



HAL
open science

Modélisation micromécanique et calcul par éléments finis du comportement de matériaux en cours de transformations de phases : cas des transformations perlithique et martensitique d'alliages ferreux

Jean-François Ganghoffer

► **To cite this version:**

Jean-François Ganghoffer. Modélisation micromécanique et calcul par éléments finis du comportement de matériaux en cours de transformations de phases : cas des transformations perlithique et martensitique d'alliages ferreux. Matière Condensée [cond-mat]. Institut National Polytechnique de Lorraine, 1992. Français. NNT : 1992INPL028N . tel-01751086

HAL Id: tel-01751086

<https://hal.univ-lorraine.fr/tel-01751086>

Submitted on 29 Mar 2018

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.



AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10

http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php

<http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm>

92 INPL 028N

INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE LORRAINE

THESE

**MODELISATION MICROMECHANIQUE ET CALCUL PAR
ELEMENTS FINIS DU COMPORTEMENT DE MATERIAUX EN
COURS DE TRANSFORMATIONS DE PHASES : CAS DES
TRANSFORMATIONS PERLITIQUE ET MARTENSITIQUE
D'ALLIAGES FERREUX**

présentée par

Jean-François GANGHOFFER

en vue de l'obtention du grade de



DOCTEUR DE L'I.N.P.L.
(Mécanique et Energétique)

soutenue le 31 mars 1992

JURY :

Monsieur G. BECK	Président
Messieurs A. ZAOUÏ	Rapporteurs
G. GUENIN	"
G. MAEDER	Examineurs
S. SJÖSTRÖM	"
A. SIMON	"
Mesdames E. GAUTIER	"
S. DENIS	Directeur de Thèse



D 136 028962 7

92 INPL 028N



A mes parents

A ma famille

AVANT-PROPOS

Le travail présenté dans ce mémoire a été réalisé au Laboratoire de Science et Génie des Matériaux Métalliques (LSG2M), à l'Ecole des Mines de Nancy.

Je tiens à remercier vivement Monsieur G.Beck, Directeur du PIRMAT et Directeur du Laboratoire à mon arrivée, pour m'avoir conseillé dans le choix de mon sujet de recherche et pour l'intérêt constant qu'il a manifesté pour notre travail. Je le remercie également d'avoir accepté la présidence de mon jury de thèse.

Monsieur A.Simon, Directeur du Laboratoire, a été vivement intéressé par nos travaux tout au long de cette thèse. Je tiens à lui exprimer ma profonde reconnaissance pour l'aide et le soutien qu'il nous a sans cesse apportés.

L'esprit d'ouverture et de coopération internationale qui ont accompagné ce travail sont à mettre à l'actif du CNRS, qui nous a permis d'oeuvrer dans le cadre d'un PICS avec la Suède, en étroite collaboration avec la division de mécanique des solides de L'Université de Linköping. Cette collaboration qui est établie de longue date témoigne des relations solides et bien établies qui existent entre les deux groupes.

Particulièrement, j'exprime toute ma gratitude à S.Sjöström pour les nombreuses heures de travail et de discussions qu'il m'a consacrées, lors des fréquents séjours que j'ai été amené à effectuer à Linköping. J'ai pu pleinement apprécier sa compétence de mécanicien et lui sais gré d'avoir contribué à me transmettre une partie de sa grande patience lors des nombreux 'combats' informatiques que nous avons menés.

A Linköping également, K.Simonsson qui a débuté sa formation doctorale par cette collaboration a eu le mérite de s'être adapté rapidement à

cette tâche interdisciplinaire associant la mécanique et la science des matériaux, qui nous a conduits à de nombreux échanges d'idées fructueux. Il a plus que largement contribué à l'enthousiasme novateur et à la confraternité qui ont prévalu dans cette collaboration.

Je remercie également l'ensemble des chercheurs de la division de Mécanique de L'Université de Linköping pour leur gentillesse et leur accueil chaleureux lors de chacun de mes séjours ainsi que pour l'aide qu'il nous ont apportée lors des développements du code aux éléments finis qui furent réalisés.

J'exprime également ma reconnaissance à Monsieur T.Ericsson, Professeur à l'Université de Linköping, pour son aimable accueil et l'intérêt constant qu'il a manifesté à notre recherche.

Nous sommes heureux que cette étroite collaboration ait pu contribuer à renforcer les liens entre les deux équipes et souhaitons ardemment qu'elle puisse se poursuivre.

Je suis sensible à l'honneur que nous fait Monsieur le Professeur A.Zaoui, en acceptant de consacrer une partie de son temps à l'examen de ce travail.

Je remercie également vivement Monsieur le Professeur Guenin de s'être intéressé à ce travail et d'avoir accepté d'en être un des rapporteurs.

Mes remerciements s'adressent également à Monsieur le Professeur Maeder, Directeur de la recherche chez Renault, pour avoir accepté d'examiner ce travail et de se joindre aux autres membres du jury.

Madame S.Denis m'a, en sa qualité de Directeur de thèse, accompagné tout au long de ces années de ses conseils et de ses encouragements. Je lui exprime ma profonde gratitude pour son aide constante et son grand dévouement qui m'ont permis de mener à bien l'élaboration et la rédaction de ce travail.

Les conseils d'E.Gautier, chargé de recherches au CNRS, nous ont été très précieux et sa compétence et son expérience dans le domaine des transformations de phases nous ont constamment guidés dans la tâche ardue et parfois ingrate de modélisation. Nous la remercions vivement pour l'aide et les conseils constants qu'elle nous a apportés tout au long de ce travail.

Pendant la durée de cette thèse, j'ai eu l'occasion de démarrer une collaboration avec A.Hazotte sur les superalliages. Je le remercie de m'avoir donné l'occasion de participer à une recherche intéressante sur ce sujet et suis heureux d'avoir contribué à renforcer son intérêt pour la mécanique. J'associe également à ces remerciements M.Boufoussi pour son aide dans les développements du code de calcul.

Je n'oublie pas les autres chercheurs, ainsi que les autres membres du Laboratoire pour leur soutien amical tout au long de ces années.

INTRODUCTION

L'étude du comportement thermomécanique de matériaux biphasés stables ou en cours d'évolution structurale lors de traitements purement thermiques ou de sollicitations plus complexes est un thème situé au carrefour de plusieurs disciplines, qui intéresse aussi bien le physicien que le métallurgiste désireux de mieux cerner les mécanismes physiques sous-jacents, ou le mécanicien voulant obtenir une caractérisation mécanique du matériau lors de tels processus.

Dans le cas de matériaux qui subissent une évolution de leur microstructure, le comportement thermomécanique se révèle d'une grande complexité car il dépend de la température, de l'état de contrainte et des transformations structurales. De plus, apparaissent des phénomènes interactifs entre contraintes et évolution structurale, dont notamment le développement au cours de la transformation d'une déformation inélastique additionnelle appelée plasticité de transformation.

Les études développées dans les dernières années ont permis d'intégrer ces interactions en mécanique des milieux continus grâce à la collaboration étroite entre métallurgistes et mécaniciens. Il en est résulté notamment des modèles intégrés dans des simulations numériques permettant de prévoir la genèse des contraintes internes lors du traitement thermique des aciers (en particulier la trempe) et qui présentent un grand intérêt pour l'optimisation des procédés de traitement et la prévision des contraintes résiduelles qui déterminent les propriétés d'emploi des pièces traitées.

Ces modèles macroscopiques traitent la variable additionnelle plasticité de transformation selon un concept de déformation supplémentaire, ce qui permet d'aborder sur les mêmes bases le cas des transformations par diffusion et par cisaillement. La démarche que ces modèles utilisent est phénoménologique, compte tenu de la grande complexité des phénomènes physiques se produisant à l'intérieur du point matériel de la simulation.

L'objectif de notre travail est à partir d'études expérimentales approfondies portant sur les effets d'interaction contrainte-évolution microstructurale à une échelle plus microscopique (celle des phases), de dégager les mécanismes principaux modélisables dans le cadre de la mécanique des milieux continus et de les intégrer dans une simulation aux éléments finis, à la fois pour des

transformations de phase ne donnant lieu qu'à des phénomènes de diffusion (cas type d'une transformation perlitique) et des transformations par cisaillement (type transformation martensitique).

Dans la première partie de ce travail, nous présentons les différentes approches qui permettent de décrire le comportement de matériaux polyphasés stables d'une part et de matériaux en cours d'évolution structurale d'autre part, dans le cadre de la mécanique des milieux continus. On distingue alors la démarche macroscopique qui formule des lois de comportement à variables internes et l'approche micromécanique qui vise à décrire explicitement les phénomènes que ces variables internes recouvrent. Nous montrerons tout d'abord les possibilités et les limitations de l'approche macroscopique et dégagerons ensuite la spécificité et la méthodologie des modèles micromécaniques.

Dans le cas plus complexe où le matériau subit une évolution de sa microstructure, nous présenterons les modèles analytiques et les simulations développées par ailleurs en vue de décrire le phénomène de plasticité de transformation ; nous ferons alors ressortir la difficulté d'une prise en compte de l'ensemble des mécanismes qui interagissent, dans le cas général.

Dans la deuxième partie de ce travail, nous avons étudié le cas d'un matériau qui ne donne lieu qu'à une transformation par diffusion. En effet, dans ce cas, l'avancement de la transformation est a priori indépendant de l'état de contrainte local.

Nous décrirons dans le chapitre II les concepts de la simulation micromécanique d'une transformation par diffusion et les évolutions de la plasticité de transformation qu'il permet d'obtenir, pour une sollicitation appliquée uniaxiale. Cette étude a donné lieu à une publication qui est intégrée dans le développement. D'autre part, une fois le modèle posé et sa validité discutée, l'étape suivante consiste en son application à des états de contrainte complexes (uniaxiaux de différentes amplitudes et multiaxiaux) pour en dégager une loi de comportement pour la plasticité de transformation, ceci faisant l'objet de la fin de ce chapitre.

Le deuxième chapitre est consacré à l'analyse des états mécaniques locaux (contraintes internes, déformations plastiques générées) que nous essayerons de corrélérer aux évolutions de la plasticité de transformation. Nous comparerons ensuite les résultats de la simulation avec l'expérience et nous avancerons des explications des écarts observés, dans la discussion qui clôt cette deuxième partie.

La troisième partie de ce mémoire aborde le cas plus complexe de la modélisation d'une transformation martensitique qui est fortement affectée par l'état de contrainte local.

Nous avons entrepris une approche théorique concernant la thermodynamique de la transformation afin de mettre clairement et de façon rigoureuse en évidence l'effet d'interaction mécanique-transformation à l'échelle de deux phases évolutives et cohérentes à l'échelle du milieu continu et nous formulons des bilans énergétiques qui les quantifient. Nous dégagons ensuite un critère d'évolution pour la transformation utilisable dans l'étape de simulation. Cette analyse thermodynamique fait l'objet des développements du chapitre I.

Le chapitre II expose les concepts micromécaniques du modèle d'une transformation martensitique qui ont été introduits dans la simulation. Dans une première étape, nous abordons l'étude du comportement d'un matériau multigrain. La nécessité d'une prise en compte des mécanismes de transformation à une échelle plus fine est ensuite dégagée, qui nous conduit à analyser le comportement du grain lui-même pendant la transformation. Les principaux résultats de ce modèle concernent à la fois les évolutions morphologiques (formation des variants de martensite), telles qu'elles sont déterminées par l'état mécanique local, les distributions de contraintes internes et de déformations plastiques générées au cours de l'avancement, et les évolutions induites de champs 'globaux' (déformations obtenues à l'échelle du grain) qui permettent une mesure quantitative des mécanismes à l'origine de la plasticité de transformation. Nous analyserons ensuite l'effet des principaux paramètres du modèle sur nos résultats. La discussion qui suit situe l'apport de notre modèle micromécanique et le confronte à une situation physique réelle. L'intérêt et les possibilités de la simulation sont alors dégagés, ainsi que ses limitations actuelles.

PREMIERE PARTIE

**ANALYSE GENERALE DE LA DEMARCHE
MICROMECHANIQUE POUR UN MATERIAU BIPHASE**

PREMIERE PARTIE

Analyse générale de la démarche micromécanique pour un matériau biphasé

I - APPROCHE MACROSCOPIQUE

- I.1. Structure générale des modèles à variables internes et loi constitutive
- I.2. Matériaux monophasés
 - I.2.1. Illustration de la démarche : cas de la plasticité couplée à l'endommagement
 - I.2.2. Approches par les théories de jauge
- I.3. Matériaux multiphasés

II - APPROCHE MICROMECHANIQUE

- II.1. Méthodologie de la transition d'échelle
 - II.1.1. Modélisation micromécanique du comportement du polycristal
 - II.1.2. Une alternative : l'approche 'macro-micro'
- II.2. Modèle micromécanique du biphasé stable
 - II.2.1. Méthodes d'homogénéisation
 - II.2.2. Simulations par éléments finis

III - PLASTICITE DE TRANSFORMATION

- III.1. Phénomènes et mécanismes
 - III.1.1. Phénomènes
 - III.1.2. Mécanismes
 - III.2.1.1. Mécanisme d'accommodation anisotrope de l'écoulement plastique
 - III.2.1.2. Mécanisme d'orientation du produit de transformation
- III.2. Revue bibliographique des modèles de plasticité de transformation
 - III.2.1. Modèles basés sur le mécanisme d'accommodation anisotrope de l'écoulement plastique
 - III.2.1.1. Modèles analytiques
 - III.2.1.2. Simulations par éléments finis
 - III.2.2. Modèles basés sur le mécanisme d'orientation du produit de transformation

IV - CONCLUSION

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

ANALYSE GENERALE DE LA DEMARCHE MICROMECHANIQUE POUR UN MATERIAU BIPHASE

Dans ce chapitre, nous nous proposons de situer la démarche micromécanique que nous utiliserons dans notre étude par rapport aux démarches développées dans le but de décrire le comportement de matériaux biphasés stables ou en cours d'évolution structurale.

