Modélisation du comportement thermo-métallurgique des aciers

F. Waeckel

► To cite this version:

F. Waeckel. Modélisation du comportement thermo-métallurgique des aciers. Journal de Physique IV Proceedings, 1994, 04 (C3), pp.C3-221-C3-226. 10.1051/jp4:1994330 . jpa-00252527

HAL Id: jpa-00252527

<https://hal.science/jpa-00252527>

Submitted on 1 Jan 1994

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

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

Modélisation du comportement thermo-métallurgique des aciers

F. WAECKEL

*Département Mécanique et Modèles Numériques, E.D.F. Etudes et Recherches, 92141 Clamart, France
L.M.S.CER ENSAM, 75013 Paris, France*

Abstract

Mechanical analysis of nuclear components may require consideration of residual stresses resulting from manufacturing processes such as welding or heat treatment. Although correct assessment of the quenching or welding thermal evolutions undergone a delicate problem, it is essential that the structural analysis involve the metallurgical phenomena induced by these operations. For the ferritic steel welding, the most important phenomenon is the structural transformations which modify some thermo-mechanical properties and induced residual stresses. We propose in this paper a model of cooling-induced structural transformation in the form of a thermo-metallurgical constitutive equation which remains compatible with the usual space scale of computational mechanics. The chosen framework is that of thermodynamics of internal variables. The pilot variable of the model is the temperature. Thus we also take account as variable its first time derivative. The other variables (so-called internal variables) describe the metallurgical state of steel. We choose here the proportions of the metallurgical component present at a given point, the austenitic grain size resulting of the heating and the martensitic starting temperature (M_s). The identification of the model is based of the Continuous Cooling Transformations diagrams (C.C.T.) and the Koistinen-Marburger's law of the considered steels. After validation, this model has been introduced in the finite element code of the "Direction des Etudes et Recherches d'E.D.F." (Code Aster). With taking into account the mechanical consequences of the structural transformations, it allows to simulate the development of welding residual stresses such as presented in the application.

1 Introduction

Certaines opérations de fabrication ou d'assemblage des composants nucléaires engendrent au sein des matériaux qui les constituent des phénomènes métallurgiques. Dans le cas du soudage ou du traitement thermique des aciers ferritiques, il s'agit essentiellement des transformations structurales qui ont pour premier effet de changer la structure cristallographique de l'acier qui voit ainsi certaines de ces propriétés évoluer [1] : coefficient de dilatation thermique, masse volumique, limite d'élasticité, résilience, dureté... Parallèlement, l'incompatibilité des déformations anélastiques qui résultent de ces transformations induit des champs de contraintes qui subsistent en grande partie lors du retour à la température ambiante et préexistent à la mise en service de ces matériels.

L'appréhension mécanique de ces opérations et en particulier la détermination numérique de ces champs de contraintes "résiduelles" nécessite donc, entre autres, de disposer d'un modèle de transformation métallurgique dont le domaine de validité doit recouvrir une gamme très étendue de vitesses de refroidissement, compte tenu de la très grande hétérogénéité des évolutions thermiques rencontrées [2]. Bien que des couplages existent entre les évolutions thermiques, métallurgiques et mécaniques [3] (les chaleurs latentes de transformation à l'état solide modifient l'évolution thermique et l'état de contraintes peut modifier le comportement métallurgique), on néglige l'effet thermique des transformations à l'état solide et l'on propose ici une modélisation de ces transformations au

refroidissement sous forme d'une *loi de comportement thermo-métallurgique* dont la variable pilote est la température.

On présente, enfin, une première validation du modèle et un exemple d'application concernant la simulation thermique, métallurgique et mécanique du soudage bout-à-bout d'un embout austénitique sur un tube en acier ferritique.

2 Caractérisation de la structure métallurgique : échelle de modélisation

Les différentes transformations structurales qui se produisent dans un acier ferritique chauffé au delà de 850°C environ puis refroidi jusqu'à la température ambiante sont mises en évidence par des essais de dilatométrie (cf. figure 1). Au chauffage, il s'agit de la transformation :

ferrite + perlite (F+P) → austénite (γ).

