

## Analyses numériques des conséquences mécaniques de transformation de phase diffusionnelle dans l'acier : plasticité de transformation et effet de pré-écrouissage

H. Hoang, F. Barbe, L. Taleb

Laboratoire de Mécanique de Rouen, EA 3828,  
INSA Rouen, BP 08, 76801 Saint Etienne du Rouvray Cedex, France  
Email : [hhoang@insa-rouen.fr](mailto:hhoang@insa-rouen.fr)

### Résumé :

*Afin de tenter de rendre compte correctement de l'effet -expérimentalement observé- d'une pré-charge de la phase austénitique sur la plasticité induite par transformation diffusionnelle dans un acier, nous avons développé 3 modélisations basées sur l'approche par EF, se différenciant essentiellement par la cinétique de germination imposée dans ces modélisations. Ce travail propose tout d'abord une analyse de l'effet de pré-charge de la phase parente sur la plasticité de transformation dans le cas d'un domaine d'étude réduit à une cellule contenant un germe en son centre. Puis est présentée la nouvelle approche où des germes apparaissent aléatoirement dans l'espace et dans le temps selon une loi de distribution donnée. Cette approche, outre le fait qu'elle est basée sur une cinétique de transformation cohérente par rapport à la métallurgie, permet de fournir des résultats sensibles aux paramètres contrôlant la germination.*

### Abstract :

*In order to try to reproduce correctly a preload effect of the austenitic phase on diffusive transformation in steel, we have developed 3 approaches based on FE method, primarily being different by the kinetics of germination imposed in these modelings. This work proposes first an analysis of the preload effect of parent phase on transformation plasticity in the case of a single nucleus at the centre of a cubic cell. Then a new approach is presented where germs appear randomly in space as well as in time according to a distribution law given. This approach has been developed in order to have a physically-consistent description of the kinetics and so that results be sensitive to the parameters controlling nucleation.*

**Mots-clefs : plasticité de transformation ; transformation diffusionnelle ; éléments finis**

### 1 Introduction

Parmi des phénomènes mécaniques provoqués lors d'une transformation de phase solide-solide dans un métal (phase  $\gamma$  se transforme en phase  $\alpha$  par exemple), on s'intéresse à la plasticité de transformation TRIP (TRansformation Induced Plasticity). Le TRIP apparaît par le changement de la densité dans les deux phases quand la structure est soumise à une contrainte externe constante au cours de la transformation ou à un pré-écrouissage juste avant la transformation. D'un point de vue microstructural, il y a deux mécanismes qui peuvent expliquer ce phénomène : mécanisme de Magee (1966) et celui de Greenwood-Johnson (1965). Si le mécanisme de Magee est relatif à la transformation martensitique sous forme de plaquettes, celui de Greenwood-Johnson est dominant dans des transformations diffusionnelles.

Dans la réalité, il y a plusieurs auteurs qui ont proposé des modèles associés à la plasticité de transformation ; nous noterons généralement que pour beaucoup de modèles proposés, seul le mécanisme de Greenwood-Johnson (1965) est considéré. Le modèle le plus courant qui permet par ailleurs de tenir compte d'une pré-charge de l'austénite sur la plasticité de transformation, est le modèle de Leblond (1986 ; 1989). Ce modèle a été éprouvé dans des cas d'essais classiques

de plasticité de transformation et a montré de très bonnes capacités prédictives sous chargement uniaxial (Taleb *et al.*, 2003). Cependant, comme cela a été montré dans les travaux expérimentaux de Taleb et Petit-Grostabussiat (2002 ; 2005), il ne s'accorde pas bien avec les résultats expérimentaux dans le cas où la phase parente (austénite) a été pré-écrouie. Ceci a donc motivé le développement de méthodes alternatives, à savoir par éléments finis, pour tenter de mieux rendre compte par modélisation de ces effets de pré-charge.

Les investigations préliminaires des approches se basant sur la modélisation numérique de Ganghoffer (1993) sont présentées dans (Barbe *et al.*, 2004 ; 2006). Ces investigations, avec la méthode des éléments finis, concernent la transformation bainitique considérée ici comme diffusionnelle. En fait, il y a trois cas de croissance qui ont été étudiés par notre équipe dont le cas où les germes apparaissent aléatoirement en même temps dans un macrovolume (Barbe *et al.*, 2004). Deux autres extensions sont abordées dans cet article : (i) la germination périodique où les germes apparaissent en même temps en formant un réseau cubique dans le macrovolume ayant fait l'objet de travaux préliminaires pour des essais classiques mettant en évidence du TRIP (Barbe *et al.*, 2006) ; (ii) la germination aléatoire dans l'espace et dans le temps qui correspond à un cas plus proche de la réalité physique, présenté aussi pour les situations classiques de développement de TRIP (Hoang *et al.*, 2006). Cet article se compose de deux parties principales : la modélisation numérique sur les deux types de croissance sera présentée dans une première partie. Enfin, ce seront les analyses sur les résultats obtenus.

