus d'austénitisation. La dissolution de la perlite, la transformation de la ferrite en austénite et l'homogénéisation ont en effet pu être décrites dans un même modèle. En revanche, la croissance du grain austénitique a été calculée séparément. Un modèle unique pourrait facilement être réalisé, si le même réseau de cellules était utilisé pour le calcul de volume finis et la méthode de Monte Carlo. Un tel couplage nécessiterait toutefois l'usage d'un domaine de calcul plus étendu.

Le modèle combiné, dans sa forme actuelle ou couplé avec la méthode de Monte Carlo, nécessiterait quelques améliorations. Il s'agit en premier lieu de la germination de l'austénite, décrite ici de façon très rudimentaire. Une loi donnant le taux de germination en fonction de la température et tenant compte de la surchauffe nécessaire à la formation d'un germe stable pourrait facilement être incorporée au modèle. Elle permettrait de mieux décrire les premiers instants de la transformation. D'autre part, il serait souhaitable de connaître la vitesse de croissance de l'austénite dans la perlite sur une plage de températures et d'espacements interlamellaires plus importante. Dans ce contexte, le modèle présenté à la section 4.1 constitue un outil très utile pour compléter les données expérimentales. Finalement, l'influence qu'exercent les impuretés et les particules sur la croissance du grain austénitique devrait pouvoir être prise en compte si le modèle doit être appliqué à des alliages de pureté médiocre.

L'extension du modèle à trois dimensions d'espace est facilement réalisable. Une version tridimensionnelle du modèle de volume finis a déjà été présentée dans ce travail. L'extension de la méthode de Monte Carlo en trois dimensions a également déjà été décrite à plusieurs reprises dans la littérature (Doherty, 1990; Grest, 1990) et ne semble pas introduire de difficultés particulières. Un tel développement permettrait notamment de s'affranchir des effets stéréologiques évoqués au cours de ce travail.

5. CONCLUSION

Le premier volet de ce travail consistait à développer un logiciel permettant de décrire les différents aspects du procédé de traitement thermique par induction et trempe au défilé. Les différents modules réunis dans le logiciel ont permis de décrire les phénomènes électromagnétiques, la thermique, la radiation et les transformations de phase qui ont lieu durant le traitement. Complété par des mesures du coefficient de transfert de la douche, de la perméabilité magnétique et de la cinétique des transformations de phase à l'état solide, le modèle a pu être appliqué avec succès à trois cas de complexité croissante : chauffage par induction d'une pièce cylindrique sans trempe, trempe au défilé d'une pièce cylindrique, trempe au défilé d'une pièce non cylindrique. Le logiciel obtenu constitue un outil très utile pour développer et optimiser un procédé de traitement thermique par induction. En particulier, la formulation mixte en éléments finis et éléments frontière, qui est utilisée pour la résolution des équations de Maxwell, permet de traiter correctement et sans difficultés les cas de chauffage par induction avec déplacement de l'inducteur.

Dans cette première partie, les transformations de phase à l'état solide ont été abordées à l'échelle du procédé. L'évolution de la fraction volumique des différentes phases a été calculée au moyen d'une règle d'additivité permettant d'appliquer les diagrammes TTA et TTT à une thermique quelconque. Si cette approche est relativement classique (Denis, 1987; Agarwal, 1981; Hakan Gür, 1996), son intégration au sein d'un logiciel développé spécifiquement pour le cas du traitement thermique par induction la rend particulièrement intéressante. Elle a permis notamment d'estimer correctement les profondeurs de trempe obtenues dans le procédé, de même qu'elle a servi à montrer l'influence de la cinétique d'austénitisation sur la microstructure finale de la pièce.

Dans un second volet, les transformations de phase à l'état solide ont été abordées à l'échelle de la microstructure. Les modèles développés pour décrire la dissolution de la perlite, la transformation de ferrite en austénite et la croissance du grain austénitique ont permis d'étudier dans le détail les différentes étapes de l'austénitisation d'un acier hypoeutectoïde. Cette approche microscopique présente l'avantage de décrire directement les phénomènes physiques qui sont à la base des transformations de phase : la diffusion du soluté et la tension de surface. La généralité des équations résolues a permis en particulier d'étudier l'influence de la microstructure initiale sur la cinétique des transformations. Réalisée en deux ou 3 dimensions, l'approche microscopique présente en outre un aspect didactique qu'on aurait tort de négliger, tant il est vrai que l'obtention d'images de la microstructure et du champ de concentration à différents stades de la transformation favorise la compréhension des phénomènes.

Les modèles microscopiques développés ici restent toutefois limités à des domaines de taille restreinte, principalement en raison des temps de calcul et de la place mémoire qui leur sont nécessaires. Un couplage avec un calcul macroscopique tel que développé dans la première partie n'est donc pas envisageable dans l'immédiat. L'approche microscopique pourrait en revanche être utilisée pour établir une base de données permettant de décrire de façon très complète la cinétique d'austénitisation en fonction de la microstructure initiale et de la vitesse de chauffage. Le modèle microscopique dans sa forme actuelle souffre toutefois de sa limitation à des alliages binaires. L'essor actuel des bases de

données et calculs thermodynamiques (Sundman, 1985; Bogdanoff, 1995) laisse cependant imaginer que l'extension à des systèmes ternaires ou multicomposés pourra être réalisée dans un avenir proche. Les modèles microscopiques constitueront alors des outils précieux pour compléter les données expérimentales utilisées dans la modélisation des procédés de traitement thermique.

6. RÉFÉRENCES

- Aaronson-HI et Domian-HA, *Trans. TMS of AIME*, **236**, (1966), p. 781.
- Aaronson-HI, Reynolds-WT, Shiflet-GJ et Spanos-G, *Met. Trans.*, **21A**, (1990), p. 1343.
- Abbruzzese-G, Heckelmann-I et Lücke-K, *Acta Met.*, **40**, (1992), p. 519.
- Agarwal-PK et Brimacombe-JK, *Met. Trans B*, **12B**, (1981), p. 121.
- Ågren-J, *ISIJ Int.*, **32**, (1992), p. 291.
- Akbay-T, Reed-RC et Atkinson-C, *Acta Met.*, **47**, (1994), p. 1469.
- Anderson-MP, Srolovitz-DJ, Grest-GS et Sahni-PS, *Acta Met.*, **32**, (1984), p. 783.
- ASM, *Metal Handbook*, ASM International (1990).
- ASTM, *Annual Book of ASTM Standards*, Designation E112-81, (1981).
- Atkinson-HV, *Acta Met.*, **36**, (1988), p. 469.
- Atkinson-C, Akbay-T et Reed-RC, *Acta Met.*, **43**, (1995), p. 2013.
- Avrami-M, *J. Chem. Phys.*, **8**, (1940), p. 212.
- Bain-EC, *Trans. AIMME*, **70**, (1924), p. 25.
- Bernadou-M et al., "Modulef, une bibliothèque modulaire d'éléments finis", Institut National de Recherche en Informatique, Paris, (1985).
- Bhadeshia-HKDH, *Metal Science*, **15**, (1981), p. 601.
- Bhadeshia-HKDH, Svensson-LE et Gretoft-B, *Acta Met.*, **33**, (1985), p. 1271.
- Bhadeshia-HKDH, in "Trends in Welding Research", ASM, (1989).
- Bhadeshia-HKDH et Christian-JW, *Met. Trans. A*, **21A**, (1990), p. 767.
- Bhadeshia-HKDH, "Bainite in Steels", The Institute of Materials, London, (1992).
- Bodnar-RL et Hansen-SS, *Met. Trans. A*, **25A**, 1994, p. 665.
- Bogdanoff-P, "Modelling of Thermodynamics of Alloy Systems", Master of Philosophy dissertation, University of Cambridge, (1995).
- Bolling-GF et Winegard-WC, *Acta Met.*, **6**, (1958), p. 283.
- Boyer-HE, "Atlas of isothermal transformation and cooling transformation diagrams", ASM, (1977), 422 p.
- Brandt-R, Abbruzzese-R et Lücke-K, *Materials Science Forum*, **204-206**, (1996), p. 289.
- Brandt-WH, *J. of Appl. Phys.*, **16**, (1945), p. 139.
- Brooks-CR, "Principles of the Austenitization of Steels", Elsevier Applied Science, London, (1992), 217 p.
- Burke-JE et Turnbull-D, *Progr. Metal Phys.*, **3**, (1952) p. 220.
- Cahn-JW, *Acta Met.*, **4**, (1956a), p. 449.

- Cahn-JW, *Acta Met.*, **4**, (1956b), p. 572.
- Chaboudez-C, Clain-S, Glardon-R, Rappaz-J, Swierkosz-M et Touzani-R, *IEEE Trans. on Magnetics*, **30**, No.6, (1994), p. 5028.
- Christian-JW, "The Theory of Transformations in Metals and Alloys", 2^e éd., Pergamon Press, Oxford, (1975), p. 542.
- Davenport-ES et Bain-EC, *Trans. AIME*, **90**, (1930), p. 117.
- Davies-EJ, "Conduction and Induction Heating", P. Peregrinus Ltd., London, (1990).
- Denis-S, Sjöström-S et Simon-A, *Met. Trans. A*, **18A**, (1987), p.1203.
- Denis-S, Farias-D et Simon-A, *ISIJ Int.*, **32**, (1992), p. 316.
- Doherty-DH, Li-K, Anderson-MP et Grest-GS, dans "Simulation and Theory of Evolving Microstructures" éd. par M.P. Anderson and A.D.Rollet, TMS, (1990).
- Doré-X, Jacot-A et Rappaz-M, COST 512 MMSP, éd. par M. Rappaz et M. Kedro (CEC, Bruxelles), (1996).
- Drolet-JP et Galibois-A, *Acta Met.*, **16**, (1968), p. 1387.
- Enomoto-M, *ISIJ, Int.*, **32**, (1992), p. 297.
- Farias-D, "Traitement thermique laser de l'acier XC42 et modélisation des transformations de phases en cycles rapides au chauffage et au refroidissement", Thèse INPL, Nancy, France, (1991), 220 p.
- Fernandes-FMB, "Modélisation et calcul de l'évolution de la température et de la microstructure au cours du refroidissement des aciers", Thèse INPL Nancy, France, (1985), 177 p.
- Frost-HJ, Thompson-CV, Howe-CL et Whang-J, *Sripta Met.*, **22**, (1988), p. 65.
- Frost-HJ, Thompson-CV et Walton-DT, dans "Simulation and Theory of Evolving Microstructures" éd. par M.P. Anderson et A.D.Rollet, TMS, (1990).
- Frost-HJ, Thompson-CV et Walton-DT, dans "Modeling of Coarsening and Grain Growth" éd. par S.P. Marsh et C.S. Pande, TMS, (1993), p. 271.
- Fuchizaki-K et Kawasaki-K, *Materials Science Forum*, **204-206**, (1996), p. 267.
- Fullman-RL, in "Metal Interfaces", ASM, Cleveland, (1952), p. 179.
- Gandin-CA et Rappaz-M, *Acta Met.*, **42**, (1994), p. 2233.
- Garcia-CI et Deardo-AJ, *Met. Trans.*, **12A**, (1981), p. 521.
- Gergely-M, *Härterei Techn. Mitt.*, **27**, (1972), p. 184.
- Gilgien-Ph, Travail de Diplôme EPFL, Département des Matériaux, Lausanne, (1990).
- Gilliéron-A, "Etude de la trempe par induction sur l'acier Ck45", Travail de diplôme EINEV, Yverdon, (1993).
- Glazier-JA et Weaire-D, *J. Phys. Matter.*, **4**, (1992), p. 1867.
- Goldenstein-H et Aaronson-HI, *Met. Trans.*, **21A**, (1990), p. 1465.

- Gordon-P et Bassyouni-AE, *Trans. of the Met. Soc. of AIME*, **233**, (1965), p. 391.
- Grange-RA et Kiefer-JM, *Trans. A.S.M.*, **29**, (1941), p. 85.
- Grest-GS, Srolovitz-DJ et Anderson-MP, *Acta Met.*, **33**, (1985), p. 509.
- Grest-GS, Anderson-MP, Srolovitz-DJ et Rollet-AD, *Scr. Met.*, **24**, (1990), p. 661.
- Hakan Gür-G et Tekkaya-AE, *Steel Research*, **67**, (1996), p. 298.
- Hanson-KL, *Acta Met.*, **27**, (1979), p. 515.
- Hehemann-RF et roiano-AR, *Metal Progress*, (1956), p. 97.
- Hildenwall-B et Ericsson-T, dans "Hardenability concepts with application to steel" éd. par Doane et Kirkaldy, AIME, warrendale, (1978), p. 579.
- Hillert-M, *Jernkont. Ann.*, **141**, (1957), p. 757.
- Hillert-M, *Acta Met.*, **13**, (1965), p. 227.
- Hillert-M, Nilsson-K et Törndahl-LE, *J. Iron Steel Inst.*, **209**, (1971), p. 49.
- Hillert-M, *Met. Trans.*, **15A**, (1984), p. 411.
- Hillert-M, *Met. Trans. A*, **25A**, (1994), p. 1957.
- Hillert-M, *ISIJ Int.*, **35**, No.9, (1995), p. 1134.
- Holmes-EL et Winegard-WC, *Acta Met.*, **7**, (1959), p. 411.
- Hu-H, *Can. Metall. Q.*, **13**, (1974), p. 275.
- Hultgren-A, *Trans. A.S.M.*, **239**, (1947), p. 915.
- Imwinkelried-T, "Modelling of a Single Crystal Turbine Blade Solidification Process", Thèse EPFL, Lausanne, Suisse, (1993), 211 p.
- Incropera-FP et DeWitt-DP, "Fundamentals of Heat and Mass Transfer", John Wiley & Sons, New York, 4e édition, (1996).
- Inoue-K, Ohmura-E et Ikuta-S, *Trans. of JWRI*, **16**, (1987), p. 49.
- Inoue-K, Ohmura-E et Ikuta-S, *Trans. of JWRI*, **16**, (1987), p. 97.
- Jackson-KA et Hunt-JD, *Trans. of Met. Soc. of AIME*, **236**, (1966), p. 1129.
- Jacot-A et Rappaz-M, *Acta Mat.*, **45**, (1997), p. 575.
- Johnson-WA et Mehl-RF, *Trans. AIME*, **135**, (1939), p. 416.
- Judd-RR et Paxton-HW, *Trans. TMS of AIME*, **242**, (1968), p. 206.
- Juric-D et Tryggvason-G, *J. of Comp. Phys.*, **123**, (1996), p. 127.
- Karlsson-B, *Z. Metall.*, **63**, (1972), p. 161.
- Karlsson-B et Larsson-LE, *Mat. Sci. and Eng.*, **20**, (1975), p. 161.
- Kawasaki-K, *Physica A*, **163**, (1990), p. 59.
- Kermode-JP et Weaire-D, *Comp. Phys. Comm.*, **60**, (1990), p. 75.
- Kirkaldy-JS, *Met. Trans.*, **4**, (1973), p. 2327.