La modélisation de ce comportement a pour objectif la formulation d'une loi constitutive du matériau qui prenne en compte l'ensemble des paramètres microstructuraux significatifs et qui permette de prévoir des réponses pertinentes de celui-ci à des sollicitations variées. La difficulté de l'objectif apparaît immédiatement si l'on considère d'une part les différentes échelles physiques mises en jeu (échelles de la maille cristalline, de la dislocation, du grain, de la phase) et la diversité d'approches pouvant être menées pour décrire les phénomènes physiques qui leur sont rattachés (expérimentales / théoriques), et d'autre part la nécessité d'une modélisation réaliste qui soit utilisable à l'échelle du continuum. Il est alors possible de dégager deux philosophies de la modélisation, que nous aborderons et développerons successivement :

- L'approche phénoménologique ou macroscopique qui se situe délibérément à l'échelle globale de l'élément de volume et qui considère le matériau comme une boîte noire caractérisée par un nombre suffisant de variables cachées ; leur détermination s'effectue alors par identification à l'expérience. Nous présenterons dans une première partie la structure formelle de ces modèles à variables internes ainsi que leur mise en oeuvre dans la description du comportement de matériaux anélastiques (métaux), pour lesquels il faut décrire les phénomènes à la base du comportement plastique. Nous aborderons ensuite les modélisations macroscopiques des matériaux qui subissent une transformation de phase, en mettant l'accent sur la loi constitutive pour la plasticité de transformation que ces modèles permettent de formuler ;

- L'approche micromécanique qui prend en compte le comportement des constituants de l'élément de volume (grain, phase, composants d'un matériau composite) et par une opération de moyenne considérant leur agencement spatial et leurs interactions, détermine la loi du comportement

global. Nous aborderons ainsi dans une deuxième partie la spécificité des approches micromécaniques et les difficultés propres qu'elles font apparaître par rapport à la démarche précédente : choix d'une échelle pertinente des éléments constitutifs, comportement des éléments au sein de l'agrégat (qui diffère en général du comportement individuel), méthodologie et complexité du changement d'échelle. Le cas relativement classique du polycristal considéré comme un agrégat de grains sera considéré en premier lieu et nous résumerons les principaux modèles polycristallins existant dans la littérature.

Nous continuerons ensuite cette revue bibliographique par la présentation des approches utilisées pour la prévision du comportement mécanique d'un matériau biphasé stable. Nous nous attacherons à montrer la capacité des méthodes numériques, telles l'homogénéisation et la méthode des éléments finis à décrire ce comportement et les champs mécaniques locaux tels qu'ils résultent de l'état géométrique et mécanique des éléments composant la microstructure.

Nous consacrerons la dernière partie aux matériaux biphasés qui subissent une transformation de phases ; le comportement mécanique résultant fait apparaître une déformation de plasticité de transformation dont nous expliciterons les mécanismes microscopiques. Différents modèles ou simulations à l'échelle microscopique sont proposés dans la littérature pour décrire le comportement du matériau pendant la transformation de phase ; nous effectuerons une revue bibliographique de ces modèles en essayant de les classer relativement aux mécanismes qu'ils prennent en considération pour expliquer l'origine et le développement de la plasticité de transformation.

I - APPROCHE MACROSCOPIQUE

Un grand nombre de travaux ont été effectués au cours des dernières années sur le comportement mécanique des matériaux anélastiques et en particulier des métaux. Le développement des méthodes d'analyse numérique, tels les éléments finis, associé à celui des moyens de calcul ainsi que l'exigence d'une meilleure connaissance du comportement de structures parfois complexes ont entraîné une demande croissante d'équations constitutives précises et d'un solide contenu physique [1].

Parallèlement à cela, des progrès ont été réalisés concernant la caractérisation microstructurale et les mécanismes à la base de ces équations constitutives. Ainsi s'est développée une approche interdisciplinaire associant la mécanique des milieux continus et la métallurgie physique.

I.1. STRUCTURE GENERALE DES MODELES A VARIABLES INTERNES ET LOIS DE COMPORTEMENT

Les difficultés inhérentes à une telle association en vue de l'obtention d'un modèle constitutif complet et d'utilisation aisée concernent la structure générale des équations constitutives et la manière dont les informations microstructurales peuvent être utilisées.

Nous rappelons tout d'abord brièvement la structure générale des modèles à variables internes.

D'un point de vue mécanique, le comportement d'un matériau est décrit par une équation constitutive qui est une relation entre la contrainte σ et la déformation ϵ . Pour un matériau élastique, cette relation est indépendante du temps ou, de façon plus exacte, l'état de contrainte à l'instant t ne dépend que de la valeur de la déformation au même instant, soit $\sigma(t) = F(\epsilon(t))$.

Dès lors, cependant qu'une irréversibilité apparaît telle que l'apparition d'un écoulement plastique, la loi précédente devient une fonctionnelle $\sigma(t) = F(\epsilon(\tau))$ qui intègre toute l'histoire de la déformation. Une telle formulation est encore appelée héréditaire et s'emploie couramment en viscoélasticité.

Elle est cependant d'un intérêt limité lorsqu'on aborde les matériaux donnant lieu à comportement plastique (ou viscoplastique) et on lui préfère l'approche à variables internes [1].

La relation contrainte-déformation intègre la dépendance de l'histoire par l'état actuel d'un ensemble de variables d'état dites variables internes. Ces variables constituent une description macroscopique de l'état microstructural du matériau ; elles sont encore appelées variables cachées pour notifier leur caractère incontrôlable.

Chaque mécanisme microstructural peut ainsi être représenté par une variable interne associée. En plus de la loi constitutive (relation entre contrainte déformation et variables internes), un modèle à variables internes doit inclure une loi d'évolution pour chaque variable interne introduite. La thermodynamique des processus irréversibles fournit alors, par le biais du cadre des matériaux standards généralisés, un guide précieux pour l'obtention de telles lois [2,3,4].

Nous allons préciser le cadre thermodynamique des équations constitutives qui font intervenir le comportement et les propriétés du matériau employé. Ces lois gouvernent les transferts qui se produisent à l'intérieur du volume, soit le flux de chaleur ou de contrainte. Elles doivent être objectives (elles doivent satisfaire l'axiome d'indifférence matérielle) et vérifier le principe de causalité (elle ne dépendent que de l'histoire passée des phénomènes).

La formulation des lois constitutives repose alors sur le principe de l'état local par lequel on associe à chaque particule un système thermodynamique homogène de masse unité dont l'état est défini par les variables déformations et température pour un système élastique et un ensemble de variables supplémentaires appelées variables internes dans le cas de matériaux anélastiques. Les équations d'état décrivant le comportement réversible du système sont obtenues à partir du premier principe de la thermodynamique et du choix d'un potentiel (énergie interne ou énergie libre ψ). Ces équations d'état relient entre elles les variables flux (déformation et température) et forces (contrainte et entropie respectivement) associées et peuvent être explicitées pour une forme particulière du potentiel thermodynamique (généralement fonction quadratique des variables flux).

L'irréversibilité de comportement nécessite de compléter les équations d'état qui définissent les variables internes par des équations complémentaires qui gouvernent leur cinétique. Ces équations doivent de plus générer des processus thermodynamiquement admissibles, i.e. qui satisfont à l'inégalité de Clausius-Duhem. On définit alors un potentiel des dissipations ϕ^* qui fournit des relations de normalité entre les variables forces et flux (par exemple les lois de normalité en plasticité). Le matériau est alors dit standard généralisé (MSG) et les processus ainsi décrits sont thermodynamiquement admissibles. En fait, l'appartenance du matériau à la classe des MSG dérive d'un principe plus fort que le second principe, qui est le principe du maximum de travail de dissipation ; de manière analogue, les lois de la plasticité découlent du principe du travail plastique maximum.

La principale difficulté dans l'écriture des lois constitutives consiste évidemment dans la définition et l'identification des variables internes, qui peuvent être de nature géométriques (longueur d'une fissure ou surface endommagée) ou physiques (orientation du réseau cristallographique d'un grain). Chaque variable interne représente à l'échelle macroscopique un phénomène se produisant à l'échelle microscopique (cachée). Les variables observables (déformation et température) et internes ainsi définies déterminent l'état de l'élément de volume du matériau.

I.2. MATERIAUX MONOPHASES

I.2.1. Illustration de la démarche: cas de la plasticité couplée à l'endommagement

Nous avons choisi d'illustrer la méthodologie de formulation des équations constitutives dans le cas des matériaux métalliques donnant lieu à des phénomènes couplés entre la plasticité et l'endommagement, étudiés par D.MARQUIS [5]. Nous rappelons tout d'abord quelles variables internes sont choisies pour représenter chaque mécanisme ainsi que les différents types de couplages existant entre ces mécanismes.

La plasticité nécessite d'introduire le tenseur des déformations plastiques comme première variable interne ; elle correspond physiquement au mouvement irréversible des dislocations. Deux variables internes supplémentaires sont également introduites pour décrire l'érouissage qui résulte de l'accumulation des dislocations et de la création de contraintes internes. Une variable scalaire r décrit l'érouissage isotrope et un tenseur du second ordre $\underline{\alpha}$ introduit par PRAGER décrit l'érouissage cinématique. Il faut noter cependant que ces variables ne sont en général pas suffisantes pour décrire dans le cas de déformations multiaxiales complexes l'érouissage latent à l'échelle microscopique qui conduit à des changements de forme de la surface d'écoulement.

De même que la plasticité décrit à l'échelle du milieu continu des phénomènes discrets à l'échelle du monocristal, le phénomène d'endommagement est lié à l'existence de microfissures ou de pores qui sont des discontinuités géométriques du matériau. Une variable macroscopique continue couramment utilisée pour l'endommagement est l'aire D des microdéfauts contenus dans une surface unité associée à un point matériel et une direction normale donnés.

Un couplage direct entre deux mécanismes décrits par des variables internes v_i et v_j (par exemple la détérioration du matériau modifie sa rigidité) se traduit de façon formelle par une dérivée seconde $\frac{\partial^2 \psi}{\partial v_i \partial v_j} \neq 0$. L'équation d'état de l'élasticité s'obtient par $\sigma = \rho \frac{\partial \psi}{\partial \epsilon^e}$, où $\rho \psi = \frac{1}{2} A : \epsilon^e : \epsilon^e (1-D)$ et A est le tenseur d'élasticité. Soit $\sigma = A : \epsilon^e (1-D)$, ce qui revient à introduire un tenseur de rigidité effectif égal à $A (1-D)$.

Un couplage indirect entre deux mécanismes se traduit par l'influence d'une variable interne sur le taux de variation d'une autre. Les variables internes du second mécanisme sont alors introduites comme paramètres dans le potentiel de dissipation.

La deuxième étape consiste alors à définir un potentiel thermodynamique, fonction scalaire des variables d'état (observables et internes), d'où découle la définition des variables forces associées ; il prend en compte les couplages directs entre variables d'état. Le tableau 1 ci-dessous présente les variables associées ainsi définies, accompagnées de leur signification.

Variables d'état		Variables associées	
observable	interne		
ϵ		σ	tenseur des contraintes
T		s	entropie
déformation plastique	ϵ^p	$-\sigma$	contrainte
	r	R	rayon de la surface d'écoulement
	α	X	centre de la surface d'écoulement
	D	Y	taux de relaxation d'énergie élastique

Tableau 1 : variables thermodynamiques (selon D.MARQUIS, [5])

La dernière étape précédant l'écriture des lois constitutives consiste à écrire un pseudo-potentiel de dissipation ψ^* fonction des variables forces et qui définit leur dualité avec les variables flux (tableau 2).

Variables flux	Variables forces
ϵ^p	σ
$-r$	R
$-\alpha$	X
$-D$	Y
$-q$	$\text{grad } T$
T	s

Tableau 2 : variables de dissipation (selon D.MARQUIS, [5])

Ce potentiel fait apparaître les couplages indirects de variables flux qui interviennent comme paramètres dans celui-ci. Les lois de comportement s'obtiennent alors par la règle de normalité.

La particularisation des potentiels thermodynamiques introduits est en général une tâche difficile car elle dépend de résultats expérimentaux qui doivent être en nombre suffisant pour identifier les paramètres indéterminés que les lois de comportement font apparaître. Un des avantages de l'approche phénoménologique est que les lois de comportement sont choisies a priori compatibles avec les nécessités du calcul des structures et sont donc directement intégrables dans une simulation numérique. Cette approche a été étendue au cas de la viscoplasticité couplée à l'endommagement, puis de la viscoplasticité couplée au vieillissement.

I.2.2. Approche par les théories de jauge

Une approche radicalement différente a été développée récemment dans le cas de l'endommagement par D.C.LAGOUDAS [6], fondée sur la théorie de jauge des défauts dans les solides [7]. Une telle approche semble prometteuse comme voie de substitution aux modèles à variables internes et devrait pouvoir être étendue à une grande variété de phénomènes.

I.3. MATERIAUX MULTIPHASES

La complexité de la description est encore accrue lorsque des changements de phase se produisent dans le matériau. Elles conduisent à des couplages entre la transformation de phase, le

comportement mécanique et l'état thermique du matériau [8,9]. Une généralisation des approches par variables internes (décrites ci-dessus) au cas des matériaux multiphasés a été proposée par J.GIUSTI et D.RADENKOVIC [10,11]. Cette approche que nous allons décrire brièvement tient de plus compte du phénomène de plasticité de transformation propre aux changements de phases.