## 2 Modélisation numérique

### 2.1 Caractéristiques communes des domaines d'étude

#### *Cinétique de croissance :*

En se basant sur modèle proposé par Ganghoffer (1993), on étudie un macrovolume de forme cubique avec les propriétés moyennes représentatives de celles macroscopiques du milieu dont est extrait le macrovolume. Quelques hypothèses sont adoptées pour simplifier le problème : chaque phase est considérée comme un matériau homogène ; la transformation apparaît au même instant aux éléments prédéfinis qui constituent les noyaux de transformation ; elle se propage ensuite par le changement des propriétés du matériau de la couche d'éléments autour du noyau. Ensuite, la transformation continue à progresser par diffusion jusqu'à la 2<sup>ème</sup> couche, 3<sup>ème</sup> couche,... et enfin à la dernière couche (transformation complète). Ceci est illustré sur la fig.1 pour le cas d'un germe central unique et sur la fig.2 pour le cas de germes aléatoirement placés dans le temps et dans l'espace. La vitesse de propagation est choisie uniforme spatialement et constante dans le temps. A partir de ces hypothèses, le milieu peut être considéré comme un système composite biphasé, avec une matrice formée par la phase parente (phase  $\gamma$ ) remplie d'inclusions constituant la phase produite (phase  $\alpha$ ).

#### *Maillage :*

Un domaine d'étude, de forme cubique, est discrétisé régulièrement en  $n*n*n$  éléments finis de forme cubique. Dans le système de coordonnées  $(0, x, y, z)$ , le cube se situe entre les points de coordonnées  $(0, 0, 0)$  et  $(n, n, n)$ . Les éléments de type hexaédriques à 8 nœuds sont choisis.

#### *Conditions aux limites et chargement*

- Deux types de chargement sont appliqués dans les présents calculs : un pré-écrouissage avant la transformation et une contrainte (ici une traction à 24 MPa) maintenue constante tout au long de la transformation. Tous deux sont appliqués sur la face  $x=n$  du cube.
- Le déplacement de la face  $x=0$  suivant la direction de l'axe  $x$  est bloqué :  $U_x(x=0)=0$ .
- Les faces latérales dont le vecteur normal est perpendiculaire à la charge sont supposées

planes et parallèles à la direction de chargement tout au long de l'essai.

#### *Lois de comportement et matériaux*

Les paramètres du matériau utilisés dans la transformation bainitique sont déterminés depuis des mesures expérimentales de Taleb et Petit-Grostabussiat (2004) sur l'acier 16MND5. Les paramètres qui sont utilisés dans cette étude ont été identifiés sur les courbes expérimentales de traction monotone correspondant à chaque phase (Hoang *et al.*, 2006). Deux lois d'écrouissage sont utilisées pour les calculs dans cet article: isotrope et cinématique linéaire.

#### *Traitements numériques*

Les calculs numériques sont exécutés à l'aide du module éléments finis du logiciel Zset développé à l'Ecole des Mines de Paris et à l'ONERA, France. Les calculs présentés dans ce travail ont été effectués pour partie sur des PC standards et, pour autre, sur un supercalculateur.

## 2.2 Cinétiques de germination

### 2.2.1 Germination périodique

Pour le type de germination périodique, les germes sont supposés apparaître instantanément selon un réseau cubique dans le macrovolume. Supposant par ailleurs que la transformation démarre au même moment en chaque germe et se poursuit à la même vitesse, le macrovolume garde une microstructure périodique tout au long de la transformation. Vu cette périodicité et vu le chargement uniaxial exercé, on convient sans peine que l'on peut réduire le domaine d'étude à une cellule cubique contenant un germe en son centre à laquelle on applique les mêmes conditions limites qu'au macrovolume. Du fait de la symétrie de la microstructure et des conditions limites, on considérera donc, comme c'est représenté sur la fig.1, un domaine cubique correspondant à un huitième de cellule avec un germe en son coin inférieur gauche, en  $(0, 0, 0)$  dans le système de coordonnées  $(O, x, y, z)$ .