- Koistinen-DP et Marburger-RE, *Acta Met.*, **7**, (1959), p. 59.
- Krauss-G, dans "Materials Science and Technology : a comprehensive treatise", éd. par R.W. Cahn, P. Haasen et E.J. Kramer, Vol. 7, VCH, (1992), p. 20-21.
- Krauss-G et Thompson-SW, *ISIJ International*, **35**, (1995), p. 937.
- Kurtz-SK et Carpay-FMA, *J. Appl. Phys.*, **51**, (1980), p. 5745.
- Kurz-W et Fisher-DJ, "Fundamentals of Solidification", Trans Tech Publications, 3^e édition, (1989).
- Leblond-JB et Devaux-J, *Acta Met.*, **32**, (1984), p.137.
- Leblond-JB, Mottet-G, Devaux-J et Devaux-JC, *Mat. Sci. and Tech.*, **1**, (1985), p. 815.
- Lee-JL et Badeshia-HKDH, *Mat. Sci. Eng.*, **A171**, (1993), p.223.
- Lücke-K, Heckelmann-I et Abbruzzese-G, *Acta Met.*, **40**, (1992), p. 533.
- Lynch-DR, *J. of Comput. Phys.*, **47**, (1982), p. 387.
- Magnin-P et Kurz-W, *Acta Met.*, **35**, (1987), p. 1119.
- Marsh-SP, Masumura-RA et Pande-CS, dans "Modeling of Coarsening and Grain Growth" éd. par S.P. Marsh et C.S. Pande, TMS, (1993), p. 339.
- Massalski-TB et al (éd.), "Binary Alloy Phase Diagram", ASM, Metals Park, Ohio, (1986).
- Maynier-Ph, Dollet-J et Bastien-P, dans "Hardenability Concepts with Applications to Steels" éd. par D.V. Doane et J.S. Kirkaldy, (1978), p. 163.
- Moerdijk-WAJ, *Adv. Mat. Proc.*, **3**, (1990), p.19.
- Murr-LE, "Interfacial Phenomena in Metal and Alloys", Addison-Wesley, Londres, (1975).
- Orlich-J et Rose-A (éd.), "Atlas zur Wärmebehandlung der Stähle", Verlag Stahleise GmbH, Düsseldorf, (1954).
- Pande-CS, *Acta Met.*, **35**, (1987), p. 2671.
- Pande-CS Marsh-SP (éd.), "Modeling of coarsening and grain growth", TMS, (1993).
- Peczak-P, Luton-MJ et Anderson-MP, dans "Modeling of Coarsening and Grain Growth" éd. par S.P. Marsh et C.S. Pande, TMS, (1993), p. 321.
- Pezze-CF et Dunand-DC, *Acta Met.*, **42**, (1994), p. 1509.
- Porter-DA et Easterling-KE, "Phase Transformations in Metals and Alloys", Chapman and Hall, Londres, (1981).
- Puls-MP et Kirkaldy-JS, *Met. Trans.*, **3**, (1972), p. 2777.
- Radhakrishnan-B et Zacharia-T, *Met. Trans. A*, **26A**, (1995a), p. 167.
- Radhakrishnan-B et Zacharia-T, *Met. Trans. A*, **26A**, (1995b), p. 2123.
- Radulescu-MM, "Mesurages magnétiques concernant l'acier 42CrMo4", rapport interne, Université Technique de Cluj-Napoca (RO), (1996).

- Raghavan-V et Cohen-M, *Acta Met.*, **20**, (1972), p. 333, p. 779.
- Rappaz-J et Swierkosz-M, *Appl. Math. and Comp. Sci.*, **5**, No.3, (1995), p. 1.
- Rappaz-M, *Int. Mat. Reviews*, **34**, (1989), p. 93.
- Rappaz-M, Desbiolles-JL, Drezet-JM, Gandin-CA, Jacot-A et Thévoz-P, dans "Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes VII" éd. par M. Cross et J. Campbell, TMS, (1995), p. 449.
- Rappaz-M, Bellet-M et Deville-M, chapitre 5 de "Modélisation en Science et Technologie des Matériaux", "Traité des Matériaux", vol. 10, PPUR, (1998), à paraître.
- Reed-RC et Bhadeshia-HKDH, *Acta Met.*, **42**, (1994), p. 3663.
- Reynolds-WT, Li-FZ, Shui-CK et Aaronson-HI, *Met. Trans.*, **21A**, (1990), p. 1433.
- Reynolds-WT, Aaronson-HI et Spanos-G, *Mat. Trans. JIM*, **32**, No.8, (1991), p. 737.
- Rhines-FN, Craig-R et DeHoff-R, *Met. Trans.*, **5**, (1974), p. 413.
- Roberts-GA et Mehl-RF, *Trans. of the A.S.M.*, **31**, No.9, (1943), p. 613.
- Rollet-AD, Srolovitz-DJ et Anderson-MP, *Acta Met.*, **37**, (1989), p. 1227.
- Rollett-AD, Srolovitz-DJ, Doherty-RD, Anderson-MP et Grest-GS, dans "Simulation and Theory of Evolving Microstructures" éd. par M.P. Anderson et A.D. Rollet, TMS, (1990).
- Rollett-AD, Luton-MJ et Srolovitz-DJ, *Acta Met.*, **40**, (1992), p. 42.
- Rose-A et Strassburg-W, *Stahl und Eisen*, **76**, (1956), p. 976.
- Samuels-LE, "Optical Micrography of Carbon Steels", American Society for Metals, Metals Park, OH, USA, (1980).
- Scheil-E, *Arch. Eisenhütt.*, **8**, (1935), p. 565.
- Shiflet-GJ et Aaronson-HI, *Met. Trans.*, **21A**, (1990), p. 1413.
- Siegel-R et Howell-JR, "Thermal Radiation Heat Transfer", Hemisphere Publishing Corporation, New York, (1982), p. 306-318.
- Silalahi-VMM, Onink-M et van der Zwaag-S, *Steel Research*, **66**, (1995), p. 482.
- Smith-CS, *Trans. Am. Soc. Met.*, **45**, (1952), p. 533.
- Smithells Metals Reference Book, 6e éd., Butterworths, (1983), p. 13-58.
- Soares-A, Ferro-AC et Fortes-MA, *Scripta Met.*, **19**, (1985), p.1491.
- Spanos-G, Masumura-RA, Vandermeer-RA et Enomoto-M, *Acta Met.*, **42**, (1994), p. 4165.
- Speich-GR et Szirmae-A, *Trans. of TMS of AIME*, **245**, (1969), p. 1063.
- Srolovitz-DJ, Anderson-MP, Sahni-PS et Grest-GS, *Acta Met.*, **32**, (1984a), p. 793.
- Srolovitz-DJ, Anderson-MP, Grest-GS et Sahni-PS, *Acta Met.*, **32**, (1984b), p. 1429.
- Srolovitz-DJ, Grest-GS et Anderson-MP, *Acta Met.*, **33**, (1985), p. 2233.

- Stark-I, Smith-GDW et Bhadeshia-HKDH, *Met. Trans.*, **21A**, (1990), p. 837.
- Suehiro-M, Yada-H, Sato-K et Senuma-T, dans "Simulation and Theory of Evolving Microstructures" éd. par M.P. Anderson et A.D. Rollet, TMS, (1990), p. 189.
- Sundman-B, Jansson-B et Andersson-JO, "The Thermo-Calc Databank System", *Calphad* **9**, (1985), p. 153.
- Surovtsev-AP et Yarovoi-VV, *Metal Science and Heat Treatment*, No.9, (1984), p. 649.
- Thévoz-Ph, Desbiolles-JL et Rappaz-M, *Met. Trans. A*, **20A**, (1989), p. 311.
- Thévoz-Ph, Rappaz-M et Desbiolles-JL, *Light Metals*, éd. par C.M. Bickert, TMS, (1990), p. 975.
- Totten-GE, Bates-CE et Clinton-NA, "Handbook of Quenchants and Quenching Technology", ASM International, (1993).
- Umemoto-M, Komatsubara-N et Tamura-I, dans "Solid solid phase transformations", Pittsburgh, (1981), p.1111.
- Umemoto-M, Horiuchi-K et Tamura-I, *Trans. ISIJ*, **23**, (1983), p. 690.
- Umemoto-M, Hiramatsu-A, Moriya-A, Watanabe-T, Nanba-S, Nakajima-N, Anan-G et Higo-Y, *ISIJ Int.*, **32**, (1992), p. 306.
- Warren-JA et Boettinger-WJ, *Acta Met.*, **43**, (1995), p. 689.
- Weaire-D, Bolton-F, Molho-P et Glazier-JA, *J. Phys. : Condens. Matter*, **3**, (1991), p. 2101.
- Wert-C, *Phys. Rev.*, **79**, (1950), p. 601.
- Wilson-EA, *ISIJ International*, **34**, (1994), p. 615.
- Xue-X, Liebling-TM et Mocellin-A, *Materials Science Forum*, **204-206**, (1996), p. 331.
- Yoshinaga-H, Watanabe-T et Takahashi-N (éd.), "Grain Growth in Polycrystalline Materials II", *Materials Science Forum*, 204-206, Transtec Publications (1996).
- Zener-C, *AIME Trans.*, **167**, (1947), p. 550.

7. ANNEXES

7.1 Comparaison des règles d'additivité

Il est possible d'établir une condition d'équivalence entre la règle d'additivité de Umemoto (1983) donnée par la relation 2.16 :

$$f = 1 - \exp \left\{ - \left[\int_0^t b(T(t'))^{1/n} dt' \right]^n \right\} \quad 7.1.1$$

et la méthode du temps fictif basé sur la formulation suivante (éq. 2.17 et 2.18) :

$$t_i^* = \left[\frac{1}{b(T_i)} \text{Ln} \left(\frac{1}{1 - f_{i-1}} \right) \right]^{1/n} \quad 7.1.2$$

$$f_i = 1 - \exp \left(-b(T_i) \cdot (t_i^* + \Delta t)^n \right). \quad 7.1.3$$

En effet, en posant :

$$F_i = \text{Ln} \left(\frac{1}{1 - f_i} \right), \quad 7.1.4$$

les équations 7.1.2 et 7.1.3 deviennent :

$$t_i^* = \left(\frac{1}{b_i} F_{i-1} \right)^{1/n} \quad \text{et} \quad 7.1.5$$

$$F_i = b_i (t_i^* + \Delta t)^n \quad 7.1.6$$

En substituant t_i^* donné par (7.1.5) dans (7.1.6), on peut calculer la dérivée de F par rapport au temps à l'aide d'un passage à la limite et du théorème de l'Hospital :

$$\begin{aligned} \frac{dF}{dt} &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{F_i - F_{i-1}}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{b_i \left(\left(\frac{1}{b_i} F_{i-1} \right)^{1/n} + \Delta t \right)^n - F_{i-1}}{\Delta t} = \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\frac{d}{d(\Delta t)} \left[b_i \left(\left(\frac{1}{b_i} F_{i-1} \right)^{1/n} + \Delta t \right)^n \right]}{\frac{d}{d(\Delta t)} [\Delta t]} = \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} b_i n \left[\left(\frac{F_{i-1}}{b_i} \right)^{\frac{1}{n}} + \Delta t \right]^{n-1} = b_i n \left[\frac{F_{i-1}}{b_i} \right]^{\frac{n-1}{n}} \end{aligned} \quad 7.1.7$$

On obtient alors l'équation différentielle suivante :

$$F^{\frac{1-n}{n}} dF = n b^{\frac{1}{n}} dt \quad 7.1.8$$

En prenant n constant et en intégrant, (7.1.8) devient :

$$F^{\frac{1}{n}} = \int_0^t b(T(t'))^{1/n} dt \quad 7.1.9$$

et finalement, en remplaçant F par $\text{Ln} \left(\frac{1}{1-f} \right)$, on obtient :

$$f = 1 - \exp \left\{ - \left[\int_0^t b(T(t'))^{1/n} dt' \right]^n \right\} \quad 7.1.10$$

On retrouve ainsi l'équation 7.1.1. Les deux règles d'additivité sont donc équivalentes lorsque n est constant.