Dans un souci de simplification, les auteurs considèrent les variables température et contrainte comme étant communes à toutes les phases (modèle de Maxwell); ce sont donc les variables observables. Le potentiel total du mélange est décomposé en une partie élastique qui satisfait à une loi des mélanges et une partie inélastique G^i dans laquelle intervient un potentiel d'interaction entre les phases ψ : $G^i = G^p(T, s_{ij}, \xi_{ij}) + \psi(x_i, T)$. x_i est un des taux de phase et T la température ; s_{ij} représente le déviateur des contraintes. Les auteurs se placent dans le cadre de la thermodynamique linéaire des processus irréversibles et choisissent les proportions de phase x_i ainsi que la déformation inélastique déviatorique moyenne ξ_{ij} comme variables internes. Cette dernière variable représente les phénomènes de plasticité classique (du à une variation de contrainte) et de plasticité de transformation (plasticité liée à un avancement de transformation). L'application du second principe permet d'exprimer le taux de dissipation $D = \rho \frac{\partial G}{\partial \xi_{ij}} \dot{\xi}_{ij} + \rho \frac{\partial G}{\partial x} \dot{x} \geq 0$, où G est le potentiel énergie libre.

Les forces thermodynamiques associées à x et ξ_{ij} sont définies par : $X = \rho \frac{\partial G}{\partial x}$ et $s_{ij} = \rho \frac{\partial G}{\partial \xi_{ij}}$ et l'inégalité précédente s'écrit donc $D = X \dot{x} + s_{ij} \dot{\xi}_{ij} \geq 0$. Les auteurs supposent ensuite les lois d'évolution des variables internes couplées par des relations linéaires :

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \lambda_1 X + \mu_{ij} s_{ij} \text{sign}(x) \\ \dot{\xi}_{ij} &= \left(\lambda_2 - \frac{\mu_{ij} \mu_{ij}}{\lambda_1} \right) s_{ij} + \frac{\mu_{ij}}{\lambda_1} | \dot{x} |. \end{aligned}$$

On déduit de la dernière équation que la déformation anélastique du mélange se décompose en une déformation de plasticité classique (premier terme) et une déformation plastique supplémentaire liée à l'avancement de la transformation ; cette déformation dite de plasticité de transformation se produit pour des niveaux de contrainte inférieure à la limite d'élasticité du matériau. D'après les faits expérimentaux, la déformation de plasticité de transformation varie linéairement avec une contrainte appliquée uniaxiale et est une fonction de l'avancement de la transformation. Une généralisation de cette loi à des sollicitations triaxiales permet finalement à l'auteur d'identifier le terme de plasticité de transformation à : $\dot{\eta}_{ij} = \frac{\mu_{ij}}{\lambda_1} | \dot{x} | = q(x) \text{sign}(\dot{x}) \dot{x} s_{ij}$ et cette relation montre qu'elle vérifie également une loi de normalité (proportionnalité au déviateur des contraintes). Ici également, la puissance de l'approche phénoménologique a été mise à profit par l'auteur qui a intégré les lois de comportement obtenues dans une simulation numérique de problèmes de trempe et de soudure dans le cas des aciers.

En conclusion de cette présentation de l'approche phénoménologique, les modèles obtenus permettent de décrire le comportement des matériaux en intégrant une grande complexité de phénomènes physiques dont l'effet Bauschinger, le durcissement cyclique, l'effet de mémoire du trajet de chargement en plasticité, le vieillissement et la restauration en viscoplasticité, les couplages entre ces phénomènes et les effets liés à l'existence d'une transformation de phase, tels la plasticité de transformation.

Cependant, les modèles à variables internes nécessitent l'introduction de variables cachées supplémentaires dans l'expression du potentiel thermodynamique. Une fois cette expression postulée, ainsi que l'expression des lois d'évolution des variables internes, il faut identifier les paramètres inconnus que ces lois contiennent, ce qui témoigne du caractère heuristique de la démarche. De plus, l'ensemble de la procédure d'expérimentation et d'identification doit être recommencé chaque fois que l'on change de matériau et le pouvoir prédictif des approches phénoménologiques reste limité dès que l'on sort du domaine d'identification (d'autres mécanismes physiques négligés peuvent devenir prépondérants suivant les conditions d'emploi du matériau).

On peut néanmoins espérer diminuer le caractère empirique de ces modèles et leur associer un meilleur contenu physique si l'on est capable d'ouvrir la boîte noire que constitue le point matériel dans les approches précédentes. L'interaction entre les modèles phénoménologiques décrits précédemment et l'étude des mécanismes microstructuraux (à une échelle plus fine que celle du point matériel) implique un processus mettant en jeu une transition de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique. Cette transition peut alors s'effectuer par une analyse micromécanique, à la condition que l'"univers microscopique" puisse être décrit en termes de mécanique des milieux continus (le problème est alors purement mécanique).

II - APPROCHE MICROMECHANIQUE

II.1. METHODOLOGIE DE LA TRANSITION D'ECHELLE

L'approche micromécanique vise à déduire le comportement d'un agrégat (par ex. du polycristal) à partir d'une modélisation des phénomènes inhérents à chacun de ces constituants (le grain dans le cas du polycristal). La principale difficulté réside dans le choix de l'échelle de description microstructurale, qui est très étendue puisqu'elle couvre le niveau de la maille cristalline jusqu'à celui du domaine de phase. Potentiellement, la modélisation est d'autant plus puissante que

l'échelle de départ est fine ; elle se heurte cependant aux difficultés rencontrées actuellement dans la description du comportement collectif de tels éléments ainsi qu'à la complexité des opérations de moyenne [12]. Aussi est-il nécessaire d'adopter un certain degré de description phénoménologique à l'échelle microscopique qui permette par ailleurs d'utiliser des outils mécaniques relativement macroscopiques tels que glissements plastiques, cissons résolues, modules d'écrouissage. Cette nécessité est encore renforcée par l'objectif visé qui est l'obtention de lois de comportement quantitatives, exprimées dans le langage de la mécanique des milieux continus (formalisme tensoriel objectif).

II.1.1. Modélisation micromécanique du comportement du polycristal

Les considérations précédentes impliquent dans le cas du polycristal que l'on considère le grain comme l'élément de départ du changement d'échelle, en renonçant à analyser sa structure interne. La deuxième difficulté est liée à la prise en compte de la distribution géométrique des grains (position, forme et orientation cristallographique de chaque grain) qui, à l'exception des assemblages périodiques, nécessite un traitement statistique : l'objectif est alors d'obtenir la fonction de texture et éventuellement des indications moyennes sur les formes des grains (taille ou ellipticité).

L'étude du comportement du polycristal à partir de celui du monocristal relève de la problématique de l'homogénéisation des milieux hétérogènes présentant une structure aléatoire dont les trois étapes principales sont développées ci-après, [12] :

i) Définition de l'élément de base (grain) constitutif du matériau, de son comportement mécanique et de la distribution statistique des éléments au sein de l'agrégat. L'orientation cristalline du grain est choisie comme paramètre essentiel définissant la microstructure (les grains de même orientation sont considérés indiscernables). La loi de Schmid généralisée avec matrice d'écrouissage relie les taux de cission réduite critique sur chaque système de glissement $\dot{\tau}_c^g$ et ceux des glissements plastiques sur les systèmes actifs pour le chargement envisagé, soit $\dot{\tau}_c^g = h^g \dot{\gamma}$. La cission réduite τ^g est reliée à l'état de contrainte imposé Σ selon $\dot{\tau}^g = N^g \dot{\Sigma}$, où N^g est la matrice d'orientation du grain g . On obtient alors la relation contrainte-déformation du grain à laquelle on adjoint la loi d'évolution du taux de rotation plastique.

ii) L'étape de localisation a pour objectif de modéliser les fluctuations de déformations et de contraintes internes d'un grain à l'autre en fonction du chargement imposé, soit $\dot{\epsilon} = A \dot{E}$ et $\dot{\sigma} = B \dot{\Sigma}$, où E et Σ sont les champs de déformation et de contrainte imposés respectivement et A , B les opérateurs tensoriels (quatrième ordre) de localisation et de concentration respectivement.

Dans cette étape est introduit le modèle polycristallin dont l'écriture générale est de la forme $\sigma = \langle \sigma \rangle + K\mu (\langle \varepsilon^p \rangle - \varepsilon^p)$, où $\langle \cdot \rangle$ désigne l'opérateur de moyenne et ε^p la déformation plastique du grain. La forme particulière de tel ou tel modèle est contenue dans la valeur du coefficient K et l'expression précédente condense ainsi de manière formelle les différents modèles, présentés schématiquement dans le Tableau 3 ci-dessous. Nous rappelons brièvement la situation physique associée à chacun d'entre eux.

Valeur du coefficient K	Modèle associé
$K \rightarrow \infty$	Taylor (ε^p uniforme)
$K = 2$	Lin-Taylor en élasticité isotrope (déformation totale uniforme)
$K \approx 1$	Kröner (accommodation élastique) pour des inclusions sphériques et une élasticité isotrope
$K < 0.1$	Modèles autocohérents pour des grains sphériques sous chargement radial (accommodation élastoplastique)
$K = 0$	Modèle statique (contrainte uniforme)

Tableau 3 : récapitulatif des principaux modèles polycristallins

Le modèle de Taylor suppose l'uniformité de la déformation plastique dans un cadre de comportement rigide plastique et il fournit une borne supérieure de la limite d'écoulement que l'on veut estimer. A l'opposé, le modèle statique ($K=0$) basé sur l'uniformité des contraintes encadre la limite d'écoulement par valeur inférieure. Historiquement, il a cependant été moins utilisé que le modèle de Taylor et les efforts ont porté sur l'amélioration de ce dernier en vue d'une meilleure adéquation aux résultats expérimentaux.

Une première extension a été obtenue par Lin qui a supposé l'uniformité de la déformation totale, ce qui autorise une fluctuation (très faible) de la déformation plastique entre grains voisins.

Alors que les modèles de Lin-Taylor et Taylor ont pour objectifs essentiels de décrire l'écoulement plastique du polycristal, le schéma autocohérent vise en plus à estimer l'état de contrainte d'un grain subissant une déformation plastique différente de la déformation macroscopique. La situation géométrique est ici celle d'un agrégat parfaitement désordonné, alors que les modèles statiques et de Taylor décrivent un agencement de grains très ordonné. Le principe du schéma autocohérent consiste à remplacer l'analyse des interactions mécaniques entre grains par celle d'un grain avec un milieu fictif homogène équivalent au milieu hétérogène initial. Ce modèle a été développé (par Kröner, Berveiller et Zaoui notamment) à partir de la solution d'Eshelby du problème d'une inclusion plastique dans une matrice infinie. Actuellement, les efforts portent sur le développement de ces méthodes en grandes déformations, tant en élastoplasticité qu'en viscoplasticité [12] ainsi que sur la prise en compte des premiers voisins.

iii) La dernière étape d'homogénéisation proprement dite exprime les grandeurs globales comme moyennes des grandeurs locales : $\dot{\mathbf{E}} = \langle \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle$ et $\dot{\boldsymbol{\Sigma}} = \langle \dot{\boldsymbol{\sigma}} \rangle$ dans lesquelles on intègre les lois de localisation exprimées lors de l'étape précédente. On obtient alors la loi de comportement du polycristal, par exemple $\dot{\boldsymbol{\Sigma}} = \mathbf{L}\dot{\mathbf{E}}$ qui se présente en général sous la forme d'une équation intégrale complexe et qu'il faut pouvoir résoudre analytiquement.

Si ces modèles ne sont évidemment pas aussi simples à manipuler que les modèles macroscopiques, ils sont en revanche plus riches en information microstructurale. Leurs développements principaux concernent une meilleure prise en compte de la distribution spatiale des grains ainsi que la description de l'hétérogénéité de la déformation à l'intérieur du grain lui-même. Les limites en sont cependant atteintes dès que la structure microscopique est si complexe qu'on ne peut pas faire ressortir de mécanismes physiques prépondérants.

II.1.2. Une alternative : l'approche 'macro-micro'

Une troisième voie qui se présente comme un compromis entre les approches macroscopiques et micro-macro a été empruntée plus récemment par G.CAILLETAUD [13]. Les lois de comportement macroscopiques sont appliquées directement à l'échelle microscopique et la structure polycristalline est prise en compte par une représentation de type autocohérent. Les lois d'écrouissage sont écrites en viscoplasticité au niveau du système de glissement. A cette échelle, la variable de contrainte est la contrainte résolue τ^s définie par $\tau^s = m^s : \sigma$, où $m_{ij} = \frac{1}{2} (m_{ij} + n_{ji})$ est le tenseur d'orientation (pour le système s). La variable de déformation plastique est la vitesse de glissement $\dot{\gamma}_v^s$, d'où l'on exprime la vitesse de déformation viscoplastique macroscopique $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^v = \sum m^s \dot{\gamma}_v^s$ en sommant sur l'ensemble des systèmes de glissement du grain. Les lois de comportement du grain établissent une relation entre $\dot{\gamma}_v^s$ et τ^s en considérant une variable isotrope r et une variable cinématique x pour chaque système de glissement. La loi d'écoulement microscopique s'écrit alors

$$\dot{\gamma}_v^s = \left\langle \frac{\tau^s - x^s - r^s - K^s}{K} \right\rangle \text{sgn}(\tau^s - x^s) \text{ qui formalise un modèle viscoplastique avec}$$

seuil qui prend en compte un effet Bauschinger local. L'auteur suppose de plus que les interactions entre systèmes de glissement portent uniquement sur la partie isotrope de l'écrouissage.

Les principales étapes de la modélisation sont représentées figure 1.

L'étape de localisation s'effectue en considérant le schéma autocohérent écrit avec les variables directement intégrées, soit $\sigma^g = \Sigma + A \left(E_p - \varepsilon_p^g \right)$.

La reconstruction de la déformation macroscopique a lieu en deux étapes, tout d'abord en sommant les contributions des différents systèmes pour un grain donné, puis par sommation sur l'ensemble des grains et la texture est décrite par une pondération (fraction volumique) de chaque grain.