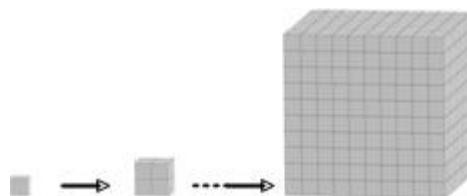


FIG. 1 – Région occupée par la phase produite aux deux premières étapes et à la dernière étape de transformation pour le cas d'une distribution instantanée périodique de germes.

Ce type de germination périodique permet de réduire au minimum la taille d'un domaine de calcul mais conduit à une cinétique peu fidèle à la physique : l'évolution de  $z$  en fonction des étapes de calculs –donc en fonction du temps- est en  $k*k*k$  si  $k$  est le numéro d'étape de transformation or il est à la fois communément admis et expérimentalement observé que le taux de croissance de  $z$  diminue en fin de transformation.

### 2.2.2 Germination aléatoire dans l'espace et dans le temps

Afin d'être le plus fidèle possible à la physique, il est donc considéré dans ce cas que les germes apparaissent en des positions aléatoires et en des instants aléatoires. Dans nos travaux, nous choisissons une loi uniforme et constante  $p$  pour gérer l'apparition des germes, *i.e.* tous les éléments non transformés ont la même probabilité de germination au cours de la transformation. Ceci est illustré sur la fig.2 : tout d'abord, la transformation commence par la germination

initiale à la 1<sup>ère</sup> étape. Ensuite, la transformation progresse diffusionnellement dans les couches autour de ces germes initiaux à la 2<sup>ème</sup> étape alors même que de nouveaux germes naissent. La transformation continue de la même manière jusqu'à la fin de transformation.

Contraire à la théorie classique de cinétique de croissance d'un domaine infini établie par Kolmogorov, Johnson, Mehl et Avrami (KJMA), notre domaine d'étude est fini. Cependant, avec une probabilité de germination  $p$  donnée, le traitement de plusieurs réalisations de microstructures nous amène l'évolution moyenne de  $z$  sur l'ensemble des réalisations en forme de sigmoïde, c'est-à-dire de la forme  $z = 1 - \exp(-at^m)$  où  $m$  est le coefficient d'Avrami et  $a$  le taux de réaction faisant intervenir la probabilité  $p$  et la vitesse de croissance. L'étude préliminaire sur la cinétique (Hoang *et al.*, 2006) a permis de constater que, afin d'avoir une cinétique représentative du milieu macroscopique duquel est extrait le domaine, les ordres de grandeur de probabilité  $p$  et de taille de domaine  $n*n*n$  doivent être respectivement très petit ( $p \sim 10^{-4}$ ) et très grand ( $n \sim 100$ ). Une solution simple consiste à adopter l'hypothèse d'ergodicité pour le milieu d'étude, ce qui revient à considérer que la moyenne d'ensemble sur des petits domaines extraits aléatoirement du milieu fournit les mêmes propriétés qu'une moyenne spatiale sur un volume très grand extrait du milieu d'étude (le macrovolume). Dans l'approche présentée ici, le macrovolume est donc décrit à partir de plusieurs sous-domaines. Nos premières investigations nous ont permis de constater qu'avec 30 réalisations de microstructures dans des domaines à  $18*18*18$ , on obtenait une cinétique moyenne très similaire à celle obtenue en moyenne sur des domaines à  $40*40*40$  ou à  $70*70*70$ . La cinétique simulée dans ces conditions étant indépendante de la taille des domaines, on peut garder ces conditions de moyennage et de taille de domaine pour la modélisation EF du TRIP. Ceci fait l'objet de la section 3.

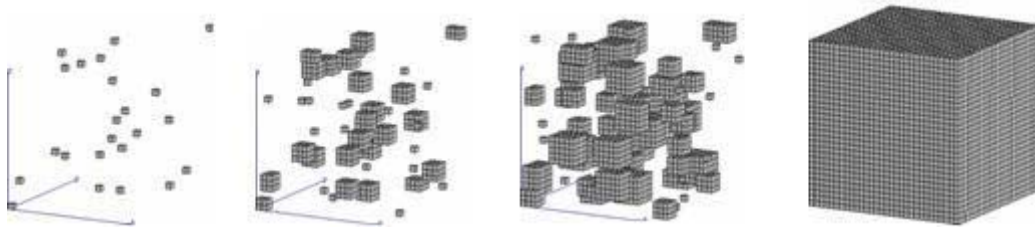


FIG. 2 – Région occupée par la phase produite aux trois premières étapes et à la dernière étape de transformation dans le cas des germes aléatoires dans l'espace et dans le temps.