On peut monter également que le modèle de Leblond (éq. 2.19) :

$$\dot{f} = \frac{f_{\text{eq}}(T) - f}{\tau(T)} \quad 7.1.11$$

est équivalent à la règle d'additivité, si l'on impose $n = 1$. La différenciation de (7.1.4) donne :

$$dF = \frac{1}{1-f} df \quad 7.1.12$$

En substituant (7.1.12) dans (7.1.8), on obtient :

$$\frac{df}{dt} = (1-f) \left[\text{Ln} \left(\frac{1}{1-f} \right) \right]^{\frac{n-1}{n}} n b^{\frac{1}{n}} \quad 7.1.13$$

Avec $n = 1$, on a :

$$\frac{df}{dt} = (1-f) b \quad 7.1.14$$

qui est équivalent à l'équation 7.1.11 si l'on considère que $\tau = 1/b$ et que la transformation peut être complète ($f_{\text{eq}} = 1$).

7.2 Formule empirique donnant le coefficient de transfert de la douche de trempe au défilé

Le coefficient de transfert de la douche, h (en $W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$) peut être exprimé en fonction de la température de surface, T (en $^{\circ}C$), de la concentration d'adjuvant, c (en %pds d'Aquaquench) et du débit, D (en l/min) par la relation empirique suivante :

$$h(T,c,D) = \begin{cases} h_1(T,c,D) & \text{Si } T \geq T_{max} \\ h_1(T_{max},c,D) + \frac{T-T_{eau}}{T_{max}-T_{eau}} (h_1(T_{max},c,D) - h_0(c,D)) & \text{Si } T_{eau} < T < T_{max} \end{cases} \quad 7.2.1$$

avec les fonctions :

$$h_1(T,c,D) = \left(\frac{D}{45}\right)^{1/4} \left((28311 - 2204 c + 57.2 c^2) + T (-11.75 + 0.841 c - 0.023 c^2) \right) \quad 7.2.2$$

et ,

$$h_0(c,D) = \left(\frac{D}{45}\right)^{1/4} (2990 - 89.98 c + 2.0255 c^2) \quad 7.2.3$$

T_{eau} est la température du liquide de refroidissement et T_{max} la température où le coefficient de transfert atteint son maximum (estimé à $150^{\circ}C$). Une représentation graphique de la fonction est présentée à la figure 7.2.1.

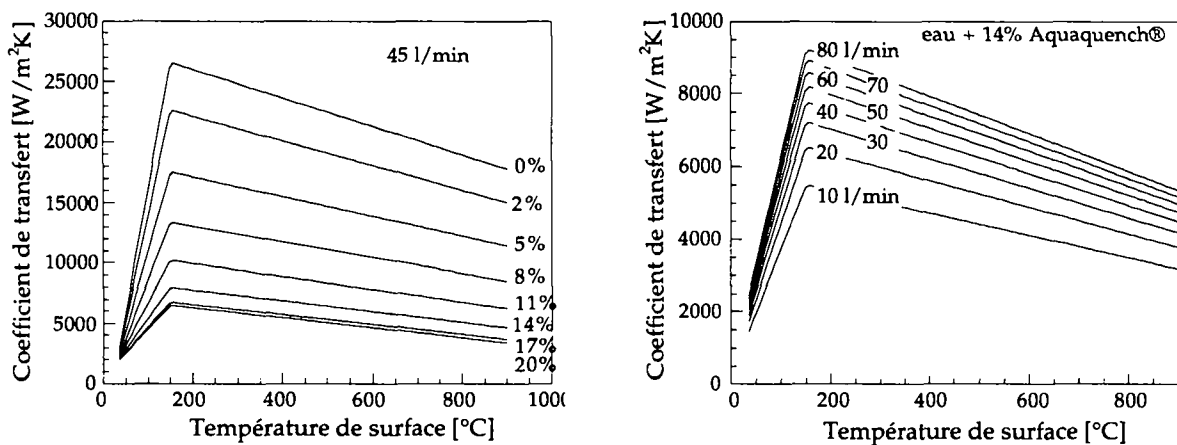


Fig. 7.2.1 : Représentation de la formule 7.2.1 donnant le coefficient de transfert à la surface d'une pièce douchée en fonction de la température de surface, de la concentration d'adjuvant (à gauche) et du débit d'aspersion (à droite).

7.3 Données numériques de la modélisation du traitement thermique par induction

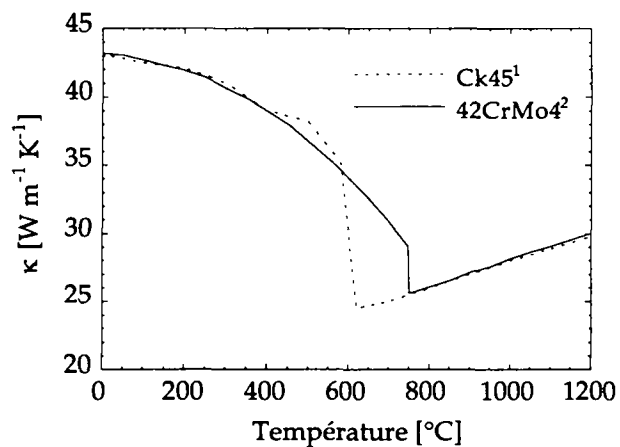
7.3.1 Propriétés physiques des aciers Ck45 et 42CrMo4

Conductibilité thermique

Fig. 7.3.1 : Conductibilité thermique des aciers Ck45 et 42CrMo4.

1 (Smithells, 1983)

2 (Farias, 1991)

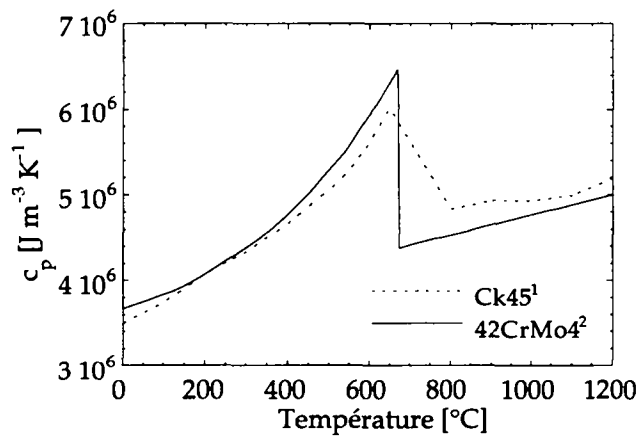


Chaleur spécifique

Fig. 7.3.2 : Chaleur spécifique volumique des aciers Ck45 et 42CrMo4.

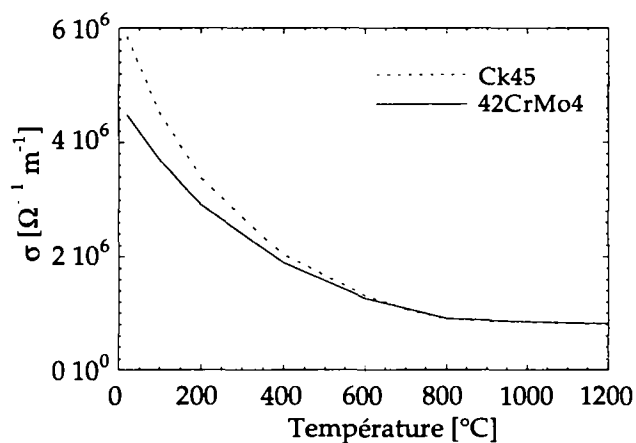
1 (Smithells, 1983)

2 (Farias, 1991)



Conductivité électrique

Fig. 7.3.3 : Conductivité électrique des aciers Ck45 et 42CrMo4. D'après (ASM, 1990).



Perméabilité magnétique

Dans le modèle d'induction, la perméabilité magnétique, μ , est estimée en fonction de la température et de l'intensité du champ magnétique local H . L'expression suivante est utilisée :

$$\mu(T,H) = \mu_0 (1 + \chi_T \chi_H) \quad 7.3.1$$

où $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ V}\cdot\text{s}\cdot\text{A}^{-1}\cdot\text{m}^{-1}$ est la perméabilité magnétique du vide et χ_T et χ_H sont des fonctions tabulées respectivement en fonction de la température et du champ magnétique (v. Fig. 7.3.4).

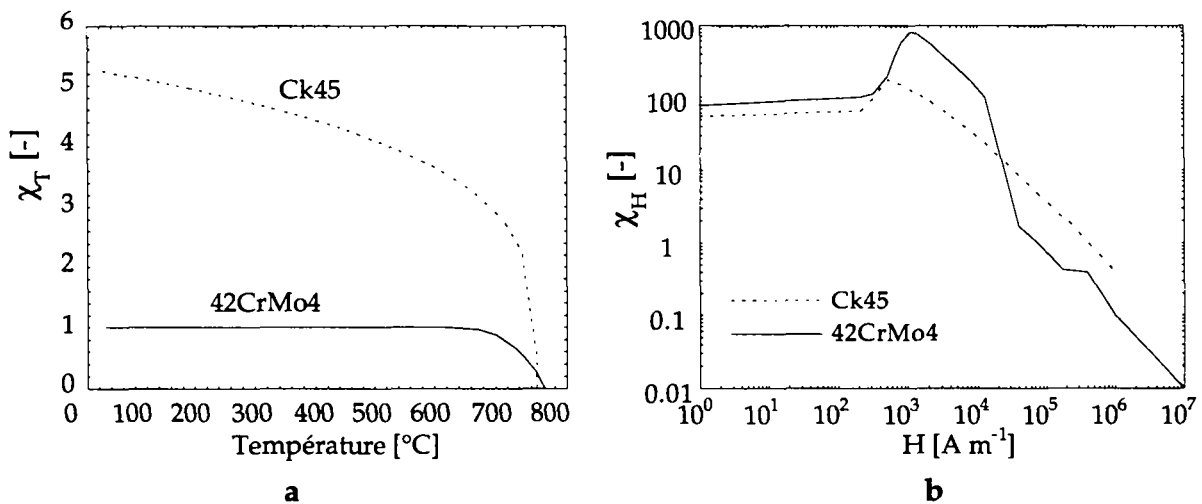


Fig. 7.3.4 : Fonctions χ_T et χ_H utilisées pour calculer la perméabilité magnétique des aciers Ck45 et 42CrMo4. D'après les résultats du paragraphe 3.3.1 et (Radulescu, 1996).

7.3.2 Transformations de phase dans les aciers Ck45 et 42CrMo4

Les transformations de phase considérées dans la modélisation du traitement thermique par induction sont données dans les tableaux 7.3.1 (42CrMo4) et 7.3.2 (Ck45). Les colonnes contiennent les informations suivantes : la liste des réactions avec les coefficients r et p correspondant (v. éq. 3.17), la méthode utilisée pour convertir la variable d'avancement z en nouvelles fractions de phase, la condition de germination (domaine de température), l'enthalpie de transformation et la méthode de détermination de l'exposant n de la relation d'Avrami (v. éq. 3.29).

Les données cinétiques sont fournies sous la forme de diagrammes TTT et TTA isothermes (Fig. 7.3.5 et 7.3.7). Les fractions maximales, f_{\max} , (v. éq. 3.19) et les duretés des phases en fonction de leur température de formation sont présentées aux figures 7.3.6 et 7.3.8.

Acier 42CrMo4

Phases considérées :

austénite (A), ferrite (F), perlite (P), bainite (B) et martensite (M).

Réactions	Equations de conversion de l'avancement	Domaine de température	Enthalpie de transformation ¹ Δh [J/m ³]	Exposant n
Refroidissement				
A \rightarrow F	3.23 et 3.24	600°C < T < 770°C	-6·10 ⁸	3
A \rightarrow P	3.23 et 3.24	600°C < T < 726°C	-6·10 ⁸	3
A \rightarrow B	3.23 et 3.24	300°C < T < 600°C	-2.4·10 ⁸	éq. 3.29
A \rightarrow M	3.23 et 3.24	-100°C < T < 360°C	-6·10 ⁸	éq. 3.29
Chauffage				
10M \rightarrow 4F + 6P	3.27 et 3.28	600°C < T < 727°C	0	3
1F + 10P \rightarrow A	3.27 et 3.28	727°C < T < 1500°C	6·10 ⁸	3
M \rightarrow A	3.23 et 3.24	727°C < T < 1500°C	6·10 ⁸	3
B \rightarrow A	3.23 et 3.24	727°C < T < 1500°C	2.4·10 ⁸	3

¹ (Fernandes, 1985)

Tableau 7.3.1 : Transformations de phase considérées dans la modélisation du traitement thermique de l'acier 42CrMo4.

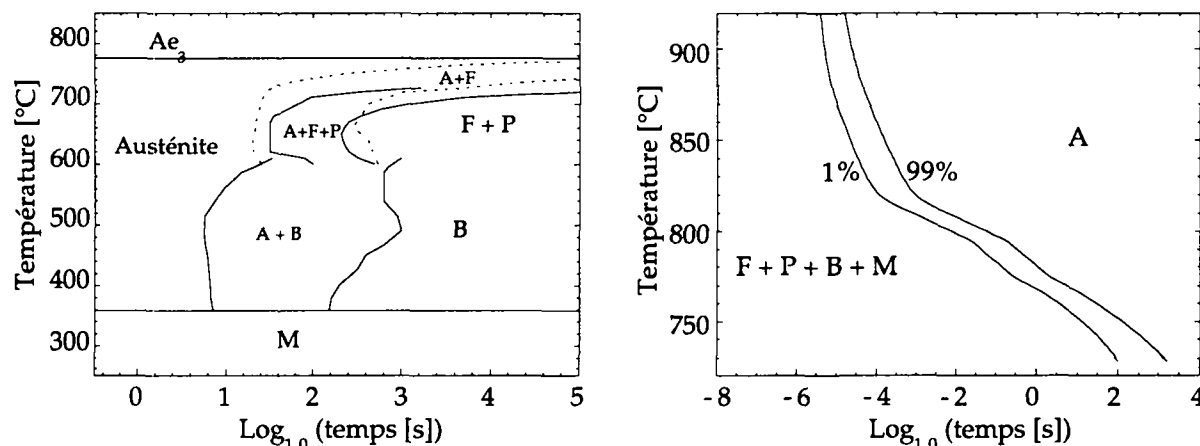


Fig. 7.3.5 : Diagrammes TTT et TTA de l'acier 42CrMo4. D'après (Boyer, 1977) et (Orlich, 1954).