Ce modèle a été utilisé pour la modélisation de superalliages monocristallins à base de nickel. Il permet de simuler le comportement mécanique sous sollicitation monotone et cyclique à différentes températures pour différentes orientations du matériau.

Il a aussi été implanté dans un code de calcul aux éléments finis pour prévoir le comportement de structures (par exemple un tube soumis à un chargement en torsion), en particulier les hétérogénéités de déformation liées au comportement anisotrope du matériau. Les résultats calculés sont en bon accord avec les résultats expérimentaux.

Cette approche représente donc selon l'auteur un bon compromis entre les possibilités de modélisation et le respect du comportement physique microscopique.

II.2. MODELES MICROMECHANIQUES DU BIPHASE STABLE

Nous présentons dans ce paragraphe les modèles analytiques et les simulations qui ont été développées pour décrire le comportement mécanique d'un matériau biphasé stable, à partir des propriétés de ses constituants. Parmi les matériaux qui ont fait l'objet de telles études, on distingue les composites artificiels (à fibre, à structure sandwich) -dont la microstructure est suffisamment simple pour pouvoir être prise en compte directement - et les alliages 'naturels' qui eux nécessitent une modélisation géométrique préalable (par exemple, la forme des grains dans un polycristal) - et présentent généralement une périodicité spatiale. Par conséquent, nous abordons l'étude de leur comportement en premier lieu.

II.2.1. Matériaux composite et homogénéisation

Les méthodes d'homogénéisation ont été essentiellement développées dans le cas de matériaux composites. Lorsque le comportement des deux 'phases' reste purement élastique, de multiples méthodes analytiques sont employées, telles la loi des mélanges (sur les propriétés) qui néglige cependant complètement la microstructure (même la direction des fibres n'est pas considérée) ou encore la méthode autocohérente (appliquée originellement aux composites par R.Hill) qui s'appuie ici sur la solution du problème d'Eshelby pour une fibre ellipsoïdale incluse dans un milieu homogène équivalent.

Ces méthodes analytiques ne décrivent cependant correctement le comportement du composite que dans la situation où les interactions entre fibres sont négligeables (cas de fibres très diluées). Or,

dans le cas général (fraction volumique des fibres supérieure à 15%), des interactions mécaniques existent, de manière récursive : entre une fibre et la matrice environnante, puis entre cette même fibre et les champs de contraintes générés par les autres fibres, et ainsi de suite, qui rendent la résolution analytique complexe.

L'homogénéisation par développement asymptotique s'avère alors un outil particulièrement bien adapté à ce type de problème où la géométrie est périodique [14,15] et dont nous rappelons brièvement les principes. Le concept de base est de séparer la dépendance de toute fonction par rapport aux variables de position en une partie à variations spatiales lentes sur le composite et une autre fluctuant fortement à l'échelle locale et périodique sur la cellule unité choisie pour la modélisation. Toute fonction $f(x)$ est ainsi dépendante de deux variables: la position x dans le composite et la position dans la cellule $\left(\frac{x}{\epsilon}\right)$, où ϵ est un petit paramètre qui représente le rapport d'échelle entre les dimensions de la cellule et celles du matériau au niveau macroscopique. On effectue ensuite un développement asymptotique de $f\left(x, \frac{x}{\epsilon}\right)$ et on passe à la limite $\epsilon \rightarrow 0$ (cas du matériau comportant un nombre infini de cellules). L'identification des coefficients des puissances successives de ϵ fournit alors des expressions pour les champs de contrainte locaux et globaux.

Dans le cas élastique, la résolution du problème local peut être effectuée avant celle du problème global. Par contre, cela n'est plus possible lorsque le comportement de la matrice (ou les fibres) est élastoplastique car les déformations plastiques en chaque point de la cellule de base (nombre infini de variables internes) doivent être connues pour la résolution du problème global et une solution (en théorie) n'existe que lorsque la matrice est parfaitement plastique [14].

Lorsque le composite n'est plus périodique (les fibres sont distribuées de manière aléatoire), on peut utiliser une cellule simple dans laquelle on peut considérer que la microstructure est distribuée de façon aléatoire. Cela implique de choisir une cellule de taille suffisamment importante pour qu'il en soit effectivement ainsi et conduit en général à un calcul très pénalisant. Une alternative consiste à utiliser des coefficients aléatoires oscillant dans le développement asymptotique. Les théorèmes d'existence et d'unicité de la solution ont été établis dans ce cas, mais la solution du problème global nécessite l'évaluation d'une série infinie, ce qui rend la méthode peu utilisable en pratique. Un exposé plus détaillé de ces problèmes peut être trouvé dans [16].

Un modèle analytique a été développé par LEBLOND [17] pour décrire le comportement plastique homogénéisé d'un mélange austénite-martensite stable. Nous considérons ici uniquement le cas de sollicitations purement mécaniques (à température constante), l'auteur ayant également considéré la réponse du biphase sous une température variable. Dans le cas le plus complexe où le matériau se transforme tout en étant sollicité thermomécaniquement, l'auteur a montré que la

déformation macroscopique inélastique du mélange se décompose selon : $\dot{E}^P = \dot{E}_\Sigma^{cp} + \dot{E}_T^{cp} + \dot{E}^{TP}$; les deux premiers termes du membre de droite décrivent ce que l'auteur appelle la plasticité classique, i.e. la part de plasticité macroscopique qui est due aux variations des variables observables (température ou/et contrainte appliquée). Le dernier terme est la déformation de plasticité de transformation qui résulte de l'évolution de la microstructure et qui apparaît comme une déformation plastique supplémentaire à l'échelle macroscopique.

L'auteur suppose que seul l'austénite subit des déformations plastiques (comportement rigide), alors que la martensite qui est une phase plus dure reste élastique. Le comportement plastique est régi par le critère de Von Mises et la loi d'écoulement de Prandtl-Reuss et l'auteur se place dans une hypothèse de plasticité parfaite. Pour des contraintes appliquées faibles, l'auteur suppose que les déviateurs de contrainte moyens dans chaque phase sont égaux et identiques au déviateur des contraintes appliquées.

Il obtient alors une expression relativement simple pour la déformation de plasticité classique \dot{E}_Σ^{cp} pour une sollicitation triaxiale : $\dot{E}_\Sigma^{cp} = \frac{3(1-z)}{2\sigma_{1y}} \frac{1}{zE} S \dot{\Sigma}^{eq}$, dans laquelle z est la fraction volumique de martensite, S le déviateur macroscopique des contraintes, Σ^{eq} la contrainte macroscopique équivalente et σ_{1y} la limite d'élasticité de l'austénite.

Pour une sollicitation uniaxiale, l'expression précédente est intégrée selon :

$$\left(E_\Sigma^{cp}\right)_{xx} = \frac{1-z}{\sigma_{1y}} \frac{1}{zE} \Sigma_{xx}^2, \text{ ce qui montre que la plasticité macroscopique est une fonction}$$

quadratique de la contrainte appliquée et tangente à l'origine à la réponse élastique du biphasé (pente E). L'auteur explique cette forme parabolique par l'orientation progressive du déviateur des contraintes microscopiques dans la direction du déviateur de la contrainte appliquée.

L'auteur considère également le cas de contraintes appliquées très élevées, mais que nous ne présenterons pas dans ce mémoire.

II.2.2 Simulations par éléments finis

Indépendamment des méthodes d'homogénéisation qui sont d'emploi délicat en élastoplasticité, des approches micromécaniques utilisant la méthode des éléments finis ont été développées pour décrire le comportement global de composites à matrice métallique.

A titre d'illustration des possibilités de la méthode, nous présentons tout d'abord la modélisation du comportement lors du refroidissement rapide d'un composite à fibres céramique (cylindriques) incluses dans une matrice métallique telle que PH.JARRY, D.TOITOT, B.JANIN l'ont développée [18]. Le choix de la cellule unité est effectué en tenant compte des symétries de la géométrie (fig.2) qui permettent dans le cas présent de ne représenter qu'un seizième de fibre (il en résulte une réduction significative du temps de calcul). Les auteurs soulignent que la possibilité d'utiliser de telles isométries repose sur l'invariance des composantes du tenseur d'élasticité par ces dernières. Des conditions limites appropriées doivent ensuite être introduites pour représenter les interactions entre une cellule et ses voisins.

Les auteurs soulignent également l'importance de la loi de comportement introduite pour chaque constituant (dans le cas présent élastoplastique) et d'un choix adéquat des propriétés mécaniques et des coefficients de dilatation, qui dépendent de la température.

Les résultats obtenus permettent d'étudier l'effet de différents chemins thermiques sur les distributions de contraintes résiduelles et de déformations plastiques. La figure 3 montre les évolutions de déformation plastique cumulée le long de la fibre et à son extrémité. Un exemple de champ de contraintes résiduelles (contrainte équivalente de Von Mises) est donné sur la figure 4.

Une approche similaire a été menée par J.BÖHM et F.G.RAMMERSTORFER qui étudient l'anisotropie plastique macroscopique induite par les champs locaux de contraintes et de déformations plastiques générés [19] par un refroidissement rapide du matériau. Le modèle élément fini repose sur les hypothèses suivantes (fig.5) :

- l'état de déformation est supposé plan ;
- les fibres sont disposées périodiquement, ce qui permet d'étudier le comportement global à partir de celui d'une cellule de base, de façon détaillée ;
- la matrice est supposée élastoplastique ;
- un contact parfait est supposé exister à l'interface fibre / matrice.

La microstructure à l'intérieur de la cellule est ensuite discrétisée par des éléments isoparamétriques à quatre noeuds (fig.5b). Les bords de la cellule sont supposés rester droits et parallèles pour des états de contrainte appliquée ne comportant pas de cisaillement. Le matériau étant statistiquement à isotropie transverse, il est toujours possible de se ramener à cette situation (après transformation de l'état de contrainte dans un système d'axes principaux).

La cellule est soumise à une traction suivie d'une compression ou d'une traction dans la direction perpendiculaire. Les réponses correspondantes du matériau présentées figure 6 montrent un effet prononcé d'écroutissage qui est de plus anisotrope. Cet effet Bauschinger macroscopique est ici (matrice parfaitement plastique) dû uniquement aux interactions entre fibres et matrice. Les auteurs obtiennent également des résultats locaux de contraintes (iso Von Mises) pour les différents cas de chargement (fig.7).

Ces approches ont néanmoins des limitations, les principales étant l'hypothèse de périodicité et l'adhésion supposée parfaite de la fibre à la matrice (continuité du champ de déplacement à l'interface fibre/matrice).

L'influence d'une possibilité de glissement tangentiel à l'interface des deux constituants sur les coefficients effectifs du composite a été étudiée par F.LENE et D.LEGUILON [20]. Les auteurs montrent tout d'abord que le problème mathématique admet une solution unique moyennant le choix d'un cadre fonctionnel adéquat ; les conditions de glissement sont modélisées par des éléments de contact le long de l'interface. Les résultats obtenus mettent en évidence un seuil de glissement au-delà duquel se produit une dégradation rapide de la rigidité du matériau. Aussi peut-on considérer ce travail comme une démarche préliminaire à l'étude de la notion de défaut au sein d'un matériau composite.

Les exemples précédents montrent la puissance de la méthode des éléments finis dans la représentation du comportement élastoplastique des matériaux composites et dans la connaissance qu'elle apporte des gradients locaux de contrainte et de déformation. Historiquement, elles furent appliquées à ce type de problème au début des années 1970, lorsque certains auteurs commencèrent à s'intéresser non seulement au comportement global du matériau, mais aussi aux distributions locales de contraintes et de déformations.

Ainsi B.SUNDSTRÖM [21] propose-t-il en 1973 de prendre en compte la distribution réelle des contraintes et des déformations telle qu'elle résulte des sollicitations appliquées à la microstructure et considère à titre d'exemple un cermet WC-Co sollicité en compression. Le modèle établi dans une hypothèse de géométrie plane vise à représenter de manière adéquate la morphologie des grains (obtenue par microscopie électronique). Chaque constituant est maillé par des éléments triangulaires et des propriétés mécaniques leurs sont affectées (comportement élastoplastique). A l'échelle macroscopique, la courbe contrainte-déformation est en accord raisonnable avec l'expérience et les résultats locaux établissent l'hétérogénéité de déformation plastique. Cette méthode a été étendue par le même auteur aux aciers constitués de ferrite et de martensite.

L'adéquation simulation-expérience est conditionnée par la prise en compte d'un certain nombre de paramètres morphologiques et mécaniques que Y.TOMOTA et I.TAMURA mentionnent dans [22] :

- fraction volumique du constituant le plus dur ;
- taille du grain pour chaque constituant ;
- forme et distribution des grains , la distribution des phases pouvant conduire à trois situations distinctes (deux phases continues, deux phases discontinues et une phase continue et l'autre discontinue) ;
- propriétés élastoplastiques de chaque constituant ;
- énergie et résistance de l'interface.

Une simulation semblable à celle de SUNDSTRÖM a été développée par ANKEM et MARGOLIN pour des biphasés α - β de Ti-Mn [23], les particules de phase molle α étant incluses dans une matrice dure β . Les données d'entrée concernent d'une part la représentation de la géométrie des phases (fig.8) et d'autre part l'affectation de propriétés mécaniques pour chaque phase. La structure est maillée par des éléments triangulaires en 2D (contraintes planes) et les auteurs ont étudié la réponse mécanique du matériau pour différentes fractions volumiques de phase α , différentes tailles et formes des particules en associant la phase α aux entités géométriques du maillage (triangles) de différentes manières.