### 3 Applications

La première étape de l'analyse consiste à effectuer des calculs dans le cas où la phase parente, austénitique, a été pré-écrouie alors que la transformation s'opère sous chargement externe nul. La figure 3 nous présente l'effet de la loi d'écrouissage sur le TRIP du maillage  $18^3$  avec 2 lois d'écrouissage : isotrope et cinématique linéaire. Trois différents chargements de pré-écrouissage ont été imposés, en compression (fig.3a) et en traction (fig.3b) : 180MPa, 200MPa et 220MPa. La visualisation des courbes tracées pour le TRIP en fonction de la fraction volumique de la phase produite nous montre que le développement de TRIP évolue toujours dans le sens inverse du pré-écrouissage avec le cas de cinématique tandis que l'écrouissage isotrope n'induit aucun TRIP d'interaction pendant la transformation.

On s'intéresse maintenant au cas de la germination aléatoire dans le temps et l'espace. Seul le cas d'un chargement à 24 MPa en traction avec une loi d'écrouissage isotrope linéaire a été abordé. Après les analyses sur la cinétique de différents domaines (Hoang *et al.*, 2006), nous décidons de choisir les domaines à  $30*30*30$  éléments et à  $36*36*36$  éléments pour les calculs EF. Les résultats sont présentés sur les fig.4a,b en terme de TRIP en fonction de  $z$  pour deux

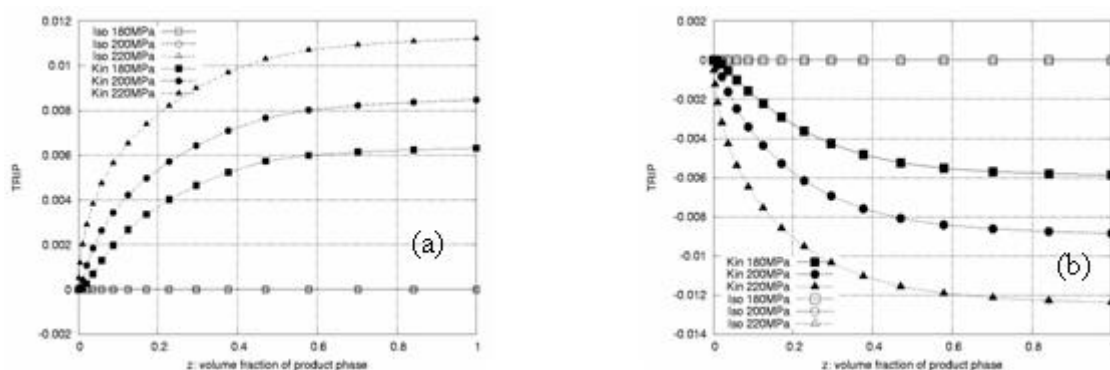


FIG. 3 – Effet de la loi d'écrouissage sur le TRIP pour un domaine à  $18*18*18$  éléments contenant un germe unique central, soumis à une pré-déformation (180MPa, 200MPa, 220MPa).  
(a) En compression. (b) En traction.

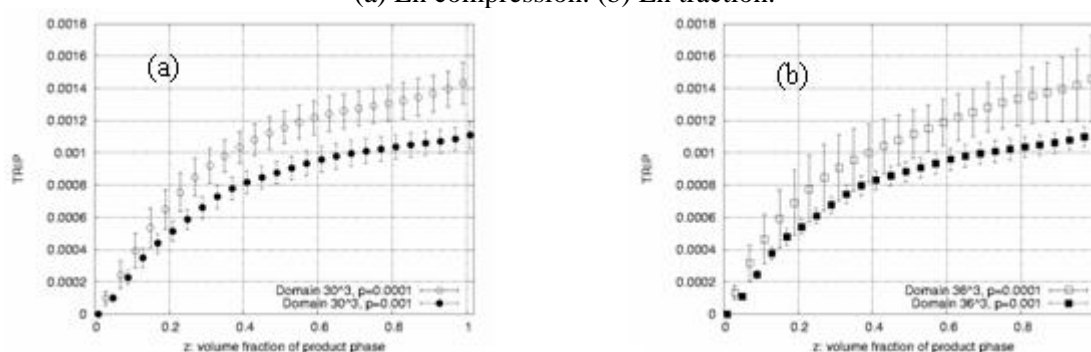


FIG. 4 – TRIP en fonction de  $z$  pour 20 simulations dans les cas de  $p=0.001$  et de  $p=0.0001$ .  
(a) Domaine à  $30^3$  éléments. (b) Domaine à  $36^3$  éléments.