Cette transformation s'accompagne d'une contraction volumique et d'une modification de certaines caractéristiques thermo-mécaniques (coefficient de dilatation thermique (α) et limite d'élasticité (σ_y) notamment). Au refroidissement il s'agit, selon la vitesse de refroidissement, des transformations :

- austénite (γ) → ferrite + perlite (F+P) (1)
- austénite (γ) → bainite (B) (2)
- austénite (γ) → martensite (M) (3)

Fig. 1 : Courbes schématiques de dilatométrie.

Ces différentes transformations peuvent être totales ou partielles et consécutives. Elles s'accompagnent d'une expansion volumique et donnent naissance à des constituants métallurgiques possédant des caractéristiques thermiques et élastiques très voisines mais des propriétés plastiques assez différentes (cf. figure 2).

Fig. 2 : Limites d'élasticité en fonction de la température pour différentes phases de l'acier 16MND65 d'après [4].

D'un point de vue métallurgique, le principal phénomène mis en jeu lors de ces transformations structurales est l'instabilité thermodynamique de l'austénite (*i.e.* de la structure cubique à face centrée) en deçà d'une certaine température ainsi que la diffusion du carbone et des éléments d'alliage à l'extérieur de la matrice ferritique et leur précipitation sous forme de carbure, nitrure... Mais l'échelle spatiale à laquelle prennent place ces différents phénomènes (de l'ordre de la taille de

grain, soit quelques μm^3) apparaît bien trop fine par rapport à celle du point matériel utilisé en mécanique des solides et dont l'éprouvette de dilatométrie (quelques mm^3), supposée thermiquement homogène, est représentative. A cette échelle, le point matériel peut être multiphasé et il est donc légitime de considérer que la structure métallurgique est caractérisée par les différentes proportions des phases présentes en un point donné. *La variable caractérisant la structure métallurgique sera ainsi une grandeur vectorielle* $Z(M,t) = \{Z_1, Z_2, Z_3, Z_4\}$ où Z_1, Z_2, Z_3, Z_4 sont les proportions de ferrite, perlite, bainite et martensite en M à l'instant t (la proportion d'austénite étant égale au complément à 1 de la somme des $Z_i, i=1,4$).

3 Modèle de comportement métallurgique au refroidissement

Comme nous l'avons évoqué précédemment, l'état métallurgique dans lequel se trouve un point matériel à un instant donné dépend de la totalité de l'histoire thermique qu'il a subi. Autrement dit :

$$Z(M,t) = \int_{\tau=-\infty}^{\tau=t} T(\tau) d\tau \quad (1)$$

Le formalisme de la thermodynamique des matériaux à variables internes [5-6-7] permet de s'affranchir de cette dépendance fonctionnelle en remplaçant les effets de mémoire longue par l'introduction de variables internes supplémentaires. Plus précisément, on suppose qu'il existe une fonction f et un nombre fini de variables internes supplémentaires η_k et de fonctions ψ_k telles que :

$$\begin{cases} \dot{Z} = f(q, \dot{q}, Z, \eta_k) \\ \dot{\eta}_k = \psi_k(q, \dot{q}, Z, \eta_k) \end{cases} \quad (2)$$

où les q sont les variables d'état pilotes du processus thermodynamique (i.e. celles dont on peut expérimentalement imposer ou mesurer l'évolution).

Le choix des variables pilotes et internes dépend des phénomènes physiques mis en jeu et de la nécessité d'obtenir un accord satisfaisant entre l'expérience et le modèle ainsi formulé. On choisit donc, ici, d'introduire comme variables internes supplémentaires, *la taille de grain austénitique d (caractéristique des conditions d'austénitisation) et la température de début de transformation martensitique M_s qui intervient dans la loi d'état empirique de Koistinen-Marburger décrivant la cinétique atherme de cette transformation* [8] :

$$Z_4(T, Z_1, Z_2, Z_3, M_s) = [1 - \sum_{i=1}^{i=3} Z_i] \cdot \{1 - \exp(\beta [M_s - T]^+)\} \quad (3)$$

où : β est une constante du matériau ($^{\circ}\text{C}^{-1}$) ;

M_s est fonction du matériau et de la quantité d'austénite restante à la température T (pour modéliser le phénomène de stabilisation de l'austénite) ;

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

En toute rigueur, les variables pilotes à considérer sont la température T et le tenseur des déformations ϵ ou des contraintes σ . Cependant comme l'on néglige les effets mécaniques sur les transformations structurales, seule la température est retenue comme variable pilote. D'autre part, la taille de grain austénitique résulte uniquement de l'histoire thermique subie en phase austénitique : elle n'évolue plus au refroidissement. La variable d intervient donc uniquement en tant que paramètre dans le modèle de comportement métallurgique au refroidissement auquel nous nous limitons ici. On a alors :

$$\begin{cases} \dot{Z} = f(T, \dot{T}, Z, M_s; d) \\ \dot{M}_s = \mu(T, \dot{T}, Z, M_s; d) \\ d = d^C \end{cases} \quad (4)$$

où d^C est la taille de grain résultant de l'austénitisation.