La résolution du problème mécanique nécessite d'introduire de plus des conditions limites cinématiques et statiques. Les auteurs appliquent une contrainte de traction uniforme distribuée selon l'axe CD (fig.8). Les conditions limites cinématiques sont déterminées en fonction des conditions de symétrie de la cellule représentée. Ici, elle décrit la moitié d'une coupe longitudinale d'un échantillon cylindrique dont la ligne AB est un diamètre. Par conséquent, les déplacements des noeuds de cette ligne sont bloqués dans la direction perpendiculaire. De plus, le noeud J est complètement bloqué en translation pour éviter les déformations de solide rigide. Les degrés de liberté des noeuds de la ligne d'application de la contrainte (ligne CD) sont couplés de façon à avoir le même déplacement suivant Y. Des incréments de charge sont appliqués, d'où résultent des contraintes et des déformations locales dans chaque élément. On obtient également à chaque pas de charge la déformée macroscopique ; les diagrammes contrainte-déformation ainsi obtenus ont été comparés aux mesures expérimentales pour différentes fractions de phase α (fig.9) et l'adéquation entre elles est satisfaisante. Des résultats locaux issus de cette simulation sont à titre d'illustration les contraintes longitudinales et transversales le long de la ligne GG de la figure 10. Comme on peut s'y attendre, une relaxation des contraintes se produit dans la phase la plus molle (α). Les auteurs concluent sur la nécessité d'une meilleure prise en compte de la loi de comportement réelle de chaque phase (en particulier l'anisotropie) ainsi que de l'importance du comportement à l'interface.

Au lieu de s'intéresser à une représentation détaillée (plane en général) de la microstructure, certains auteurs considèrent des modèles stylisés 3D qui prennent en compte la répartition spatiale des phases et substituent au matériau réel un matériau périodique formé de mailles parallélépipédiques dont les arêtes sont parallèles aux axes principaux de la sollicitation. Ces mailles doivent avoir des éléments de symétrie compatibles avec ceux du matériau réel, une structure interne ayant les caractéristiques essentielles de la microstructure réelle (fraction volumique, taille et forme des constituants) ; pour des matériaux isotropes à l'échelle microscopique, cela implique que la maille soit cubique.

Une simulation de ce type a été développée pour l'établissement des courbes de traction d'alliages Fe-Ag équivolumiques par C.T.DE MONTPREVILLE [24]. Les situations de phases discontinues et continues ont été abordées (fig.11 a et b respectivement).

Un bon accord est obtenu entre les courbes de traction expérimentales et celles simulées (fig.12). Alors que ces courbes montrent une faible dépendance vis à vis du type de répartition spatiale des phases, les distributions locales de contraintes et de déformations plastiques (fig.13) y sont en revanche très sensibles.

Ce modèle a également été appliqué à des alliages Cu-Ag et Cd-Zn équivolumiques par L.DURAND [25] et un net désaccord apparaît alors entre la simulation et l'expérience (fig.14 a,b). Les auteurs mettent cet écart sur le compte d'une insuffisance de la mécanique des milieux continus et concluent sur la nécessité de faire appel à la théorie des dislocations.

Une approche numérique a été développée par LEBLOND [17] afin de tester la validité des hypothèses faites dans le modèle analytique que nous avons présenté dans le paragraphe précédant et pour comparer les évolutions analytiques et simulées obtenues pour la plasticité macroscopique.

A cette fin, un volume représentatif de forme cubique est maillé par 125 éléments. Les deux phases sont distribuées de manière aléatoire dans ce volume, pour différentes fractions volumiques de martensite (12,5% ; 25% ; 50% ; 75%). L'état mécanique initial est calculé en affectant aux éléments de martensite un changement de volume et les propriétés de la martensite. Les éléments d'austénite reçoivent également des propriétés spécifiques.

Des conditions limites de contact sans friction sont imposées sur trois faces adjacentes (absence de déplacement normal au plan), de telle sorte que le volume discrétisé représente en réalité un huitième d'un cube de 1000 éléments. Ce volume est ensuite soumis à un essai de traction.

L'auteur pose le problème de l'équivalence du choix des conditions limites liée à la finesse de la discrétisation. Numériquement, des problèmes de convergence apparaissent si les faces du cube orthogonales à la direction de traction sont soumises à une force imposée, car un écoulement plastique illimité se produit dans les coins du cube, dû à l'hypothèse de comportement plastique parfait ainsi qu'à l'absence de matériau adjacent qui confinerait la plasticité dans les coins. Ce phénomène ne se produit pas si la frontière du cube est soumise à un déplacement uniforme et les différentes conditions limites ne sont donc pas équivalentes.

Dans la théorie de Hill et Mandel, l'équivalence des conditions limites est satisfaite si le volume représentatif est suffisamment grand pour être macroscopiquement homogène (principe de Saint Venant). Dans le cas présent, la non équivalence des conditions limites est liée au fait que le volume représentatif ne contient pas assez d'éléments. L'auteur applique alors un incrément de déformation uniforme sur les faces orthogonales à la direction de traction ainsi qu'une force nulle sur les autres faces. Les données mécaniques des phases utilisées pour la simulation et le modèle analytique figurent dans le tableau 4 ci-dessous.

Phase	Propriété	Module d'Young (GPa)	Coefficient de Poisson	Limite d'élasticité (MPa)
	Austénite	182	0.3	145
	Martensite	180	0.3	950
Variation volumique 0,0252				

Tableau 4 : données mécaniques du modèle analytique et de la simulation numérique développés par LEBLOND [17].

Les courbes contrainte-déformation obtenues dans le cas uniaxial par les deux méthodes sont représentées figure 15a,b,c,d pour les quatre taux de martensite. Toutes les courbes simulées sont trouvées initialement tangentes au comportement élastique et s'en écartent ensuite en raison des contraintes internes générées. Une bonne concordance entre la simulation et le modèle analytique est observée pour des taux de martensite supérieurs à 50% ; par contre , un écart sensible existe pour des taux plus faibles.

Les résultats locaux de la simulation (contraintes et déformations dans chaque phase) permettent à l'auteur de montrer que l'hypothèse d'égalité des déviateurs de contraintes moyen dans chaque phase et celui de contrainte appliquée est justifiée.

L'aptitude de la méthode des éléments finis à prévoir le comportement de matériaux polyphasés a également été mise à profit pour d'autres types d'applications, telles l'étude de la rupture ou la propagation des ondes élastiques et plastiques, que nous ne mentionnerons pas dans ce travail.

Dans le contexte des études menées au Laboratoire sur les superalliages monocristallins base Nickel, nous avons démarré une utilisation de la modélisation micromécanique par éléments finis de ces matériaux biphasés (précipités dans une matrice). Le but recherché est une aide à la compréhension des mécanismes d'évolution structurale de ces alliages sous sollicitation thermique et/ou mécanique. Les premiers résultats issus de cette approche sont présentés dans une publication intégrée dans l'Annexe de cette partie :

“Finite element calculation of internal mismatch stresses in a single crystal Nickel base superalloy”.

J.F. GANGHOFFER, A.HAZOTTE, S.DENIS, A.SIMON.

Nous consacrons la dernière partie de ce chapitre aux modèles micromécaniques décrivant le comportement de matériaux en cours d'évolution structurale, dont le principal effet mécanique est de générer une déformation de plasticité de transformation.

III. PLASTICITE DE TRANSFORMATION

La formulation d'une loi de comportement décrivant le comportement thermomécanique d'un matériau en cours d'évolution structurale nécessite des concepts issus de plusieurs disciplines, dont la métallurgie et la mécanique et implique la prise en compte de couplages de différente nature entre les phénomènes physiques.

Nous renvoyons le lecteur à [8] pour l'analyse des phénomènes et des mécanismes mis en jeu pendant la transformation. Par ailleurs, une revue bibliographique complète des modélisations développées pour rendre compte des différents phénomènes est présentée dans [9]. Dans les paragraphes suivants, nous décrivons brièvement le phénomène de plasticité de transformation, nous explicitons les mécanismes qui en rendent compte à l'échelle microscopique et présentons les différentes modélisations qui ont été développées pour en rendre compte.

III.1. PHENOMENES ET MECANISMES

III.1.1. Phénomènes

Lorsqu'on applique une contrainte mécanique à un alliage métallique au cours de la transformation, on observe une déformation supérieure à celle causée par la variation volumique (différence de densité entre les phases), même pour des contraintes inférieures à la limite d'élasticité de la phase la plus molle [8]. Cette déformation supplémentaire est appelée plasticité de transformation ; elle peut être reliée à la contrainte appliquée et à l'avancement de la transformation. L'étude expérimentale de ce phénomène a été effectuée aussi bien dans le cas de transformations par diffusion (ex. transformation perlitique) que par cisaillement (ex. transformation martensitique). Les essais thermomécaniques peuvent être réalisés dans des conditions statiques (contrainte appliquée constante durant la transformation) ou dynamiques (température maintenue constante durant l'essai de traction) [8].

III.1.2. Mécanismes de plasticité de transformation

La plasticité de transformation se manifeste par l'apparition d'une déformation inélastique additionnelle aux autres déformations pour un matériau se transformant sous un champ de contrainte appliquée. Elle peut être observée aussi bien pour les transformations par diffusion que dans le cas des transformations martensitiques [8,9]. Cette classification en transformation s'effectuant avec ou sans diffusion est intéressante en ce qui concerne les mécanismes de plasticité de transformation, chacune faisant apparaître un mécanisme qui lui est spécifique.

III.1.2.1. Mécanisme d'accommodation anisotrope de l'écoulement plastique

Les transformations par diffusion s'accompagnent d'un changement de volume et la déformation de transformation isotrope associée doit être accommodée mécaniquement, donnant naissance à un écoulement plastique autour des particules de phase nouvelle.

Le changement de volume génère un champ de contraintes internes auquel se superpose la contrainte appliquée qui va orienter l'écoulement plastique (le comportement du matériau sous contrainte appliquée nulle donne lieu localement à une accommodation plastique isotrope de la variation volumique et aucun effet macroscopique n'est donc observé).

Il en résulte une déformation macroscopique supplémentaire de caractère irréversible dans la direction de la sollicitation externe (fig.16) qui dépend de l'amplitude de la déformation de transformation, du niveau de contrainte appliquée et des propriétés mécaniques des phases.

III.1.2.2. Mécanisme d'orientation du produit de transformation

La transformation martensitique s'accompagne de la formation de variants associés à une déformation de transformation anisotrope (composée d'un changement de volume ϵ_0 et d'un cisaillement γ_0). La transformation peut alors être considérée comme un mode de déformation, cette idée ayant permis d'expliquer la sensibilité de la température M_s vis-à-vis de l'état de contrainte [26].

La déformation résultant de la transformation d'un variant dans la direction de la contrainte appliquée s'exprime selon $\epsilon_t = \frac{1}{2} \{ \gamma_0 \sin 2\theta \cos \alpha + \epsilon_0 (1 + \cos 2\theta) \}$, où θ est l'angle entre la normale au plan de variant et la contrainte appliquée, et α l'angle entre la direction de cisaillement et la direction de cisaillement maximum S_m (fig.17).

Cette déformation dépend seulement de l'orientation du variant par rapport à l'état de contrainte externe. Pour un monocristal donnant lieu à la formation d'un seul variant, la déformation observée est constante, indépendante du niveau de contrainte appliquée. La valeur maximale est obtenue pour $\alpha = 0$ et $\tan 2\theta = \gamma_0/\epsilon_0$, conduisant à une valeur de ϵ_t égale à 0.11 dans le cas d'alliages Fe-Ni-C (pour lesquels $\epsilon_0 = 0.024$ et $\gamma_0 = 0.19$). Ces faits expérimentaux traduisent l'effet de l'état de contrainte externe sur les mécanismes de la transformation. Dans le cas du matériau polycristallin, les contraintes internes générées durant la progression de la transformation conduisent à orienter localement les variants. La plasticité de transformation est ici due à cette sélection de l'orientation des variants de martensite par l'état de contrainte local, qui est différent de l'état de contrainte appliquée (fig.18) (l'avancement de la transformation sous contrainte appliquée nulle donne lieu à un développement isotrope des orientations de variants). Cette forme de plasticité de transformation présente un caractère réversible (elle est récupérée lorsque la transformation inverse se produit).

Ce mécanisme permet à lui seul d'expliquer la plasticité de transformation dans le cas des transformations martensitiques se produisant avec une variation volumique très faible. Dans le cas de transformations martensitiques avec changement de volume élevé, (cas des aciers), le mécanisme d'accommodation plastique est lui aussi opérant [8,9].

Pour ces transformations, le changement de volume et le cisaillement peuvent être accommodés de façon élastique et/ou plastique, alors que le cisaillement peut en plus être accommodé par la formation de variants auto-accommodants (compensation mutuelle des cisaillements associés à un groupe de variants).

III.2 REVUE BIBLIOGRAPHIQUE DES MODELES DE PLASTICITE DE TRANSFORMATION

Les études expérimentales et des mécanismes se sont par ailleurs accompagnées de tentatives de modélisations dont l'objectif est de décrire les évolutions de la plasticité de transformation avec l'avancement de la transformation et l'état de contrainte appliquée. Nous nous intéressons par la suite aux approches développées dans le cadre de la mécanique des milieux continus.

Nous considérons ici exclusivement les modèles mécaniques "statiques" (décrivant des essais où la progression de la transformation se fait sous contrainte constante). Nous avons classé les modélisations en deux familles correspondant aux deux mécanismes décrits auparavant.

III.2.1. MODELES BASES SUR LE MECANISME D'ACCOMMODATION ANISOTROPE DE L'ECOULEMENT PLASTIQUE

Les modèles développés considèrent que seul le changement de volume associé à la transformation peut être accommodé de manière plastique.

III.2.1.1. Modèles analytiques

Considérant en premier lieu le mécanisme d'accommodation anisotrope de l'écoulement plastique, un premier modèle a été développé par GREENWOOD-JOHNSON : les auteurs considèrent une inclusion sphérique dans une matrice de phase mère, soumise à une contrainte uniaxiale. En appliquant alors la théorie macroscopique de la plasticité à cette échelle, ils aboutissent à la relation suivante pour une transformation complète :

$$E_{pt} = \frac{5}{6} \frac{\Delta V}{V} \frac{\sigma}{\sigma_e} \quad (1)$$

où σ_e est la limite d'élasticité de la phase la plus molle et $\frac{\Delta V}{V}$ la variation volumique liée à la transformation [27].