probabilités :  $p=0.001$  et  $p=0.0001$ . Vingt calculs EF sont réalisés pour chaque taille de domaine. Les courbes représentées par des cercles et des carrés (noirs et blancs) sont les courbes moyennes en terme de TRIP de ces vingt simulations. Les barres d'erreur verticales définissent la région dans laquelle toutes les différentes courbes sont incluses. On observe que la dispersion du TRIP est assez grande quand la probabilité est petite (fig.4b) et que le TRIP est d'autant plus grand que la probabilité de germination  $p$  diminue. Du point de vue qualitatif aussi bien que quantitatif, il n'y a presque aucun effet de la taille de domaine sur le TRIP moyen.

#### 4 Conclusions

Ce travail présente une analyse sur 2 cas typiques de germination dans les approches numériques de la transformation de phase diffusive. Le cas où le domaine d'étude se réduit à un seul germe dans une cellule fournit une configuration de travail propre à une analyse qualitative de phénomènes tels que l'interaction plasticité-TRIP. Le cas où les germes naissent aléatoirement dans l'espace et dans le temps est plus fidèle à la métallurgie, ce qui se vérifie au travers de la cinétique macroscopique. Il a été montré que la distribution spatiale et la cinétique de transformation jouent un rôle important sur la quantité de TRIP prétendument formée. Cependant, la taille des domaines considérés est encore petite pour pouvoir fournir des propriétés effectives du macrovolume. Cette étude sera donc complétée dans ce sens et sera étendue à des cas de probabilité plus faible. La modélisation sera exploitée en relation avec de nouveaux essais expérimentaux menés par notre équipe.

#### Remerciements

Ces travaux ont été effectués en partie avec les moyens de calcul du Centre de Ressources Informatique de Haute Normandie (CRIHAN), financés dans le cadre du CPER-fiche 15

## Références

- Barbe, F., Quey, R., Taleb, L. 2004 Numerical determination of Diffusional Transformation Induced Plasticity From Computations of Random Microstructures. *21<sup>st</sup> ICTAM International Conference*, Warsaw, Poland, August 15-21.
- Barbe, F., Quey, R., Taleb, L., Souza de Cursi, E. 2006 Numerical modelling of the plasticity induced during diffusive transformation. Case of a cubic array of nuclei. *Eur J Mech A / Solids*. Sous presse, doi:10.1016/j.euromechsol.2006.09.005
- Ganghoffer, J. F., Denis, S., Gautier, E., Simon, A., and Sjöström, S. 1993 Finite element calculation of the micromechanics of a diffusional transformation. *Eur J Mech, A/Solids*, **12(1)**, 21-32
- Greenwood, G. W. and Johnson, R. H. 1965 The deformation of metals under small stresses during phase transformation. *Proc R Soc London*, A283-403
- Hoang, H., Barbe, F., Quey, R., Taleb, L. 2006 FE determination of the plasticity induced during diffusive transformation in the case of nucleation at random locations and instants. *Comput. Mat Sc*, à paraître.
- Leblond, J. B., Mottet, G., and Devaux, J. C. 1986 A theoretical and numerical approach to the plastic behavior of steels during phase transformations II: study of classical plasticity for ideal-plastic phases. *J Mech Phys Sol*. **34(4)**, 411-432
- Leblond, J. B. 1989 Mathematical modeling of transformation plasticity in steels II: coupling with strain hardening phenomena. *Int J Plasticity*. **5**, 573-591
- Magee, C. L. 1966 Transformation Kinetics, Microplasticity and Ageing of martensite in Fe-31-Ni. PhD thesis, Carnegie Institute of Technology, Pittsburgh University, PA
- Petit-Grostabussiat, S., Taleb, L., and Jullien, J. 2004 Experimental results on classical plasticity of steels subjected to structural transformations. *Int J Plasticity*. **20(8-9)**, 1371-1386
- Taleb, L., Petit-Grostabussiat, S. 3-4-5 July 2002 Elastoplasticity and Phase Transformations in Ferrous Alloys: Some Discrepancies Between Experiments and Modeling. *1st Conference: Model-Experiment Interactions in Solid*": Besançon-France.
- Taleb, L., Sidoroff, F. 2003 A micromechanical modeling of the Greenwood–Johnson mechanism in transformation induced plasticity. *Int J Plasticit* **19(10)**, 1821-1842
- Taleb, L., Petit, S. 2005 New Investigations on Transformation Induced Plasticity and its Interaction with Classical Plasticity. *Int J Plasticity*. **22**, 110-130