4 Hypothèses d'identification et forme définitive du modèle proposé

Un diagramme T.R.C. (Transformations en Refroidissement Continu) synthétise l'ensemble des résultats obtenus pour différents essais dilatométriques (*i.e.* pour différentes vitesses de refroidissement) relatifs à des conditions d'austénitisation identiques (*i.e.* à une valeur d^C). Pour chaque histoire thermique expérimentale, il s'agit de la nature des transformations engendrées, de leurs températures de début et de fin et des proportions finales de chaque phase formée (cf. figure 3).

Fig. 3 : Diagramme T.R.C. d'un acier 20MND5.5.

Pour identifier le modèle on suppose alors que :

- (i) les diagrammes T.R.C. d'un acier et la loi d'état de Koistinen-Marburger caractérisent complètement son comportement métallurgique au refroidissement.
- (ii) pour une histoire thermique donnée, les cinétiques des transformations ferritiques, perlitiques et bainitiques peuvent être approchées par des fonctions linéaires par morceaux de la température (cette hypothèse est utilisée pour reconstruire de manière simple les évolutions $Z(t)$ associées à chaque histoire thermo-métallurgique des diagrammes T.R.C.).
- (iii) un diagramme T.R.C. permet d'identifier une relation empirique entre M_s

$$\text{et } \sum_{i=1}^{i=3} Z_i : \quad M_s(Z;d) = M_{s0}(d) + A(d) \cdot \left[\sum_{i=1}^{i=3} Z_i - Z^s(d) \right]^+ \quad (5)$$

Compte tenu de ces hypothèses, la forme définitive du modèle est donc :

$$\begin{aligned} \dot{z} &= \varphi(T, \dot{T}, z; d) \text{ avec } z = \{ Z_1, Z_2, Z_3 \} & (a) \\ Z_4(T, z, M_s) &= \left[1 - \sum_{i=1}^{i=3} Z_i \right] \cdot \{ 1 - \exp(\beta [M_s - T]^+) \} & (b) \\ M_s &= M_{s0}(d) + A(d) \cdot \left[\sum_{i=1}^{i=3} Z_i - Z^s(d) \right]^+ & (c) \\ d &= d^C & (d) \end{aligned} \quad (6)$$

5 Calcul des évolutions métallurgiques

Il n'existe pas dans le cas de refroidissement continu (sans palier isotherme) de modèle théorique satisfaisant qui permette de donner une forme particulière à la fonction φ définie dans l'équation (6a). De plus, le grand nombre de variables prises en compte rend très difficile (et incertain) le calage d'une forme de φ déterminée *a priori* à partir d'essais expérimentaux. Les modèles qui utilisent ce genre de technique ne considère pas T comme une véritable variable et prennent en compte son influence uniquement au travers d'un paramètre (en général $T(T=700^{\circ}\text{C})$ [9]).

Pour calculer $\varphi(T, \dot{T}, z; d)$ on utilise le fait que les histoires thermo-métallurgiques constituant un diagramme T.R.C. sont autant de solutions particulières de l'équation différentielle d'évolution (6a). Elles permettent donc de calculer pour chaque "état" thermo-métallurgique $(T, \dot{T}, z; d)$ figurant sur ces diagrammes T.R.C. la valeur prise par la fonction φ . Ainsi, un traitement numérique des diagrammes T.R.C. permet de construire un ensemble de "septuplés" $\Sigma = \{T, \dot{T}, z, d, \varphi(T, \dot{T}, z; d)\}$. Le calcul de l'avancement des transformations à un instant t donné repose alors sur une technique d'interpolation dans l'ensemble Σ [10]. La qualité de l'interpolation dépendant de la densité de l'ensemble Σ , on utilise l'hypothèse (ii) pour définir un ensemble virtuel d'environ 10 000 "septuplés" à partir d'un "squelette" d'environ 500 "septuplés" uniquement.