Cette relation est valable pour une contrainte appliquée σ faible par rapport à σ_e . Le modèle permet de décrire correctement les résultats expérimentaux pour différents types de matériaux et de transformations [8].

Néanmoins, il ne donne pas d'information sur la dépendance de la plasticité de transformation avec le taux de phase formée.

ABRASSART [29] a adapté la relation de Greenwood-Johnson avec la contrainte et la fraction transformée x ; en considérant une géométrie des phases différente (les zones transformées sont prismatiques et situées dans les coins d'une matrice carrée) et en appliquant la méthode de la borne supérieure, il a obtenu la relation $E^{pt} = \frac{3}{4} \frac{\sigma}{\sigma_e} \frac{\Delta V}{V} (x - \frac{2}{3} x^{3/2})$ (2)

A la fin de la transformation, la relation précédente s'écrit :

$$E^{pt} = \frac{1}{4} \frac{\Delta V}{V} \frac{\sigma}{\sigma_e} \quad (3)$$

conduisant à des niveaux de déformation trois fois plus faibles que ceux fournis par le modèle de Greenwood-Johnson (relation (1)), ce qui met en évidence le désaccord entre les deux modèles.

Une revue détaillée des hypothèses faites dans chacun des deux modèles a été présentée dans [9].

D'autres types de modèles mécaniques ont été proposés plus récemment pour décrire le comportement plastique d'aciers pendant la transformation de phase.

LEBLOND a développé une méthode d'homogénéisation qui permet à partir de grandeurs locales (contrainte et déformation dans chaque phase) d'obtenir la loi de comportement macroscopique du matériau [30]. L'austénite seule se plastifie, sans écrouissage, alors que la martensite a un comportement purement élastique.

Comme résultat du processus d'homogénéisation, l'auteur obtient une décomposition de la vitesse de déformation plastique macroscopique \dot{E}^P sous la forme :

$$\dot{E}^P = \dot{E}^{cp} + \dot{E}^{tp}$$

\dot{E}^{cp} est un terme décrivant la plasticité classique (causée par des variations temporelles de contrainte appliquée ou de température) que nous avons détaillé en II.2.1. et \dot{E}^{tp} le terme de plasticité de transformation qui est mis sous la forme

$$\dot{E}^{tp} = \left\{ (1-x) \left\langle \frac{\delta \epsilon_{1P}}{\delta x} \right\rangle_{V_1} + x \left\langle \frac{\delta \epsilon_{2P}}{\delta x} \right\rangle_{V_2} + \left\langle \Delta \epsilon_{12}^P \right\rangle_F \right\} \dot{x}$$

V_1 et V_2 sont les volumes des deux phases -supposées sphériques- et les deux premiers termes de cette expression décrivent le mécanisme à la base du modèle de Greenwood-Johnson. Le troisième terme (moyenne du saut de déformation plastique sur le front de transformation) décrit selon l'auteur le mécanisme d'orientation du produit de transformation par la contrainte. Dans la suite du

développement, l'auteur suppose ce terme négligeable. En appliquant alors les relations de plasticité classique à l'échelle microscopique et en faisant l'hypothèse que les déviateurs des contraintes moyens dans chaque phase sont égaux au déviateur macroscopique, il aboutit à la relation intégrée :

$$E^{\text{tp}} = \frac{1}{\sigma_e} \frac{\Delta V}{V} (1 - \ln x) \underline{\underline{S}} \quad (4)$$

où $\underline{\underline{S}}$ est le tenseur déviateur des contraintes appliquées. Le domaine de validité de cette relation est également celui des contraintes appliquées faibles. Son intérêt principal par rapport aux modèles précédents est de prendre en compte des cas de sollicitations complexes (triaxiales) pour lesquelles il n'existe pas d'informations expérimentales. Dans le cas uniaxial, l'expression obtenue devient

$$E^{\text{tp}} = \frac{2}{3} \frac{\sigma}{\sigma_e} \frac{\Delta V}{V} \quad (5) \text{ pour une transformation complète.}$$

La comparaison des formules (1), (3) et (5) montre alors que la plasticité de transformation prend la forme $E^{\text{tp}} = K f(x) \sigma$ (pour un cas de contrainte uniaxial) pour les trois modèles décrits. Leur intérêt est de lier la constante K aux propriétés mécaniques du matériau ; en particulier, elle dépend de la variation volumique associée à la transformation et de l'inverse de la limite d'élasticité de l'austénite. Il est intéressant de noter que ces trois modèles ne prennent en compte un comportement élastoplastique que pour la phase la plus molle (austénite), alors que la phase formée est supposée purement élastique.

La comparaison des constantes pour ces modèles (respectivement $\frac{5}{6}, \frac{1}{4}, \frac{2}{3}$) montre un désaccord entre eux, qui témoigne de la difficulté de tels développements analytiques par rapport à la complexité de la situation réelle : géométrie tridimensionnelle des phases, interaction entre le processus de transformation et l'anisotropie de l'écoulement plastique local et du champ de contrainte, sollicitation mécanique complexe.

Une approche voisine de celle de LEBLOND a par ailleurs été entreprise par RANIECKI [31] basée sur une hypothèse d'uniformité des déviateurs de déformation (complémentaire de celle de Leblond). Nous ne développerons pas cette approche qui fournit une expression de plasticité de transformation faisant intervenir des termes difficiles à évaluer, ce qui empêche son application dans un cas simple et la comparaison avec d'autres théories.

Les modèles théoriques qui ont été présentés reposent sur l'hypothèse que seul le changement de volume relatif entre les deux phases est à l'origine de la plasticité de transformation. Ils ne permettent donc pas d'expliquer les observations expérimentales dans le cas des transformations martensitiques où ils ont souvent été appliqués.

Plus récemment est apparue une tentative de modélisation d'une transformation martensitique tenant compte de l'ensemble des mécanismes actifs, développée par F.D. FISCHER et MITTER [32].

Les auteurs considèrent le cas du polycristal pour lequel ils définissent une entité géométrique appelée "micro-région", partie d'un grain à laquelle ils associent un tenseur de déformation $\underline{\underline{\epsilon}}'_c$

$$\text{exprimé dans un repère local } (x', y', z') \text{ lié au plan d'habitat : } \underline{\underline{\epsilon}}'_c = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \gamma/2 \\ 0 & 0 & 0 \\ \gamma/2 & 0 & \delta \end{pmatrix}, \text{ fig.19.}$$

Les axes x', y' sont dans le plan d'habitat et γ, δ sont les paramètres décrivant la transformation (cisaillement et dilatation respectivement). La position spatiale d'une "micro-région" est repérée par trois angles d'Euler ν, ϕ, ψ et le tenseur local $\underline{\underline{\epsilon}}'_c$ est ensuite transformé en un tenseur $\underline{\underline{\epsilon}}^c$ exprimé dans un repère fixe.

Une hypothèse de taux de déformation uniforme dans l'ensemble des "micro-régions" est alors formulée. L'accommodation du cisaillement de transformation s'effectue par déformation plastique et l'application des lois de la plasticité macroscopique à l'échelle de la "micro-région" fournit une relation tensorielle entre la déformation totale, la déformation de transformation $\underline{\underline{\epsilon}}_c$ et les paramètres mécaniques (limite d'élasticité σ_y) et de transformation :

$$\frac{S_{ij}}{\sigma_y} = \frac{\epsilon_{ij} - \epsilon_{c,ij}}{\left[\frac{3}{2} (\underline{\underline{\epsilon}} - \underline{\underline{\epsilon}}_c) : (\underline{\underline{\epsilon}} - \underline{\underline{\epsilon}}_c) \right]^{1/2}}$$

Les conditions d'équilibre mécanique global permettent alors d'exprimer le déviateur macroscopique $\underline{\underline{S}}$ sous forme d'une moyenne des déviateurs locaux dans chaque "micro-région" :

$$\underline{\underline{S}} = \langle \underline{\underline{S}} \rangle = \frac{\int \underline{\underline{S}} g \sin \nu \, d\nu \, d\phi \, d\psi}{\int g \sin \nu \, d\nu \, d\phi \, d\psi},$$

où g est une fonction de distribution des orientations des variants.

Pour des raisons de simplicité, l'auteur considère le cas d'une transformation complète et substitue à σ_y une contrainte d'écoulement moyenne σ_y^* . La combinaison des deux relations précédentes permet alors d'exprimer la loi de comportement à l'échelle macroscopique

$$\frac{S_{ij}}{\sigma_y^*} = \left\langle \frac{\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{c,ij}}{\left[\frac{3}{2} (\underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{\varepsilon}} + \frac{\gamma^2}{4} + \delta^2 - 2 \underline{\underline{\varepsilon}}_c : \underline{\underline{\varepsilon}}) \right]^{1/2}} \right\rangle$$

Cette relation générale est alors appliquée pour différents cas de sollicitations (traction, compression, cisaillement simple). Le cas d'une distribution uniforme des variants de martensite ($g=1$) conduit après linéarisation de l'expression précédente à une loi de comportement pour une sollicitation uniaxiale $\varepsilon = \frac{\delta}{3} + \frac{5}{6} \frac{\sigma}{\sigma_y^*} \left(\delta^2 + \frac{3}{4} \gamma^2 \right)^{1/2}$, où σ_y^* est relié aux limites d'élasticité de

l'austénite σ_{y0} et de la martensite σ_{yM} selon $\sigma_y^* = \sigma_{yM} \left(\frac{1 - \sigma_{y0}/\sigma_{yM}}{\ln \sigma_{yM}/\sigma_{y0}} \right)$.

L'application d'un principe de superposition fournit alors à partir des lois constitutives établies pour différents cas de sollicitations simples une expression générale pour le taux de plasticité de transformation : $\underline{\underline{E}}^{tp} = \frac{3}{2} K^* \underline{\underline{S}}$, avec $K^* = \frac{5}{6} \frac{1}{\sigma_y^*} \left(\delta^2 + \frac{3}{4} \gamma^2 \right)^{1/2}$, qui est une généralisation de la relation de Greenwood-Johnson.

Cette relation fait apparaître une déformation de plasticité de transformation proportionnelle au déviateur des contraintes appliquées, valable pour des niveaux de sollicitation faible.

Ce modèle prend en considération à la fois l'accommodation plastique anisotrope du cisaillement et de la dilatation associés à la transformation martensitique, pour un comportement élastoplastique du matériau ; par contre, il ne permet pas de décrire la sélection des variants de martensite par l'état de contrainte.

Ces approches micromécaniques sont de plus en plus développées. En effet, un modèle micromécanique de plasticité de transformation a été récemment établi pour la transformation martensitique de matériaux céramiques de comportement essentiellement thermoélastique, [33].

Les modèles analytiques ne permettent pas de décrire de manière satisfaisante les champs locaux de contraintes et de déformations induits au cours de l'avancement ; aussi les simulations numériques employant la méthode des éléments finis qui sont apparues plus récemment sont-elles intéressantes. Nous les présentons dans le paragraphe suivant.

III.2.1.2. Simulations par éléments finis

Le principe de la simulation repose sur le concept employé par Greenwood et Johnson et y associe l'aspect discrétisation inhérent aux éléments finis.

On maille un petit volume (pouvant représenter un grain d'austénite) en éléments qui se transforment successivement en la nouvelle phase en s'accompagnant d'un changement de volume. Les éléments transformés reçoivent également les propriétés mécaniques de la phase formée, tous les autres conservant celles de l'austénite. Le comportement mécanique de chaque phase est élastoplastique. La progression de la transformation génère des contraintes internes et donne lieu à une plastification des éléments d'austénite (ou même de ceux de la nouvelle phase). L'écoulement plastique local est orienté par l'état de contrainte externe maintenu constant durant l'avancement de la transformation. Il induit une plasticité macroscopique qui s'identifie à la plasticité de transformation pour le volume considéré. Celle-ci est obtenue à chaque instant de la transformation en soustrayant de la déformation totale la déformation de transformation (changement de volume) et la déformation élastique (due à la contrainte appliquée).

La première approche de ce type a été effectuée par DESALOS [34] en bidimensionnel. La simulation vise ici à décrire la plasticité de transformation pour une transformation martensitique. L'ordre de transformation des éléments est le suivant : l'élément qui se transforme est celui où le second invariant du tenseur des contraintes est maximum. Le calcul est effectué pour des contraintes appliquées uniaxiales de traction et de compression inférieures à la limite d'élasticité de l'austénite (les données sont celles d'un acier 35 NCD 16).

La figure 20b donne un exemple d'ordre de transformation obtenu pour une contrainte appliquée de traction de 50 MPa. La relation entre la plasticité de transformation induite et la contrainte appliquée est sensiblement linéaire (fig. 20a) : $E^{tp} = K\sigma$ avec $K = 5.10^{-5} \text{ MPa}^{-1}$ et s'approche sensiblement du résultat expérimental.

Plus récemment, LEBLOND [30] a effectué une approche similaire, appliquée à une transformation martensitique, mais pour une géométrie tridimensionnelle (le volume considéré est un cube). Les données mécaniques des phases sont identiques à celles du modèle analytique développé par le même auteur (paragraphe II.2.1.) ; pour la simulation, il considère en plus une possibilité d'écoulement plastique dans la martensite, sans écrouissage (limite d'élasticité de la martensite égale à 950 Mpa).

Deux possibilités d'ordre de transformation sont considérées : une transformation "dirigée" (le cube se transforme par couronnes successives à partir du centre) et une transformation "aléatoire" (les éléments sont choisis au hasard). L'auteur suppose que ces deux descriptions encadrent le comportement réel du matériau pendant la transformation.