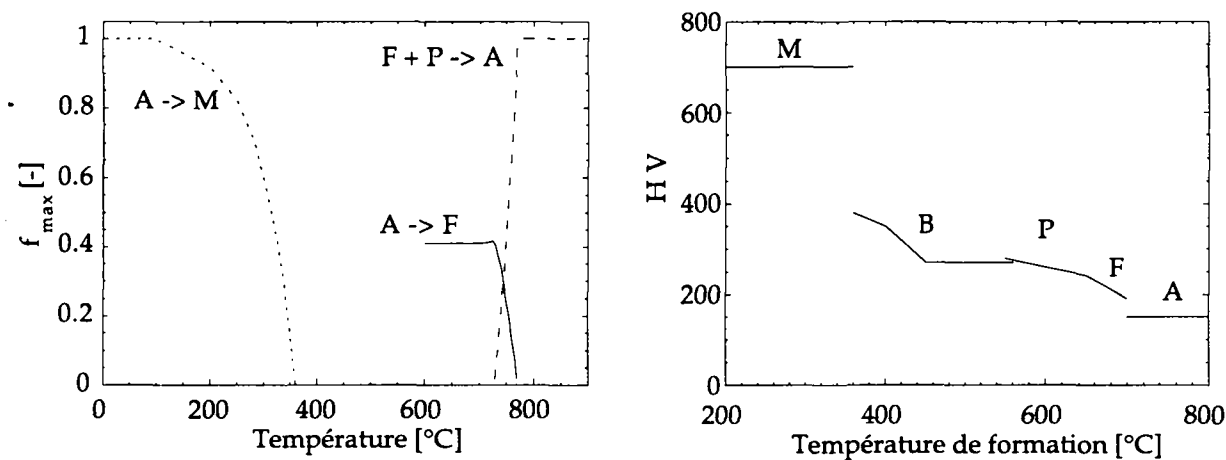


Fig. 7.3.6 : Fractions transformées maximales et dureté Vickers des phases en fonction de la température de transformation dans l'acier 42CrMo4.

Acier Ck45

Phases considérées :

austénite homogène en carbone (A_h), austénite pauvre en carbone (A_p), austénite riche en carbone (A_r), ferrite (F), perlite (P), martensite homogène (M_h) et martensite hétérogène (M_v).

Transformations de phase	Equations de conversion de l'avancement	Domaine de température	Enthalpie de transformation ¹ Δh [J/m ³]	Exposant n
Refroidissement				
$1A_r + 10^2A_h + 10^4A_p \rightarrow F$	3.27 et 3.28	$489^\circ\text{C} < T < 770^\circ\text{C}$	$-6 \cdot 10^8$	3
$1A_p + 10^2A_h + 10^4A_r \rightarrow P$	3.27 et 3.28	$(489^\circ\text{C} < T < 727^\circ\text{C}$ et $z_{A \rightarrow F} > 0.9)$ ou $345^\circ\text{C} < T < 489^\circ\text{C}$	$-6 \cdot 10^8$	2
$A_h \rightarrow M_h$	3.23 et 3.24	$-100^\circ\text{C} < T < 345^\circ\text{C}$	$-6 \cdot 10^8$	éq. 3.29
$1A_r + 1A_p \rightarrow M_v$	3.27 et 3.28	$-100^\circ\text{C} < T < 345^\circ\text{C}$	$-6 \cdot 10^8$	éq. 3.29
Chauffage				
$1M_h + 1M_v \rightarrow 36F + 64P$	3.27 et 3.28	$352^\circ\text{C} < T < 727^\circ\text{C}$	0	3
$M_h \rightarrow A_h$	3.27 et 3.28	$727^\circ\text{C} < T < 1500^\circ\text{C}$	$6 \cdot 10^8$	3
$M_v \rightarrow 36A_p + 64A_r$	3.27 et 3.28	$727^\circ\text{C} < T < 1500^\circ\text{C}$	$6 \cdot 10^8$	3
$P \rightarrow A_r$	3.23 et 3.24	$727^\circ\text{C} < T < 1500^\circ\text{C}$	$6 \cdot 10^8$	3
$F \rightarrow A_p$	3.23 et 3.24	$727^\circ\text{C} < T < 1500^\circ\text{C}$	$6 \cdot 10^8$	3
$1A_p + 1A_r \rightarrow 2A_h$	3.27 et 3.28	$500^\circ\text{C} < T < 1500^\circ\text{C}$	0	1

¹ (Fernandes, 1985)

Tableau 7.3.2 : Transformations de phase considérées dans la modélisation du traitement thermique de l'acier Ck45.

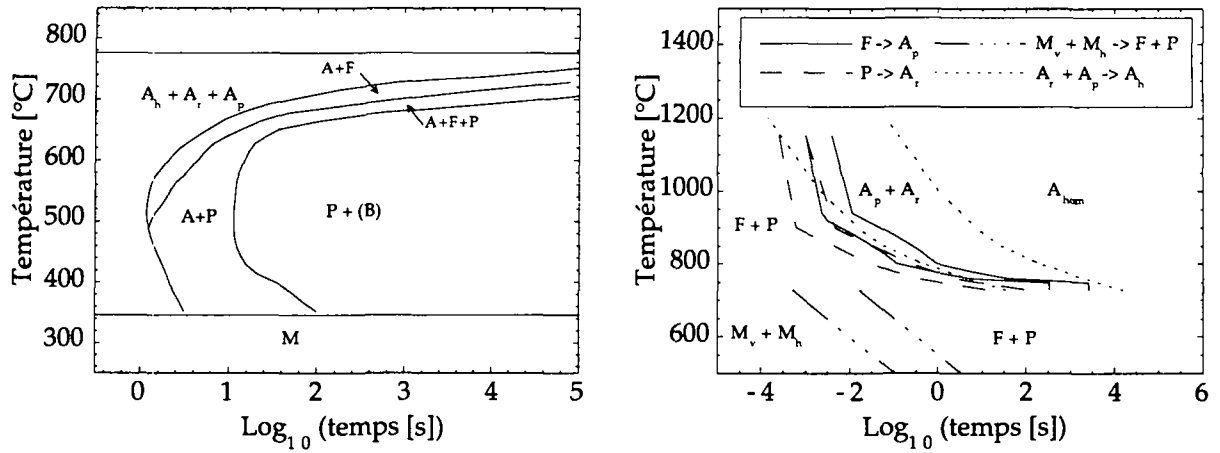


Fig. 7.3.7 : Diagrammes TTT et TTA de l'acier Ck45 utilisés dans la simulation. D'après les résultats de la section 3.3.2, (Boyer, 1977) et (Orlich, 1954).

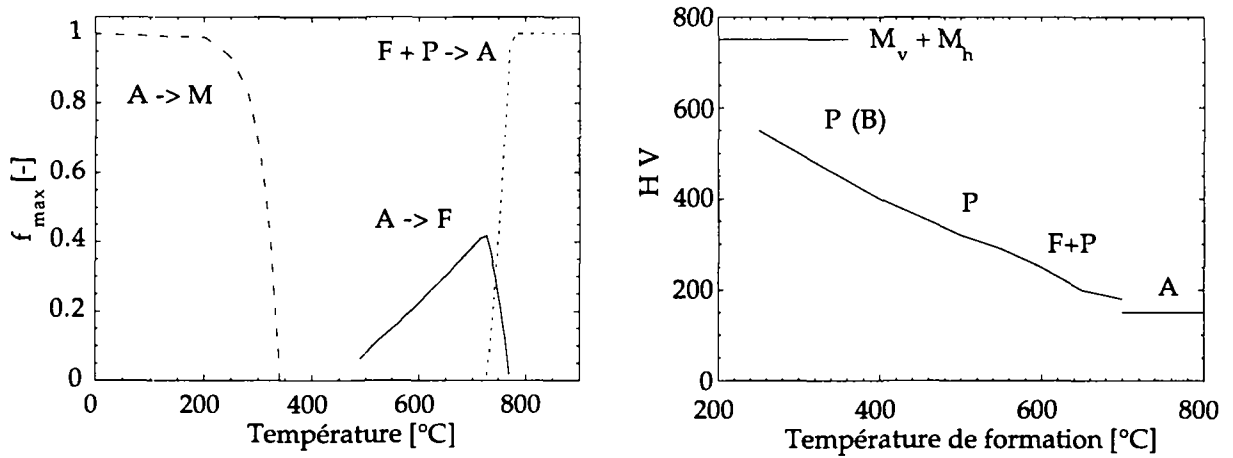


Fig. 7.3.8 : Fractions transformées maximales et dureté Vickers des phases en fonction de la température de transformation dans l'acier Ck45.

7.3.4 Paramètres des calculs

Le tableau 7.3.3 contient les paramètres utilisés pour les 3 calculs de traitement thermique par induction présentés aux sections 3.4, 3.5 et 3.6.

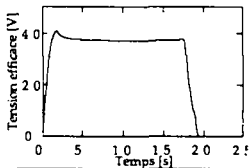
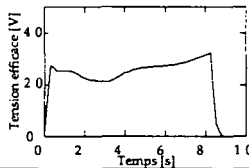
		Chauffage au défilé (section 3.4)	Trempe au défilé d'une pièce cylindrique (section 3.5)	Trempe au défilé d'une pièce non cylindrique (section 3.6)
Maillage	illustration	Fig. 3.15	Fig. 3.17	Fig. 3.22
	nombre de noeuds	8378	5781	3517
	nombre d'éléments	16316	11076	6667
	épaisseur des éléments en surface	20 μm	10 μm	30 μm
Induction	fréquence	10 kHz	700 kHz	8.2 kHz
	tension efficace		25 V	
	coefficient de perte	0.91	1.0	0.89
Douche	débit	-	45 l/min	45 l/min
	liquide de trempe	-	eau	eau + 14% Aquaquench
	coefficient de transfert	-	courbe 0% de la figure 3.7 (a)	courbe 14% de la figure 3.7 (a)
Vitesse de tirage		5 mm/s	4 mm/s	6.7 mm/s
Matériaux	pièce	Ck45	Ck45	42CrMo4
	inducteur	cuiivre	cuiivre	cuiivre
Discrétisation en pas de temps	nombre de pas de temps	600	700	760
	temps total	80 s	21 s	29 s
Temps CPU (HP 735)		7 h	5 h	3 h 30

Tableau 7.3.3 : Paramètres utilisés pour la simulation du traitement thermique par induction.

7.4 Solution analytique approximative de l'équation de diffusion stationnaire appliquée au cas de la dissolution de la perlite (modèle de Speich (1969))

L'équation de diffusion stationnaire pour un référentiel en translation selon x est la suivante :

$$\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \frac{v}{D} \frac{\partial c}{\partial x} = 0 \quad 7.4.1$$

où c est la concentration, D le coefficient de diffusion et v la vitesse de translation du référentiel. Avec les conditions de symétrie en $y=0$ et $y=\lambda/2$ (c.f. Fig. 7.4.1), la solution générale est de la forme :

$$c = A_0 + \sum_{n=0}^{\infty} K_n \exp(a_n x) \cos(b_n y) \quad 7.4.2$$

avec les conditions :

$$a_n = \frac{1}{2} \left(\frac{v}{D} \pm \sqrt{\left(\frac{v}{D}\right)^2 + 4 b_n^2} \right) \quad \text{et} \quad 7.4.3$$

$$b_n = \frac{2\pi \cdot n}{\lambda} \quad 7.4.4$$

La contrainte physique :

$$\lim_{x \rightarrow \infty} c = c_0 \quad 7.4.5$$

où c_0 est la concentration nominale, conduit aux relations suivantes :

$$a_n = \left(-\frac{v}{2D} + \sqrt{\left(\frac{v}{2D}\right)^2 + \left(\frac{4\pi \cdot n}{\lambda}\right)^2} \right) \quad 7.4.6$$

$$A_0 = c_0 \quad 7.4.7$$

En considérant les deux premiers termes de la série uniquement, on obtient :

$$c = c_0 + K_1 \exp(a_1 x) \cos(b_1 y) + K_2 \exp(a_2 x) \cos(b_2 y) \quad 7.4.8$$

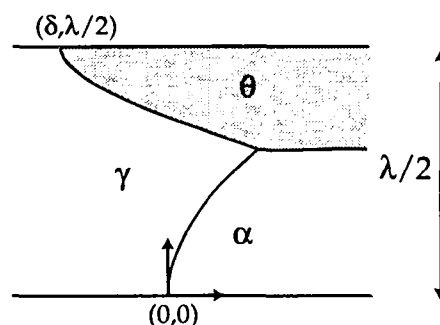


Fig. 7.4.1 : Représentation de la géométrie et du repère considérés dans le modèle.