On notera enfin que la forme de l'équation différentielle régissant l'évolution des transformations structurales étant laissée libre, le modèle peut être affiné par la prise en compte de tout nouvel essai expérimental.

6 Validation et exemple d'application

Le modèle ainsi mis en œuvre a été implanté dans le code de calcul par éléments finis de la Direction des Etudes et Recherches d'E.D.F. (*Code Aster*) [11]. Une première validation du modèle a consisté à simuler numériquement l'ensemble des essais dilatométriques ayant servi à la réalisation du diagramme de l'acier 16MND5 austénitisé 1 heure à 900°C . Sur 42 essais numériques, les écarts avec l'expérience ont été en moyenne de 2°C environ sur les températures de début et de fin de transformation et de 2% environ (en absolu) sur les proportions finales de phases formées. Ce modèle permet donc, à ce jour, d'effectuer des calculs de simulation métallurgique en post-traitement des calculs thermiques linéaires ou non linéaires (le couplage, *i.e.* la prise en compte des chaleurs latentes de transformation à l'état solide étant formellement possible). Il permet également, moyennant la prise en compte des différentes conséquences mécaniques des transformations structurales [12] de déterminer les contraintes résiduelles de soudage ou de traitement thermique. La figure 5 montre l'évolution métallurgique d'un point situé dans la zone affectée thermiquement d'un tube en acier ferritique lors du soudage d'un embout en acier inoxydable (17-12, sans transformation structurale). Le maillage est présenté en figure 4 et l'on présente figure 6 l'évolution des contraintes longitudinales et circonférentielles en fin de refroidissement sur la face externe. La modélisation est 2D axisymétrique.

Fig 4 : Maillage de la structure.

Fig 5 : Evolutions métallurgiques
au noeud 68.

Fig 6 : Contraintes en fonction de la position sur la face externe.

7 Références

- [1] Waeckel F. 1993 : *Eléments de métallurgie pour l'étude des transformations structurales dans les aciers*. Note Interne E.D.F. D.E.R. H1-71/8075.
- [2] Andrieux S., Waeckel F., 1991 : *Modélisation thermique, métallurgique et mécanique d'une opération de soudage. Etude bibliographique*, Note Interne E.D.F. D.E.R. H1-71/7595.
- [3] Aeby-Gautier E., 1985 : *Transformations perlitique et martensitique sous contraintes de traction dans les aciers*. Thèse de Doctorat ès Sciences Physiques, I.N.P.L.
- [4] Devaux J.C. 1982 : *Etude des contraintes d'origine thermique dans les zones affectées par la chaleur lors d'une opération de soudage*. Contrat D.G.R.S.T. 79.7.1095, Compte rendu de fin de recherche.
- [5] Coleman B.D., Gurtin M.E., 1967 : *Thermodynamics with internal state variables*. The Journal of Chemical Physics, Vol.47, n°2, pp597-613.
- [6] Lubliner J., 1973 : *On the structure of the rate equations of materials with internal variables*. Acta Mechanica, 17, pp109-119.
- [7] Marigo J.J., 1985 : *Le comportement thermo-mécanique des milieux simples à variables mémoratives, I. Généralités et premiers exemples*. Note Interne E.D.F. D.E.R. H1-5147-07.
- [8] Koistinen D.P., Marburger R.E., 1959 : *A general equation prescribing extent of austenite martensite transformation in pure Fe-C alloys and plain carbon steels*. Acta Metallurgica, vol.7, pp59-60.
- [9] Leblond J.B., Devaux J.C., 1984 : *A new kinetic model for anisothermal metallurgical transformation in steels including effect of austenitic grain size*. Acta Metallurgica, vol.32, n°1, pp137-146.
- [10] Andrieux S., Waeckel F., 1992 : *Une loi de comportement thermo-métallurgique au refroidissement pour les aciers faiblement alliés*. Note Interne E.D.F. D.E.R. H1-71/7459.
- [11] Donore A.M., Waeckel F., 1993 : *Influence des transformations structurales dans les lois de comportement élasto-plastiques*. Note Interne E.D.F. D.E.R. H1-774/93/024.
- [12] Andrieux S. Donore A.M., Waeckel F., 1993 : *A new thermo-metallurgical model for welding and quenching computations*. 12th SMIRT, Stuttgart, 15-20/8/1993.