Une première simulation est effectuée avec un maillage de $5*5*5$ éléments -et aucune condition de symétrie n'est alors imposée sur les faces du cube - pour une contrainte uniaxiale appliquée de 50 Mpa. Les résultats (fig.21) sont sensiblement différents entre d'une part les deux modèles d'avancement et d'autre part entre le calcul analytique et la simulation numérique. L'auteur explique les valeurs supérieures de plasticité de transformation obtenues par la simulation par rapport au modèle théorique par l'effet des éléments de surface qui accommodent le changement de volume lié à la transformation par une déformation orientée vers l'extérieur du cube. A l'inverse, la plastification des éléments internes est plus difficile. Cette explication est confirmée par les valeurs plus élevées obtenues pour le modèle dirigé, pour lequel la proportion d'éléments de surface est la plus importante (la dernière couche contient près de 80% des éléments du cube, en fraction volumique).

Afin de diminuer l'effet physiquement non significatif des éléments de surface, l'auteur effectue une simulation avec un cube plus finement maillé, de $10*10*10$ éléments. Pour réduire les temps de calcul, des conditions de symétrie sur trois faces du cube sont imposées, qui permettent de ne représenter qu'un huitième du volume initial (soit un maillage de 125 éléments). La proportion d'éléments de surface est alors de 50% ; bien qu'encore importante, elle est donc nettement diminuée par rapport au maillage initial.

Pour ce dernier maillage, des contraintes de traction de 50 et 100 Mpa ont été appliquées et la figure 22 montre les évolutions de la plasticité de transformation (normée par rapport au changement de volume et à la contrainte appliquée), en fonction du taux de martensite formée.

Les deux modèles d'avancement donnent des résultats compatibles avec la théorie et concordent relativement bien entre eux. La plasticité de transformation est trouvée proportionnelle à la contrainte appliquée, dont l'amplitude a été choisie pour les calculs inférieure à la limite d'élasticité de l'austénite qui est ici de 145 Mpa. L'auteur suppose que la très légère non linéarité de la relation simulée $E_{xx}^{tp}(\Sigma_{xx})$ (cas de calcul 2 et 3) serait plus prononcée pour des niveaux de contrainte appliquée comparables à la limite d'élasticité de l'austénite.

Comme pour le cas du biphasé stable, la simulation permet ici aussi de vérifier certaines hypothèses du modèle théorique. La figure 23 compare le nombre de points de Gauss plastifiés dans chaque phase au nombre total de points de Gauss dans cette même phase, en fonction du taux de martensite formée. L'austénite est presque entièrement plastifiée dès le début de transformation, alors que la martensite reste élastique, sauf en fin de transformation. L'hypothèse faite sur le comportement mécanique de chaque phase est donc bien vérifiée.

Si ce modèle permet de décrire le phénomène de plasticité de transformation pour des transformations mettant en jeu une variation volumique, il ne prend cependant pas en compte le

mécanisme d'orientation du produit de transformation qui est également opérant pour une transformation martensitique, pour laquelle ce modèle a été appliqué. Aussi consacrons nous le paragraphe suivant à la présentation des modèles qui décrivent ce second mécanisme.

III.2..2. MODELES BASES SUR LE MECANISME D'ORIENTATION DU PRODUIT DE TRANSFORMATION

MAGEE [35] fut un des premiers à décrire la transformation martensitique comme un mode de déformation empruntant le concept introduit par SCHEIL [8]. Il utilise la déformation liée à la formation d'une plaquette de martensite pour calculer la déformation moyenne liée à une transformation complète sous contrainte de traction :

$$\varepsilon = \frac{\int_{\theta} \varepsilon(\theta) f^{\sigma}(\theta) d\theta}{\int_{\theta} f^{\sigma}(\theta) d\theta}, \quad \text{avec } \varepsilon(\theta) = \frac{1}{2} (\gamma_0 \sin 2\theta + \varepsilon_0 (1 + \cos 2\theta))$$

θ est l'orientation de la plaquette de martensite par rapport à l'axe de traction, γ_0 le cisaillement associé à la transformation, ε_0 la variation volumique de transformation, $f^{\sigma}(\theta)$ est une fonction de distribution des orientations des variants.

Ce modèle permet d'expliquer les valeurs de plasticité de transformation pour des transformations se produisant avec une variation volumique nulle ou très faible. Cependant, l'application de ce modèle pour le cas général des transformations par cisaillement est très limitée, car il est nécessaire de connaître les distributions des variants de martensite.

A partir d'un concept analogue, PATOOR [36] a développé un modèle de plasticité de transformation et établi les lois de comportement du monocristal et du polycristal. L'auteur considère le cas de la plasticité de transformation dite "parfaite", i.e. celle due au mécanisme de MAGEE seul (ce modèle ne tient pas compte de l'accommodation plastique du cisaillement et du changement de volume).

La déformation liée à la transformation martensitique se compose d'une dilatation normale au plan d'habitat et d'un cisaillement qui lui est parallèle (fig.24). Des grandeurs caractéristiques à la transformation sont la normale n au plan d'habitat, la direction de transformation m et l'amplitude g de la déformation dans cette même direction. L'auteur obtient par un processus d'homogénéisation similaire à celui utilisé par LEBLOND l'incrément de la déformation totale d'un volume biphasé :

$$dE_{ij}^T = (1 - x) d\varepsilon_{ij}^A + x d\varepsilon_{ij}^M + \varepsilon_{ij}^{AM} dx,$$

$d\epsilon_{ij}^A$ ($d\epsilon_{ij}^M$) étant l'incrément de déformation totale de l'austénite (martensite).

Le dernier terme correspond à la plasticité de transformation parfaite : $d\epsilon_{ij}^{pt} = \epsilon_{ij}^{AM} dx$ où ϵ_{ij}^{AM} est la déformation liée à la transformation.

Pour un monocristal, ϵ_{ij}^{AM} s'exprime en fonction des caractéristiques géométriques de la transformation (n,m,g) d'où il résulte $d\epsilon_{ij}^{pt} = \sum_n R_{ij}^n g dx^n$ lorsque plusieurs variants sont actifs (fig. 25). R_{ij}^n est le tenseur d'orientation du variant n et dx^n le taux de martensite formée suivant ce même variant.

Dans le cas du polycristal, l'auteur a utilisé deux approches différentes pour déterminer la loi de comportement : une approche phénoménologique qui repose sur l'établissement d'un critère de plasticité de transformation et une méthode autocohérente. Seule la deuxième prend en compte les caractéristiques microscopiques de la transformation.

Elle s'appuie sur le schéma autocohérent à accommodation élastoplastique de BERVEILLER et ZAOUI [37] dont le principe est le suivant : pour chacun des grains d'un polycristal, on détermine en fonction des contraintes s'exerçant sur le grain la fraction volumique transformée selon chaque variant, puis la contribution à la déformation du polycristal due à chaque grain. On obtient alors la déformation macroscopique en faisant la moyenne sur tout le volume transformé.

Cette méthode a été appliquée pour des alliages Cu-Zn-Al pour lesquels la variation volumique due à la transformation est négligeable ; par contre, elle ne permet pas de traiter le cas des aciers pour lesquels des variations volumiques importantes sont accommodées par glissement plastique dans l'austénite.

IV - CONCLUSION

Nous avons vu que la modélisation du comportement thermomécanique d'un matériau biphasé est une tâche très complexe lorsque l'on souhaite donner aux lois constitutives un solide contenu physique.

Si l'approche macroscopique, via le cadre de la thermodynamique des phénomènes irréversibles et le formalisme à variables internes, permet l'obtention de telles lois et leur intégration directe dans des codes de calculs des structures, elle présente en revanche une grande versatilité vis à vis du type

de matériau utilisé et de ses conditions d'emploi (propriétés mécaniques et thermiques des constituants, domaine de comportement, type de sollicitations). Surtout, elle ne donne des phénomènes microstructuraux qu'une représentation macroscopique (variables internes) et elle ne constitue donc pas une démarche appropriée lorsque l'on souhaite étudier les mécanismes à la base de ces phénomènes ainsi que leurs interactions mutuelles (comportement du grain et interactions entre les systèmes de glissement dans le cas du polycristal, distributions de contraintes et de déformations plastiques locales générées dans un grain ou dans les constituants d'un composite ou autour d'une phase en formation...).

En revanche, l'approche micromécanique, de nature plus déductive, s'appuie précisément sur la description des mécanismes fins à l'échelle de la microstructure pour ensuite remonter au comportement global tel qu'il est mesuré sur éprouvette. Les problèmes liés au changement d'échelle conduisent à restreindre le choix des phénomènes physiques pour ne retenir que les plus essentiels à une échelle de modélisation qui est souvent moins fine que le niveau atomique ou celui de la maille cristalline. L'échelle de départ est alors le monocristal ou le constituant continu composant l'agrégat, doté de ses propriétés thermomécaniques intrinsèques.

Le langage utilisé à ce niveau de description est celui de la mécanique des milieux continus car lui seul fournit des lois de comportement tensorielles objectives et compatibles avec les exigences de la thermodynamique ; les méthodes numériques telles la méthode des éléments finis s'avèrent alors des outils efficaces pour la description des effets de la microstructure sur les champs locaux de contraintes et de déformations générés, dont nous avons vu qu'ils influencent fortement la réponse du matériau dans le cas élastoplastique. De plus, elles permettent de représenter d'une manière relativement détaillée les caractéristiques géométriques et morphologiques de cette microstructure. Ces simulations permettent de prévoir de manière fiable le comportement élastoplastique d'un matériau biphasé stable dans une grande variété de situations (comportement élastique, viscoplastique, analyse de la rupture, sollicitations statiques et dynamique...).

L'analyse de la situation plus complexe de matériaux en cours d'évolution structurale a montré l'insuffisance des modèles analytiques à décrire le comportement du matériau qui se transforme tout en étant sollicité mécaniquement, dans le cas le plus général où la cinématique de la transformation met en jeu à la fois un changement de volume et un cisaillement (cas des transformations martensitiques). Dans ce cas en effet, le phénomène de plasticité de transformation fait intervenir simultanément les mécanismes d'orientation de l'écoulement plastique local généré et l'orientation du produit de transformation par l'état de contrainte local et il faut donc être capable de décrire avec suffisamment de précision les états mécaniques locaux ainsi que leur influence sur le développement morphologique, ce qu'aucun des modèles décrits n'a permis d'appréhender de manière satisfaisante.

(pendant la rédaction de ce mémoire, nous avons eu connaissance du travail de FISCHER [38] qui a effectué une simulation par éléments finis de la plasticité de transformation pour une transformation martensitique, dans laquelle les deux mécanismes ont été intégrés).

Notre objectif étant d'une part d'analyser les interactions entre les champs mécaniques locaux et l'avancement de la transformation, et d'autre part l'obtention d'une loi constitutive pour la plasticité de transformation, tout d'abord pour une transformation par diffusion, puis pour une transformation martensitique, nous effectuerons une modélisation de ces phénomènes en nous plaçant à l'échelle des phases et nous utiliserons la méthode des éléments finis.

La première étape de la modélisation consiste alors à définir une cellule de base représentative du matériau et à établir un modèle d'avancement de la transformation à l'intérieur de la cellule. Des conditions limites cinématiques et statiques appropriées doivent être choisies de manière à décrire les interactions entre cellules voisines et à assurer la transition d'échelle (micro-macro) ; elles doivent de plus respecter les symétries géométriques et matérielles de la situation.

Dans le cas des transformations par diffusion (changement de volume seulement) que nous aborderons en premier lieu, l'avancement est a priori indépendant de l'état de contrainte local [8] ; par conséquent, l'ordre de transformation des éléments à l'intérieur de la cellule discrétisée peut être prescrit par avance. Le modèle que nous avons développé en commun avec Linköping pour décrire le comportement d'un matériau pendant une transformation perlitique est présenté dans une publication, chapitre II.

Dans une première phase de validation du modèle, nous étudierons l'influence des principaux paramètres qui le sous-tendent, tels la taille du maillage, le type de conditions limites utilisées. Nous nous intéresserons en premier lieu aux évolutions de la plasticité de transformation en fonction de l'avancement de la transformation et des sollicitations appliquées.

L'intérêt d'une telle simulation étant également de fournir des informations de caractère local, nous présenterons ensuite des résultats plus locaux tels que les déformations plastiques générées autour des unités de perlite, les contraintes internes induites au passage du front de transformation, l'orientation de l'écoulement plastique. Nous essayerons également de corrélérer ces résultats locaux avec les évolutions correspondantes de la plasticité de transformation.

Le cas des transformations martensitiques est plus complexe car la cinématique de la transformation fait alors intervenir simultanément un changement de volume et un cisaillement, qui sont de plus orientés par l'état de contrainte local. Un modèle d'avancement devra donc être établi qui décrive l'effet de la contrainte interne sur la cinétique de transformation, impliquant une étude

thermodynamique préalable de la transformation. D'autre part, le modèle doit prendre en compte les caractéristiques géométriques et morphologiques de la transformation (forme des variants de martensite), ce qui situe l'échelle la plus fine de la modélisation au niveau du variant. Le choix d'une cellule de base adaptée (sur les frontières de laquelle on impose des conditions limites appropriées) et la transition d'échelle sont alors des problèmes délicats qui nécessitent de formuler des hypothèses qu'il faudra situer par rapport à la physique.