En supposant que la dissolution a lieu à vitesse modérée, c'est-à-dire :

$$\frac{v\lambda}{4\pi D} \ll 1 \quad 7.4.9$$

l'équation (7.4.6) se réduit à :

$$a_n \cong b_n = \frac{2\pi \cdot n}{\lambda} \quad 7.4.10$$

On considère donc que

$$a_1 = b_1 = \frac{2\pi}{\lambda} \quad 7.4.11$$

$$a_2 = b_2 = \frac{4\pi}{\lambda} \quad 7.4.12$$

Au sommet de la lamelle de α (origine du repère), on peut écrire :

$$c_{\gamma/\alpha}^* = c_0 + K_1 + K_2 \quad 7.4.13$$

où $c_{\gamma/\alpha}^*$ est la concentration dans l'austénite à l'interface γ/α donnée par le diagramme de phase. Le bilan de soluté effectué au même point donne :

$$-\frac{v}{D} = \frac{a_1 K_1 + a_2 K_2}{c_{\gamma/\alpha}^* - c_\alpha^*} \quad 7.4.14$$

où c_α^* est la concentration de la ferrite. On peut écrire deux relations similaires pour le point situé au sommet de la lamelle θ (coordonnées $(\delta, \lambda/2)$) :

$$c_{\gamma/\theta}^* = c_0 - K_1 \exp(a_1 \delta) + K_2 \exp(a_2 \delta) \quad 7.4.15$$

et

$$\frac{v}{D} = \frac{a_2 K_2 \exp(a_2 \delta) - a_1 K_1 \exp(a_1 \delta)}{c_\theta^* - c_{\gamma/\theta}^*} \quad 7.4.16$$

où $c_{\gamma/\theta}^*$ et c_θ^* désignent la concentration à l'interface γ/θ dans l'austénite et dans la cémentite respectivement.

Pour une température fixée ($c_{\gamma/\alpha}^*$, $c_{\gamma/\theta}^*$, c_α^* et c_θ^* connus), les équations (7.4.13) à (7.4.16) forment un système de 4 équations à 4 inconnues dont la résolution fournit K_1 , K_2 , v et δ . La résolution est basée sur le développement suivant. En considérant

$$a_2 = 2 a_1 \quad 7.4.17$$

et en remplaçant (7.4.13) dans (7.4.14), on obtient :

$$-\frac{v}{D} = a_1 \frac{K_1 + 2(c_{\gamma/\alpha}^* - c_0 - K_1)}{c_{\gamma/\alpha}^* - c_\alpha^*} \quad 7.4.18$$

De même, en posant

$$\varepsilon = \exp(a_1 \delta) \quad 7.4.19$$

on tire, de (7.4.15) et (7.4.16),

$$c_{\gamma/\theta}^* - c_0 = (c_{\gamma/\alpha}^* - c_0 - K_1) \varepsilon^2 - K_1 \varepsilon \quad 7.4.20$$

$$\frac{v}{D} = a_1 \frac{2(c_{\gamma/\alpha}^* - c_0 - K_1) \varepsilon^2 - K_1 \varepsilon}{c_{\theta}^* - c_{\gamma/\theta}^*} \quad 7.4.21$$

De (7.4.18) et (7.4.21), on déduit :

$$\frac{2(c_{\gamma/\alpha}^* - c_0 - K_1) \varepsilon^2 - K_1 \varepsilon}{c_{\theta}^* - c_{\gamma/\theta}^*} = \frac{K_1 - 2 c_{\gamma/\alpha}^* + 2 c_0}{c_{\gamma/\alpha}^* - c_{\alpha}^*} \quad 7.4.22$$

En posant

$$r = \frac{c_{\theta}^* - c_{\gamma/\theta}^*}{c_{\gamma/\alpha}^* - c_{\alpha}^*} \quad 7.4.23$$

On aboutit à :

$$2(c_{\gamma/\alpha}^* - c_0) \varepsilon^2 - 2 K_1 \varepsilon^2 - K_1 \varepsilon = r K_1 - 2 r (c_{\gamma/\alpha}^* - c_0) \quad 7.4.24$$

De (7.4.24), on tire :

$$K_1 = \frac{2 (c_{\gamma/\alpha}^* - c_0) (\varepsilon^2 + r)}{2\varepsilon^2 + \varepsilon + r} \quad 7.4.25$$

En reprenant (7.4.20) :

$$c_{\gamma/\theta}^* - c_0 = (c_{\gamma/\alpha}^* - c_0) \varepsilon^2 - (\varepsilon^2 - \varepsilon) K_1 \quad 7.4.26$$

et en posant

$$r_2 = \frac{c_{\gamma/\theta}^* - c_0}{c_{\gamma/\alpha}^* - c_0} \quad 7.4.27$$

on obtient finalement :

$$r_2 = \varepsilon^2 - (\varepsilon^2 + \varepsilon) \frac{2 (\varepsilon^2 + r)}{r + \varepsilon + 2 \varepsilon^2} \quad 7.4.28$$

Le groupement des termes conduit à une équation de 3^e degré en ε :

$$\varepsilon^3 + (2r_2 + r) \varepsilon^2 + (r_2 + 2r) \varepsilon + r_2 r = 0 \quad 7.4.28$$

La résolution de cette équation permet de déterminer ε , puis K_1 à l'aide de (7.4.25) et enfin K_2 et v avec respectivement (7.4.13) et (7.4.14).

7.5 Modèle de différences finies 1D

Le modèle de différences finies développé ici est basé sur une procédure similaire à celle de Karlsson (1975). Le maillage est composé de M noeuds dans le domaine α ($0 \leq x \leq s(t)$) et de $(N-M)$ noeuds dans le domaine γ ($s(t) \leq x \leq L$). Les espacements sont uniformes à l'intérieur des domaines, mais varient dans le temps. Le noeud M coïncide en effet avec la position de l'interface, si bien que les maillages sont déformés au cours du déplacement de celle-ci. La résolution de l'équation de diffusion dans les deux phases est effectuée sur les domaines fixes $\varepsilon \in [0;1]$ et $\delta \in [0;1]$ obtenus par une transformation mathématique à partir des domaines variables $x \in [0;s(t)]$ et $x \in [s(t);L]$:

$$\varepsilon = \frac{x}{s(t)} \quad \text{et} \quad \delta = \frac{x - s(t)}{L - s(t)} \quad 7.5.1$$

Dans la phase α , la transformation du champ de concentration $c_\alpha[x(\varepsilon,t),t]$ en $c_\alpha[x(\varepsilon,t),t]$ fait apparaître les dérivées partielles suivantes :

$$\left[\frac{\partial c_\alpha}{\partial x} \right]_t = \left[\frac{\partial c_\alpha}{\partial \varepsilon} \right]_t \cdot \left[\frac{\partial \varepsilon}{\partial x} \right]_t = \frac{1}{s(t)} \left[\frac{\partial c_\alpha}{\partial \varepsilon} \right]_t \quad 7.5.2$$

$$\left[\frac{\partial c_\alpha}{\partial t} \right]_\varepsilon = \left[\frac{\partial c_\alpha}{\partial t} \right]_x + \left[\frac{\partial c_\alpha}{\partial x} \right]_t \cdot \left[\frac{\partial x}{\partial t} \right]_\varepsilon = \left[\frac{\partial c_\alpha}{\partial t} \right]_x + \frac{\varepsilon}{s} \frac{ds}{dt} \left[\frac{\partial c_\alpha}{\partial \varepsilon} \right]_t \quad 7.5.3$$

L'introduction des équations 7.5.2 et 7.5.3 dans 4.28 donne pour la phase α :

$$\frac{\partial c_\alpha}{\partial t} = \frac{\varepsilon}{s} v \frac{\partial c_\alpha}{\partial \varepsilon} + \frac{m}{\varepsilon s^2} D_\alpha \frac{\partial c_\alpha}{\partial \varepsilon} + \frac{1}{s^2} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left[D_\alpha \frac{\partial c_\alpha}{\partial \varepsilon} \right] \quad 7.5.4$$

où la vitesse de l'interface est désignée par $v = \frac{ds}{dt}$. Une relation similaire peut être dérivée pour la phase γ :

$$\frac{\partial c_\gamma}{\partial t} = \frac{1 - \delta}{L - s} v \frac{\partial c_\gamma}{\partial \delta} + \frac{m D_\gamma}{[(L - s) \delta + s] (L - s)} \frac{\partial c_\gamma}{\partial \delta} + \frac{1}{(L - s)^2} \frac{\partial}{\partial \delta} \left[D_\gamma \frac{\partial c_\gamma}{\partial \delta} \right]. \quad 7.5.5$$

Introduisons la variable A_i^j représentant le coefficient de diffusion moyen au pas de temps j pour la maille située entre les noeuds i et $i-1$. Elle est donnée par la relation suivante :

$$A_i^j = \frac{D_i^j + D_{i-1}^j}{2}. \quad 7.5.6$$

où $D_i^j = D_v(c_i^j, T_j)$ est le coefficient de diffusion au noeud i et au pas de temps j estimé d'après la concentration nodale c_i^j , la température T_j et la phase v .

En utilisant les variables (ε, t) et (γ, t) pour les domaines Ω_α et Ω_γ , une discrétisation implicite des équations de conservation du soluté mène aux relations suivantes :

Noeuds i avec $2 \leq i \leq M-2$ (phase α , éq. 7.5.4) :

$$\frac{c_i^j - c_i^{j-1}}{\Delta t} = \left[\frac{\varepsilon_i}{s} v + \frac{m \cdot D_i^{j-1}}{\varepsilon_i s^2} \right] \frac{c_{i+1}^j - c_{i-1}^j}{2 \Delta \varepsilon} + \frac{1}{s^2 \Delta \varepsilon} \left[A_{i+1}^{j-1} \frac{c_{i+1}^j - c_i^j}{\Delta \varepsilon} - A_i^{j-1} \frac{c_i^j - c_{i-1}^j}{\Delta \varepsilon} \right], \quad 7.5.7$$

Noeuds i avec $M+1 \leq i \leq N-1$ (phase γ , éq. 7.5.5) :

$$\frac{c_i^j - c_i^{j-1}}{\Delta t} = \left[\frac{1 - \delta_i}{L - s} v + \frac{m \cdot D_i^{j-1}}{(L - s) [(L - s) \cdot \delta_i + s]} \right] \frac{c_{i+1}^j - c_{i-1}^j}{2\Delta\delta} + \frac{1}{(L - s)^2 \Delta\delta} \left[A_{i+1}^{j-1} \frac{c_{i+1}^j - c_i^j}{\Delta\delta} - A_i^{j-1} \frac{c_i^j - c_{i-1}^j}{\Delta\delta} \right] \quad 7.5.8$$

Noeud M (condition à l'interface α/γ , éq. 4.29) :

$$v (k - 1) c_M^j = \frac{A_{M+1}^{j-1}}{L - s} \frac{c_{M+1}^j - c_M^j}{\Delta\delta} - \frac{A_M^{j-1}}{s} \frac{k c_M^j - c_{M-1}^j}{\Delta\epsilon} \quad 7.5.9$$

La concentration c_M^j correspond à la concentration c_γ^* à l'interface dans la phase γ . La concentration c_α^* est donnée par $k \cdot c_M^j$ où k est le coefficient de partage ($k = c_\alpha^*/c_\gamma^*$).

Noeud $M-1$:

$$\frac{c_{M-1}^j - c_{M-1}^{j-1}}{\Delta t} = \left[\frac{\epsilon_{M-1}}{s} v + \frac{m}{\epsilon_{M-1} \cdot s^2} D_{M-1}^{j-1} \right] \frac{k c_M^j - c_{M-2}^j}{2\Delta\epsilon} + \frac{1}{s^2 \Delta\epsilon} \left[A_M^{j-1} \frac{k c_M^j - c_{M-1}^j}{\Delta\epsilon} - A_{M-1}^{j-1} \frac{c_{M-1}^j - c_{M-2}^j}{\Delta\epsilon} \right] \quad 7.5.10$$

Noeud 1 (système fermé) :

$$\frac{c_1^j - c_1^{j-1}}{\Delta t} = \frac{2 A_2^{j-1}}{s^2 \Delta\epsilon^2} (c_2^j - c_1^j) \quad 7.5.11$$

Noeud N (système fermé) :

$$\frac{c_N^j - c_N^{j-1}}{\Delta t} = \frac{2 A_N^{j-1}}{(L - s)^2 \Delta\delta^2} (c_N^j - c_{N-1}^j). \quad 7.5.12$$

La vitesse de l'interface est inconnue dans cette formulation implicite. Des itérations doivent donc être effectuées pour satisfaire toutes les équations, en particulier 7.5.9 et 7.5.10 qui définissent la position de l'interface.

7.6 Données numériques du modèle de dissolution de la ferrite

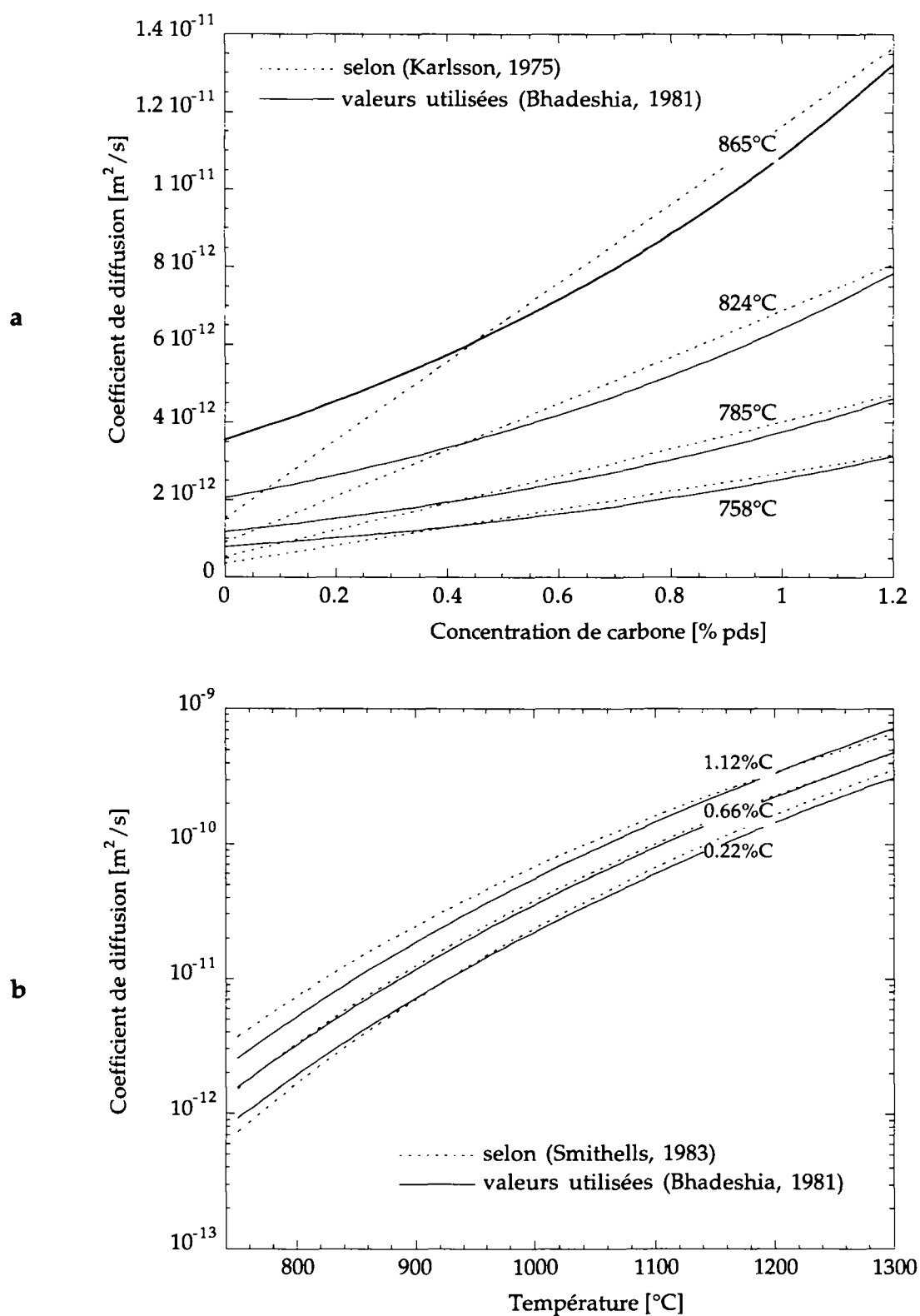


Fig. 7.6.1 : Coefficient de diffusion du carbone dans l'austénite.

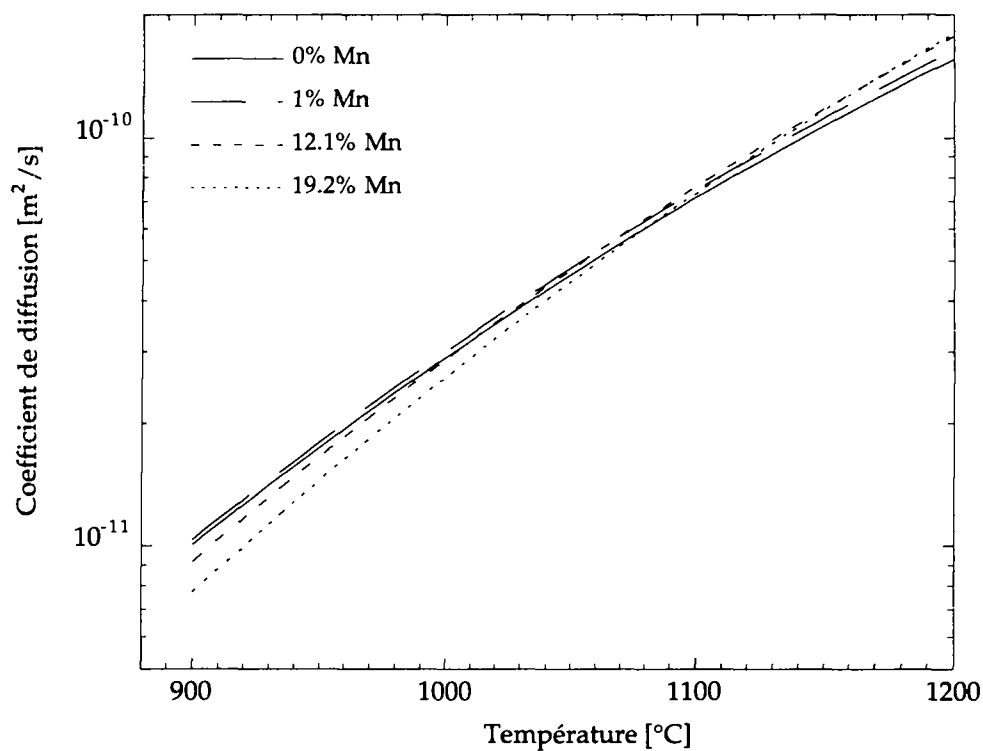


Fig. 7.6.2 : Influence du manganèse sur la diffusivité du carbone dans l'austénite (Smithells, 1983).

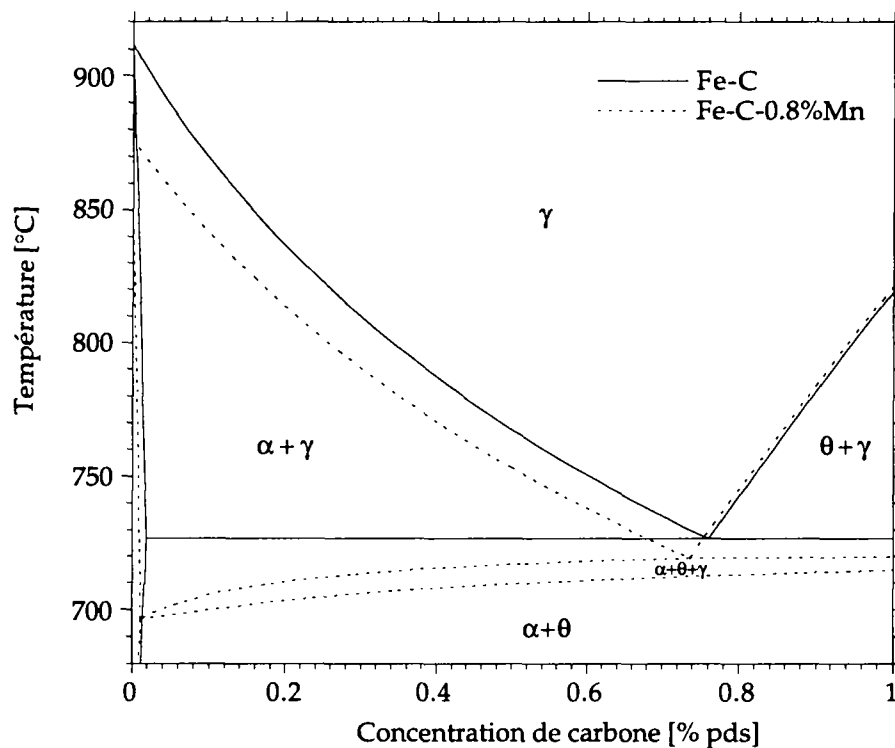


Fig. 7.6.3 : Influence du manganèse sur l'équilibre thermodynamique. (Calculé avec Thermo-Calc[©] (Sundman, 1985).

7.7 Modélisation de la croissance du grain par un modèle mécanique. Justification de la relation 4.51

Dans le modèle mécanique de croissance granulaire présenté au chapitre 4.3.1, la vitesse v_0 d'un point P_0 de coordonnées x_0 situé sur une arête (v. Fig. 7.7.1) est calculée avec la relation 4.51 :

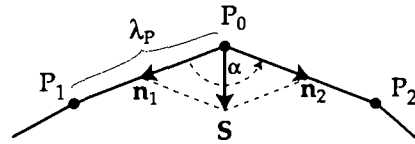
$$v_0(x_0, x_1, x_2) = \mu \gamma \frac{S}{\lambda_p} \quad \text{avec} \quad S = \frac{x_1 - x}{|x_1 - x|} + \frac{x_2 - x}{|x_2 - x|} \quad 4.51$$

où λ_p est la distance moyenne entre deux points voisins, μ la mobilité et γ la tension de surface. Le vecteur S est donné par la somme des vecteurs directeurs unitaires des segments P_0P_1 et P_0P_2 . Il représente la force exercée sur l'interface au point P_0 . Il s'agit de montrer que, si les points sont équidistants, la relation 4.51 équivaut à l'expression connue :

$$v = \mu \gamma K n \quad 4.52$$

où n est la normale au joint de grain dirigée vers l'intérieur et $K=1/r$ la courbure de l'arc de cercle de rayon r passant par les points P_0, P_1 et P_2 .

Fig. 7.7.1 : Déplacement d'un point d'interface dans le modèle mécanique de croissance granulaire.



Preuve

Le rayon r du cercle circonscrit au triangle $P_0P_1P_2$ peut être relié à l'espacement λ_p par une relation géométrique donnant l'aire d'un triangle isocèle :

$$A_{P_0P_1P_2} = \frac{1}{2} \lambda_p^2 \sin \alpha = 2 r^2 \sin^2 \left(90 - \frac{\alpha}{2} \right) \sin \alpha \quad 7.7.1$$

où α est l'angle formé par les segments P_0P_1 et P_0P_2 . On en déduit :

$$r = \frac{\lambda_p}{2 \cos \left(\frac{\alpha}{2} \right)} \quad 7.7.2$$

Or, en considérant le parallélogramme formé par le point P_0 et les extrémités des vecteurs n_1, n_2 et S , on établit aisément une relation entre la norme du vecteur S et l'angle α :

$$|S| = 2 \cos \left(\frac{\alpha}{2} \right) \quad 7.7.3$$

En combinant (7.7.3) et (7.7.2), on obtient :

$$|S| = \frac{\lambda_p}{r} \quad 7.7.4$$

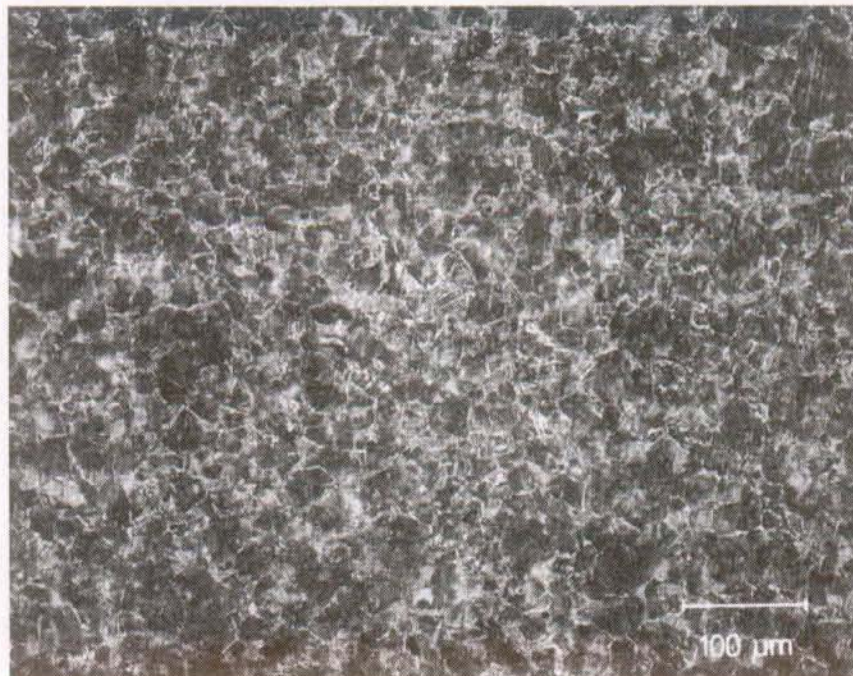
Cette relation permet d'établir l'équivalence entre les expressions 4.51 et 4.52.

7.8 Micrographies utilisées pour déterminer l'évolution de la taille du grain austénitique dans l'acier Ck45

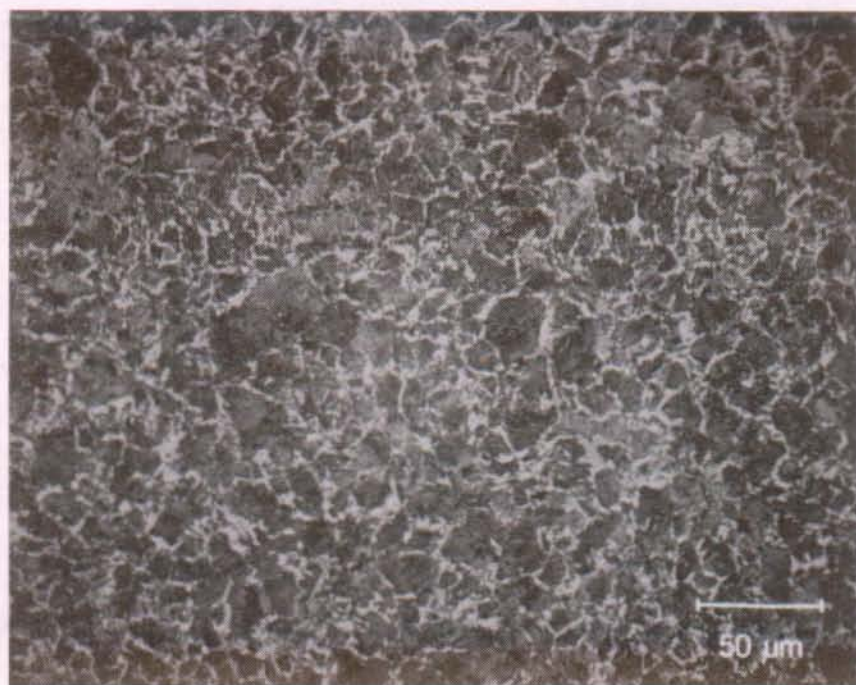
Les micrographies de l'acier Ck45 présentées ci-dessous ont été obtenues par un traitement d'austénitisation à 900°C suivi d'une trempe à l'air (refroidissement à environ 40°C/s). Les valeurs indiquées sous chaque image correspondent à la durée du maintien à 900°C et au diamètre de grain moyen mesuré par la méthode planimétrique. (Attaque chimique au Nital).



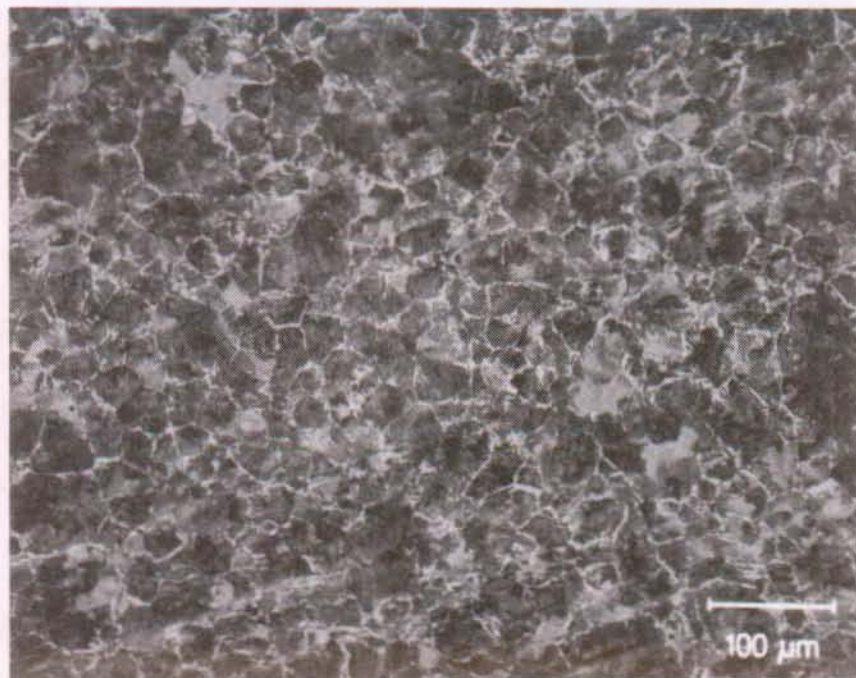
$t = 0 \text{ s}$ $\bar{d}_a = 19.4 \text{ }\mu\text{m}$



$t = 120 \text{ s}$ $\bar{d}_a = 24.1 \text{ }\mu\text{m}$



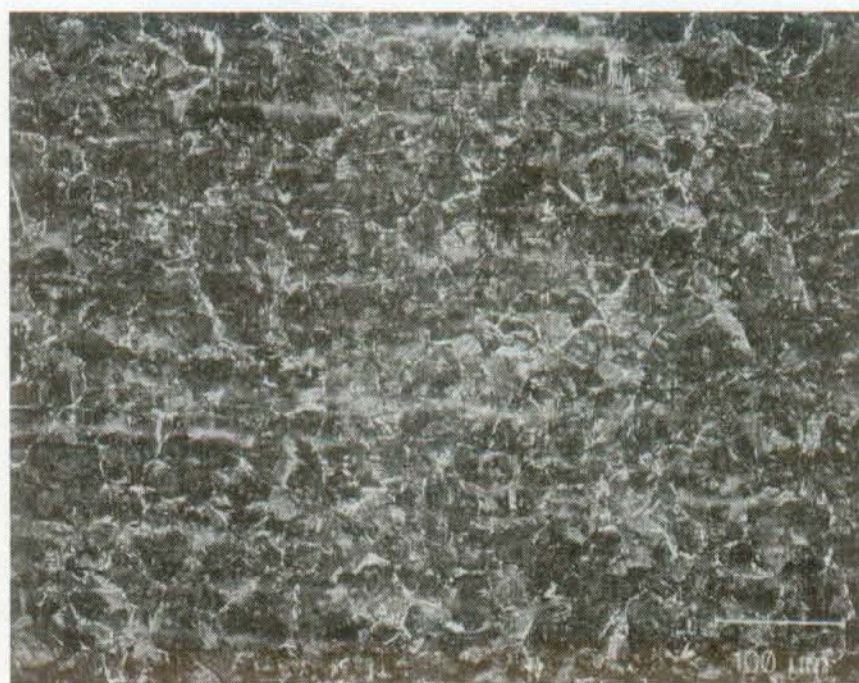
$t = 200 \text{ s}$ $\bar{d}_a = 17.5 \text{ μm}$



$t = 600 \text{ s}$ $\bar{d}_a = 30.4 \text{ μm}$



$t = 1000 \text{ s}$ $\bar{d}_a = 29.3 \text{ } \mu\text{m}$



$t = 1800 \text{ s}$ $\bar{d}_a = 46.8 \text{ } \mu\text{m}$



$t = 4000 \text{ s}$ $\bar{d}_a = 48.6 \text{ μm}$

7.9 Méthode inverse utilisée pour convertir des cinétiques de croissance granulaire anisothermes en données isothermes

La procédure présentée ici permet d'estimer la cinétique de croissance granulaire isotherme à partir d'informations sur l'évolution de la taille moyenne du grain dans des conditions anisothermes. La méthode a été appliquée aux données expérimentales anisothermes montrées à la figure 4.44 (a) pour en déduire la cinétique isotherme présentée à la figure 4.44 (b). Ce dernier résultat constitue la base de données utilisée pour calibrer les paramètres des modèles de croissance granulaire présentés dans la section 4.3.

7.9.1 Problème direct

La méthode utilisée est basée sur un modèle analytique simple permettant de décrire l'évolution de la taille moyenne du grain pour une histoire thermique donnée. La cinétique de croissance granulaire à la température T est supposée obéir à une loi de la forme :

$$\bar{d}(t,T) = K(T) t^{1/n(T)} \quad 7.9.1$$

où $K(T)$ et $n(T)$ sont des coefficients dépendant de la température et \bar{d} le diamètre moyen des grains. La dérivation de 7.9.1 par rapport au temps donne (à T constant) :

$$\frac{d}{dt}(\bar{d}) = \frac{K(T)n(T)}{n(T)\bar{d}^{n(T)-1}} \quad 7.9.2$$

Si les fonctions $n(T)$ et $K(T)$ sont connues, la cinétique de croissance $\bar{d}(t)$ pour une histoire thermique quelconque $T(t)$ peut être calculée par l'intégration de (7.9.2).

7.9.2 Problème inverse

Le problème inverse consiste à déterminer les fonctions $n(T)$ et $K(T)$ permettant de reproduire le plus fidèlement possible les cinétiques de croissance granulaire mesurées à différentes vitesses de chauffage. La méthode utilisée est basée sur une procédure similaire à celle décrite au paragraphe 3.1.5 pour la détermination des conditions aux limites d'un problème thermique.

Les données anisothermes sont constituées de N_c courbes $\bar{d}(t)$ caractérisées par des vitesses de chauffage \dot{T}_i ($i=1,\dots,N_c$) différentes. Chaque courbe est décrite par N_p points donnant le diamètre moyen $\bar{d}_{i,j}^m$ à différents instant $t_{i,j}$ ($j=1,\dots,N_p$). On cherche à déduire le jeu de paramètres inconnus $\mathbf{B} = \{\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_{N_B}\}$ qui minimise la fonction :

$$S(\mathbf{B}) = \sum_{i=1}^{N_c} \sum_{j=1}^{N_p} \left(\frac{\bar{d}_{i,j}^c(\mathbf{B}) - \bar{d}_{i,j}^m}{\bar{d}_{i,j}^m} \right)^2 \quad 7.9.3$$

où les $\bar{d}_{i,j}^c(\mathbf{B})$ sont les diamètres moyens calculés au temps $t_{i,j}$ pour une vitesse de chauffage \dot{T}_k . Ces valeurs sont obtenues par l'intégration de la relation 7.9.2 avec les fonctions $n(T,\mathbf{B})$ et $K(T,\mathbf{B})$ décrites par une interpolation linéaire parmi les valeurs \mathbf{B} tabulées en fonction de T .

Pour minimiser $S(\mathbf{\beta})$, on écrit :

$$\frac{\partial S}{\partial \beta_1} = 0, \quad \frac{\partial S}{\partial \beta_2} = 0, \quad \dots, \quad \frac{\partial S}{\partial \beta_{N_\beta}} = 0 \quad 7.9.4$$

La dérivation de (7.9.3) par rapport aux β_1 fait apparaître les coefficients de sensibilité :

$$X_{ijl} = \frac{\partial \bar{d}_{i,j}^c(\mathbf{\beta})}{\partial \beta_1} \quad 7.9.5$$

Une procédure de linéarisation de $\bar{d}_{k,j}^c(\mathbf{\beta})$ similaire à celle décrite dans (Rappaz, 1995) conduit à la formulation d'un système d'équations linéaires permettant de déterminer l'incrément du vecteur des inconnues, $\Delta \mathbf{\beta} = \mathbf{\beta}^{v+1} - \mathbf{\beta}^v$, entre les itérations v et $v+1$:

$$\sum_{k=1}^{N_\beta} A_{lk} \cdot \Delta \beta_k = f_l \quad 7.9.6$$

avec :

$$A_{lk} = \sum_{i=1}^{N_c} \sum_{j=1}^{N_p} \frac{X_{ijk} \cdot X_{ijl}}{(\bar{d}_{i,j}^m)^2} \quad 7.9.7$$

$$f_l = \sum_{i=1}^{N_c} \sum_{j=1}^{N_p} \frac{X_{ijl}}{(\bar{d}_{i,j}^m)^2} (\bar{d}_{i,j}^m - \bar{d}_{i,j}^c(\mathbf{\beta}^v)) \quad 7.9.8$$

La résolution est effectuée selon la procédure itérative décrite au paragraphe 3.1.5.

7.9.3 Résultats

Les fonctions $n(T, \mathbf{\beta})$ et $K(T, \mathbf{\beta})$ utilisées dans le modèle direct ont été décrites par une interpolation linéaire parmi 3 valeurs tabulées à 900°C, 1100°C et 1300°C ($\beta_1 = n_{900}$, $\beta_2 = n_{1100}$, $\beta_3 = n_{1300}$, $\beta_4 = K_{900}$, $\beta_5 = K_{1100}$, $\beta_6 = K_{1300}$). Les 6 valeurs de $\mathbf{\beta}$ trouvées par la procédure de minimisation sont représentées à la figure 7.9.1. Le coefficient n se situe entre 3 et 5. Ce résultat indique que la croissance de grain se déroule dans des conditions relativement éloignées de la croissance idéale caractérisée par un exposant $n=2$ (c.f. modèles analytiques présentés au chapitre 2). La différence provient d'une part de la procédure utilisée pour déterminer n qui ne fait intervenir les mesures que de manière indirecte. (Une représentation du diamètre moyen en fonction du temps mesuré dans des conditions isothermes est beaucoup plus directe et introduit moins d'erreur). D'autre part, les impuretés contenues dans l'alliage ralentissent certainement la croissance granulaire par rapport au cas d'un matériau pur. Les valeurs de n supérieures à 2 sont caractéristiques d'un tel effet.

Les diamètres de grain moyens calculés et mesurés peuvent être comparés à la figure 7.9.2. L'accord paraît suffisant pour que l'on puisse admettre que les fonctions $K(T, \mathbf{\beta})$ et $n(T, \mathbf{\beta})$ décrivent correctement la croissance granulaire dans l'acier Ck45 entre 900°C et 1300°C. Ces fonctions ont donc été utilisées pour

calculer les courbes de croissance granulaire isotherme montrées à la figure 4.44 (b).

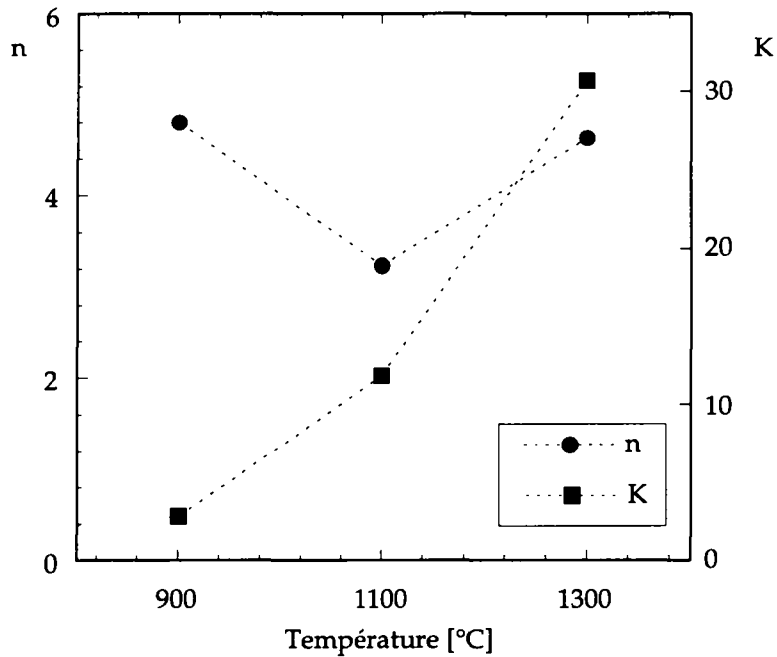


Fig. 7.9.1 : Fonctions $n(T)$ et $K(T)$ utilisées pour décrire la croissance de grain dans l'acier Ck45. Les 6 valeurs représentées ont été déterminées par une méthode inverse à partir de la cinétique de croissance mesurée à différentes vitesses de chauffage.

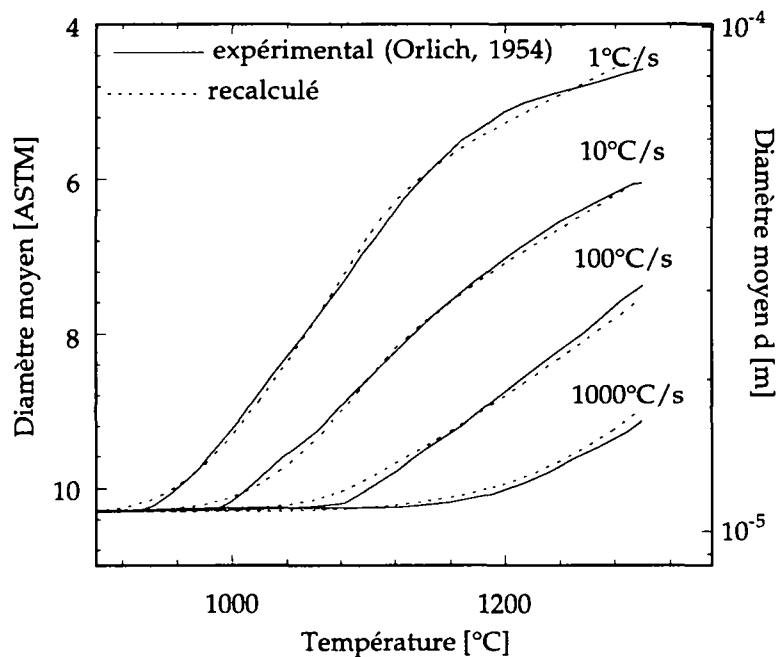


Fig. 7.9.2 : Données expérimentales anisothermes sur la croissance granulaire dans l'acier Ck45 utilisées pour déduire la cinétique de croissance isotherme. Les courbes en traits tillés ont été obtenues par l'intégration de la relation 7.9.2 avec les fonctions $n(T)$ et $K(T)$ représentées à la figure 7.9.1.

8. TABLE DES SYMBOLES

symbole	dénomination	unités
A	surface	[m ²]
\bar{A}	surface moyenne	[m ²]
A ₁	température eutectoïde	[K]
Ae ₃	température d'équilibre $\gamma/(\gamma + \alpha)$	[K]
A _f	température de fin d'austénitisation	[K]
B	champ d'induction magnétique	[T]
C _p	chaleur spécifique	[J kg ⁻¹ K ⁻¹]
D	coefficient de diffusion	[m ² /s]
D	champ de déplacement électrique	[C m ⁻²]
[D]	matrice de diffusivité	[m ² /s]
E	champ électrique	[V/m]
F	facteur de vue	[-]
F	fonction	
F	force	[N]
H	champ magnétique	[A m ⁻¹]
H	hamiltonien de la méthode de Monte Carlo	[J]
H _v	dureté Vickers	[-]
I	taux de germination	[m ⁻³ s ⁻¹]
J	paramètre du modèle de Monte Carlo	[J/mol]
J	flux de soluté	[m ⁻² s ⁻¹]
K	courbure	[m ⁻¹]
K _{MCS}	paramètre de la fonction de conversion du modèle de Monte Carlo	[-]
[K]	matrice de conductibilité	[W m ⁻¹ K ⁻¹]
L	longueur	[m]
L	dimension du domaine dans le modèle FDM 1D	[m]
M	aimantation	[A m ⁻¹]
M	coefficient de mobilité	[m ² N ⁻¹ s ⁻¹]
M _s	température d'apparition de la martensite	[K]
[M]	matrice de masse	[m ²]
N	nombre	[-]
N _A	densité de grains surfacique	[m ⁻²]
N _V	densité de grains volumique	[m ⁻³]
P	somme des fractions volumiques des produits	[-]
P _i	nombre de Péclet en piégeage de soluté	[-]

\dot{Q}	terme de source	[W m ⁻³]
Q	puissance de rayonnement	[W]
Q	énergie d'activation	[J/mol]
Q _{MCS}	énergie d'activation de la fonction de conversion du modèle de Monte Carlo	[J/mol]
Q _μ	énergie d'activation pour la mobilité des joints de grains	[J/mol]
R	rayon	[m]
R	constante des gaz parfaits	[J K ⁻¹ mol ⁻¹]
R	somme des fractions volumiques des réactifs	[-]
[R]	matrice du calcul des flux de rayonnement	[m ²]
S	surface	[m ²]
S	somme	
S	orientation de cellules dans le modèle de Monte Carlo	
S _V	surface par volume unitaire	[m ⁻¹]
T	température	[K]
T _{eut}	température eutectoïde	[K]
T ₀	température d'équilibre de la transformation α ↔ γ dans le fer pur	[K]
T _c	température de Curie	[K]
U	force électromotrice	[V]
V	volume	[m ³]
\bar{V}	volume moyen	[m ³]
[V]	matrice des vitesses	[m ² /s]
W	probabilité de transition	[-]
a	taille de cellule	[m]
b	coefficient de la relation d'Avrami	
b	vecteur second membre	
c	concentration	[m ⁻³]
c ₀	concentration nominale	[m ⁻³]
c*	concentration à l'interface	[m ⁻³]
{c}*	saut de concentration à l'interface	[m ⁻³]
d	distance	[m]
d	diamètre de grain	[m]
\bar{d}	diamètre de grain moyen	[m]
\bar{d}_a	diamètre de grain moyen (méthode planimétrique)	[m]
\bar{d}_c	diamètre de grain moyen (unités de la simulation)	[-]
\bar{d}_l	diamètre de grain moyen (méthode des segments)	[m]
f	fraction volumique	[-]

h	enthalpie volumique	$[J\ m^{-3}]$
h	coefficient de transfert thermique	$[W\ m^{-2}\ K^{-1}]$
h	facteur d'hérédité dans le principe d'additivité	$[-]$
j	densité de courant	$[A\ m^{-2}]$
\bar{l}	distance moyenne d'interception	$[m]$
m	exposant	$[-]$
m	masse	$[kg]$
n	exposant de la relation cinétique d'Avrami	$[-]$
n	inverse de l'exposant de la loi de croissance granulaire	$[-]$
n	vecteur normal unitaire à l'interface	$[-]$
n_x, n_y	composantes du vecteur normal unitaire à l'interface	$[-]$
p	coefficient de réaction	$[-]$
q	flux d'énergie	$[W\ m^{-2}]$
r	première coordonnée du repère cylindrique	$[m]$
r	coefficient de réaction	$[-]$
s	vecteur du terme de source	$[W/m]$
t	temps	$[s]$
t^*	temps fictif	$[s]$
u	vitesse relative à un référentiel mobile	$[m/s]$
v	vitesse	$[m/s]$
$v_{réf}$	vitesse du référentiel	$[m/s]$
w_x, w_y	dimensions du domaine de calcul	$[m]$
x	vecteur position	$[m]$
x	première coordonnée du repère cartésien	$[m]$
y	deuxième coordonnée du repère cartésien	$[m]$
z	troisième coordonnée des repères cartésien et cylindrique	$[m]$
z	taux d'avancement d'une transformation de phase	$[-]$
α	absorptivité relative	$[-]$
α	facteur de proportionnalité	
α_m	constante de la relation de Koistinen et Marburger	$[K^{-1}]$
β	inconnue dans la méthode inverse	
β	angle au point de jonction des phases α , γ et θ	$[-]$
Γ	coefficient de Gibbs-Thompson	$[K\ m]$
γ	tension de surface	$[N/m]$
ΔG	différence d'enthalpie libre	$[J]$
ΔT	surfusion, surchauffe	$[K]$
ΔT_{eff}	surchauffe effective	$[K]$
ΔT_R	surchauffe de courbure	$[K]$

$\Delta_{S-S'}$	variation du nombre de voisins d'orientations différentes	[-]
Δt	intervalle de temps	[s]
δ	symbole de Kronecker	
δ	profondeur de pénétration d'induction	[m]
δ_i	épaisseur d'interface	[m]
ε	émissivité relative	[-]
η	rendement	[-]
θ_{RC}	constante de balayage du modèle de Rhines et Craig	[-]
θ	angle, deuxième coordonnée du repère cylindrique	[-]
κ	conductibilité thermique	[W m ⁻¹ K ⁻¹]
λ	espacement interlamellaire,	[m]
λ_p	distance entre les points du modèle mécanique	[m]
μ	mobilité d'interface	[m ³ N ⁻¹ s ⁻¹]
μ_S	mobilité d'un sommet dans le modèle mécanique	[m ³ N ⁻¹ s ⁻¹]
μ_0	facteur préexponentiel de la mobilité	[m ³ N ⁻¹ s ⁻¹]
μ	perméabilité magnétique	[V·s·A ⁻¹ ·m ⁻¹]
μ_0	perméabilité magnétique du vide	[V·s·A ⁻¹ ·m ⁻¹]
μ_r	perméabilité magnétique relative	[-]
ν	susceptibilité magnétique relative	[-]
ρ	masse volumique	[kg m ⁻³]
ρ	réflectivité	[-]
σ	conductivité électrique	[Ω ⁻¹ m ⁻¹]
σ_B	constante de Boltzmann	[W·m ⁻² ·K ⁻⁴]
σ_{RC}	gradient structural du modèle de Rhines et Craig	[-]
$\sigma_{\alpha/\gamma}$	énergie de surface entre les phases α et γ	[J m ⁻²]
σ_T	paramètre de la méthode inverse	[K]
σ_k	paramètre de la méthode inverse	
τ	durée	[s]
ϕ	potentiel magnétique scalaire	[Wb m ⁻¹]
ϕ	fonction d'interpolation des éléments finis	[-]
ω	fréquence angulaire	[-]

9. CURRICULUM VITAE

Alain Jacot
Rout de la Crottaz 32
1802 Corseaux

Né le 14 mai 1969
Originaire de Le Locle (NE)
Célibataire

Formation

1982-85 Collège de Corsier (VD)
1985 Certificat d'études secondaires, section scientifique
1985-88 Gymnase Cantonal de l'Est Vaudois (CESSEV)
1988 Baccalauréat scientifique. Prix des meilleurs résultats
1988-93 Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne
1993 Diplôme d'ingénieur en sciences des matériaux de l'EPFL
1994 Cours de solidification

Expérience professionnelle

1993-97 Assistant-doctorant à l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne, Laboratoire de Métallurgie Physique, groupe du Prof. M. Rappaz

- Modélisation du procédé de traitement thermique par induction
- Modélisation de l'austénitisation et de la croissance du grain austénitique dans les aciers au carbone
- Assistant aux travaux pratiques de métallurgie et de modélisation en science des matériaux

1996 Séjour de 1 mois à l'Université de Cambridge dans le cadre d'une collaboration avec Dr R. Reed sur le sujet de la dissolution de la perlite

Loisirs

Sports Alpinisme (membre du Club Alpin Suisse)
Voyage Nombreux voyages en Europe
Séjour de 3 mois en Inde et dans l'Himalaya

10. Publications

Ch. Charbon, A. Jacot et M. Rappaz, "Three-dimensional Probabilistic Modelling of Equiaxed Eutectic Solidification in the Presence of Convection", *Mater. Sc. Eng.*, **A173**, (1993), p. 143.

Ch. Charbon, A. Jacot et M. Rappaz, "3-D Stochastic Modelling of Equiaxed Solidification in the Presence of Grain Movement", *Acta Met.*, **42**, (1994), p. 3953.

M. Rappaz, J.-L. Desbiolles, J.-M. Drezet, Ch.-A. Gandin, A. Jacot et Ph. Thévoz, "Application of Inverse Methods to the Estimation of Boundary Conditions and Properties", dans "Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes VII", éd. par M. Cross et J. Campbell, TMS, (1995), p. 449.

M. Rappaz, Ch.-A. Gandin, A. Jacot et Ch. Charbon, "Modelling of Microstructure Formation", dans "Modelling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes VII", éd. par M. Cross, J. Campbell. TMS, (1995), p. 501.

A. Jacot, M. Swierkosz, J. Rappaz, M. Rappaz et D. Mari, "Modelling of Electromagnetic Heating, Cooling and Phase Transformations during Surface Hardening of Steels", dans "Mechanics and Mechanisms of Solid-Solid Phase Transformations", compte-rendu de MECAMAT'95, Journal de Physique IV, Colloque C1, (1996), p. C1-203.

M. Rappaz, X. Doré, Ch.-A. Gandin, A. Jacot et T. Jalanti, "Modelling of As-Cast Structures", dans "International Conference on Aluminium Alloys 5", Materials Science Forum, 217-222, (1996), p. 7.

X. Doré, A. Jacot et M. Rappaz, "Modelling of Microsegregation for Ternary Systems: Application to Homogenisation of Al-Mg-Si Alloys", COST 512 MMSP, éd. par M. Rappaz et M. Kedro (CEC, Bruxelles), (1996).

A. Jacot et M. Rappaz, "A Two-Dimensional Diffusion Model for the Prediction of Phase Transformations : Application to Austenitisation and Homogenisation of Hypoeutectoid Fe-C Steels", *Acta Mat.*, **45**, (1997), p. 575.