Les résultats qu'une telle simulation permet d'obtenir concernent également les évolutions de la plasticité de transformation avec l'avancement et l'état de sollicitation mécanique appliquée ; les deux mécanismes qui la sous-tendent étant tous deux actifs, il faut être capable de les séparer d'une façon quantitative à l'échelle de la cellule.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] F. SIDOROFF. *Revue Phys. Appl.* 23 (1988), 649.
- [2] J. LEMAITRE, J.L. CHABOCHE. *Mécanique des Matériaux Solides*, Paris, Dunod, 1985.
- [3] P.GERMAIN. *Revue Phys. Appl.* 23, 1988, 319.
- [4] P. GERMAIN. *Cours de Mécanique des milieux continus*, Masson, 1973.
- [5] D.MARQUIS, J.LEMAITRE. *Revue Phys. Appl.* 23, 1988, 615.
- [6] D.C. LAGOUDAS. *Int. Jnl Engng Sci*, Vol 29, N°5, 1991, 597.
- [7] D.G.B. EDELEN, D.C. LAGOUDAS. *Gauge theory of defects in Solids*, North-Holland, Amsterdam, 1988.
- [8] E. GAUTIER. *Thèse de Doctorat ès-Sciences Physiques*, INPL, Nancy, 1985.
- [9] S. DENIS. *Thèse de Doctorat ès-Sciences Physiques*, INPL, Nancy, 1987.
- [10] J. GIUSTI, D.RADENKOVIC. *Mech. Res. Comm.*, Vol. 10 (3), 1982, 163.
- [11] J. GIUSTI. *Thèse de Doctorat ès-Sciences physiques*, Université P. et Marie Curie, PARIS VI, 1981.
- [12] *Physique et Mécanique de la mise en forme des métaux*, Ecole d'été d'Oléron, 1990, Presses du CNRS, IRSID, 337.
- [13] G.CAILLETAUD. *Revue Phys. Appl.* 23, 1988, 353.
- [14] A. BENSOUSSAN et al., *Asymptotic analysis for periodic structures* (North-Holland Publishing), 1978.
- [15] P. SUQUET.
Thèse de Doctorat ès-Sciences Physiques, Université Pierre et Marie Curie, Paris, 1983.
Elements of homogenization for inelastic solid mechanics. Lecture Notes in Physics 272, 1985, 193.
- [16] A. ZAOUI. "Approximate statistical modelling and applications ", *Lecture Notes in Physics 272*, 1985, 337.
- [17] J.B. LEBLOND. *J. Mech. Phys. Solids*, Vol. 34, N°4, 1986, 411.
- [18] PH. JARRY, D. TOITOT, B. JANIN. *Proceedings Int. Conf. on Residual Stresses (ICRS2)*, Ed. G. BECK, S. DENIS, A. SIMON, Elsevier Applied Science, 1989, 436.
- [19] J.BÖHM, F.G. RAMMERSTORFER, *Proceedings Int. Conf. on Residual Stresses (ICRS2)*, Ed. G. BECK, S. DENIS, A. SIMON, Elsevier Applied Science, 1989.
- [20] F. LENE, D. LEGUILLON, *J. de Mécanique*, Vol. 20, N°3, 1981, 509.
- [21] B. SUNDSTRÖM, *Mater. Sc. Engng*, 12 (5-6), 1973, 265.
- [22] Y. TOMOTA, I. TAMURA. *Transactions ISIJ*, Vol. 22, 1982, 665.
- [23] ANKEM, MARGOLIN. *I. of Metals*, 38 (4), 1986, 25.

- [24] C.T. DE MONTPREVILLE. Res. Mech., 6, 1983, 13.
- [25] L. DURAND. Res. Mechanica 20, 1987, 291.
- [26] J.R. PATEL, M. COHEN. Acta Metall., 1953, 153.
- [27] G.W. GREENWOOD and R.H. JOHNSON. Proc. Roy. Soc. 1965, 283A, 403.
- [28] E. GAUTIER, X.M. ZHANG, A. SIMON. Proceedings Int. Conf. on Residual Stresses (ICRS2), Ed. G. BECK, S. DENIS, A. SIMON, Elsevier Applied Science, 1989, 393.
- [29] F. ABRASSART. Thèse de Doctorat ès-Sciences Physiques, Université de Nancy I, 1972.
- [30] J.B. LEBLOND, J. DEVAUX, Int. J. of Plasticity, 1989, Vol.5, 551.
- [31] RANIECKI. Materials Science and Technology, Vol.1, N°10, 1985, 857.
- [32] F.D. FISCHER. Transformation induced plasticity in triaxially loaded specimens subjected to a martensite transformation. Accepted for publication in European J. of Mech., 1991.
- [33] K.C. HWANG, Q.P. SUN, Proceedings of the Sixth International Conference on Mechanical Behaviour, Kyoto, Japan. Vol. VI, 1991, 159.
- [34] Y.DESALOS, J.GIUSTI, F.GUNSBERG, "Déformations et contraintes lors du traitement thermique de pièces en acier". Report N° 902, IRSID Saint-Germain-en-Laye (1982).
- [35] C.L. MAGEE, Ph. D. Thesis, Carnegie Mellon University, 1966.
- [36] E. PATOOR. Thèse de Docteur-Ingénieur, Université de Metz, 1986.
- [37] M. BERVEILLER, A. ZAOUI. Large Deformations of Solids : Physical basis and Mathematical Modelling, 1986, Ed. J. GITTUS, J. ZARKA, Elsevier Applied Science.
- [38] W.DAVES, F.D. FISCHER. A micromechanical model for the macroscopic deformation of a specimen with growing martensitic plates in an elastoplastic parentphase. submitted to Plasticity 91, GRENOBLE, 1991.
- [39] T.GROSDIDIER, A.HAZOTTE, A.SIMON. Caractérisation de la transformation $\gamma \leftrightarrow \gamma'$ et du comportement mécanique associé dans des superalliages monocristallins à base de nickel. Actes du Colloque National sur les superalliages monocristallins, Nancy. 22-23 nov. 1990.
- [40] T.GROSDIDIER. Thèse de Doctorat INPL, à soutenir (1992).
- [41] About the contribution of internal mismatch stresses to the high temperature broadening of gamma diffraction peaks in a nickel base single crystal.
A.HAZOTTE, D.BELLET, J.F.GANGHOFFER, S.DENIS, P.BASTIE, A.SIMON
Soumis pour publication dans Phil. Mag. Letters.

DEUXIEME PARTIE

**SIMULATION PAR ELEMENTS FINIS DU
COMPORTEMENT MECANIQUE D'UN MATERIAU QUI SUBIT
UNE TRANSFORMATION DE PHASE PAR DIFFUSION**

CHAPITRE I

MODELISATION ET CALCUL DES EVOLUTIONS DE PLASTICITE DE TRANSFORMATION AVEC L'AVANCEMENT DE LA TRANSFORMATION ET L'ETAT DE CONTRAINTE APPLIQUEE

I Publication : "Finite elements calculations of the micromechanics of a diffusional transformation"

J.F. GANGHOFFER, S. DENIS, E. GAUTIER, A. SIMON, S.SJÖSTRÖM.

II Etablissement d'une loi de comportement pour la plasticité de transformation

II.1. Etats de contrainte constants au cours de l'avancement

II.2. Conditions de sollicitation uniaxiales variables avec l'avancement

Cette partie est consacrée à la simulation numérique de la plasticité de transformation pour une transformation par diffusion, que nous avons développée avec l'Université de Linköping. Ce travail a donné lieu à une publication qui constitue la première partie de ce chapitre.

Dans une deuxième partie, le modèle micromécanique développé est appliqué à la formulation d'une loi de comportement pour la plasticité de transformation.

I - PUBLICATION : "Finite elements calculations of the micromechanics of a diffusional transformation"

J.F. GANGHOFFER, S. DENIS, E. GAUTIER, A. SIMON, S.SJÖSTRÖM.

FINITE ELEMENT CALCULATION OF THE MICROMECHANICS OF A DIFFUSIONAL TRANSFORMATION

J.F. GANGHOFFER*, S. DENIS*, E. GAUTIER*, A. SIMON* and S. SJÖSTRÖM**

* Laboratoire de Science et Génie des Matériaux Métalliques CNRS UA 159,
Ecole des Mines, Parc de Saurupt, 54042 NANCY Cedex, FRANCE

** Department of Mechanical Engineering, Linköping University,
58183 LINKÖPING, SWEDEN

ABSTRACT

A micromechanical model for diffusional transformations has been developed. A "unit cell" of the material with suitable boundary conditions is modelled by a 3D F.E. mesh, over which the transformation will develop in a successive way. We use two different descriptions of the transformation, namely a spherical growth of nuclei of the new phase and a random progression model. An external stress state is applied to the cell, resulting in a transformation plastic strain, the evolution of which we study versus the progress of the transformation. We have chosen the example of an isothermal pearlitic transformation of a steel.

In the case of the spherical growth model, the influence of F.E. mesh on the level of transformation plastic strain is quite large. On the contrary, the random progression model presents much smaller influence of F.E. mesh and boundary conditions used. We compare our results with those of analytical models and experiments.

KEYWORDS

MICROMECHANICS, PHASE TRANSFORMATIONS, FINITE ELEMENT MODELS, TRANSFORMATION PLASTICITY.

INTRODUCTION

During the phase transformation of a material under stress, interactions occur between the stresses and the transformation process resulting in kinetics modifications and transformation plasticity deformation Denis et al., 1985, Gautier et al. 1987a .

In the present work we study the mechanical behaviour on a microscopic scale of a material subjected to an external stress state (the scale of the phases) and determine as a main result the evolution of the induced transformation plastic strain (transformation plasticity).

The occurrence of transformation plasticity can be explained by two basic mechanisms Gautier et al., 1987b , i.e. i) orientation of the product phase by the stress state and ii) anisotropic plastic accommodation of transformations strains.

A number of theoretical models have been set up for describing transformation plasticity Denis et al., 1989 . Some numerical simulations taking into account mechanism ii) have also been performed Desalos et al., 1982, Sjöström, 1986, Leblond et al., 1989 but they have only been applied to martensitic transformations.

We have undertaken finite element simulations on one hand for a transformation occurring with nucleation and growth for which only mechanism ii) needs to be considered Sjöström et al. 1989 and on the other hand for a martensitic transformation where mechanism i) has also to be considered (Simonsson et al., 1990).

final size state, that is the pearlite nodule radius does not vary (fig.2).

The order of the transformation is given by a random number generator, each transformation step corresponding to the transformation of one element. (the unit cell in this case is a volume element representing the whole specimen).

For this model, a priori we have no natural symmetries as we had in the spherical model. On the other hand, if the randomness of the model is sufficient, there will be no important influence on the FEM solution of using the same symmetry conditions as for the spherical growth model, and for technical reasons we have kept them for most calculations in the case of the random model too.

The real transformation path (continuous nucleation and spherical growth), as can be inferred from the microstructure (fig. 3), lies between these two descriptions. Moreover the model needs a cubic geometry of the cell leading to a "cubic growth", although the transformation is rather spheroidal.

Calculations have been done for both 4x4x4 and 6x6x6 meshes, using a linear subdivision (leading to 64 and 216 transformation steps respectively).

2. DESCRIPTION OF THE RUN

2.1. F.E. capability

The F.E. code used for the calculations is ASKA. The smallest calculations have been performed on an APOLLO 3000 workstation (typically, 4x4x4, 6x6x6 meshes for the spherical growth model and a 4x4x4 mesh for the random model), whereas the larger runs have been done on the CRAY-XMP 48 computer at the Swedish National Supercomputer Center in LINKÖPING.

2.2. Evaluation of the F.E. results

The total strain over the unit cell will be defined as the displacements of the faces divided by the cube length. In all the cases treated here, the external stress level has been kept lower than the respective yield strengths of the coexisting phases. Therefore, there will be no initial plastic flow due to the applied stress and the total strain ϵ_{ij} can be decomposed into its different contributions :

$$\epsilon_{ij} = \epsilon_{ij}^{e,ex} + \epsilon_{ij}^{tr} + \epsilon_{ij}^{tp}, \quad (1)$$

where $\epsilon_{ij}^{e,ex}$ is the elastic strain due to external loading
 ϵ_{ij}^{tr} is the transformation strain, i.e the imposed volumic variation due to the transformation,
 ϵ_{ij}^{tp} is the transformation plastic strain, i.e. the transformation plasticity deformation.

The first step of the F.E. runs is to apply the external loading. The strain at this stage is the elastic strain $\epsilon_{ij}^{e,ex}$. After that, the transformation is applied in steps as described previously, giving

$$\epsilon_{ij}^{tr} = v \delta_{ij} \cdot \epsilon^{tr,1}, \quad (2)$$

where v is the volumic transformed fraction and $\epsilon^{tr,1}$ is the isotropic transformation strain for a completed transformation in the externally unloaded case. From equation (1), the transformation plastic strain can be computed after each transformation step.

- the influence of the size of the mesh i.e transformation step
- the influence of the way the change in mechanical properties is imposed
- the influence of boundary conditions

In last part we shall analyse the influence of the transformation progress description and compare our results with experimental results.

3.1. Spherical growth model

3.1.1. Influence of transformation step

The comparison between runs 1,2,4 (4x4x4, 6x6x6 and 10x10x10 subdivisions, mechanical properties given at the beginning of the transformation step) shows that the influence of the size of the mesh is quite large (fig. 4a). At the very beginning of the transformation, the initial slope is quite similar for the three runs ; this is due to the very small size of the first transformation step (the largest is for the 4x4x4 subdivision and is about 1.56 %). Considering the behaviour in the last steps, the slope is quite near zero for the 4x4x4 mesh but increases with the size of the mesh.

This is related to two interdependent factors : the large amount of phase transformed in the last step and the allocation of the mechanical properties at the beginning of the step. For the 4x4x4 mesh, the high mechanical properties of the new phase (hard pearlite) are given to the remaining austenitic elements representing about 42 % (volumic fraction), leading to very small plastic deformations. This effect decreases when the size of the mesh increases, since the last transformation step decreases also at the same time.

Since the size of the mesh determines both the finite element discretization error and the size of the transformation step, we have separated both effects by performing a set of runs with the same mechanical properties to both phases. Results of runs 5 (6x6x6 mesh) and 6 (10x10x10 mesh) (fig. 4b) are quite identical, so we can conclude that almost no influence of F.E. discretization occurs in this case.

3.1.2. Influence of the way of imposing mechanical properties

The comparison between runs 2 and 3 (fig. 5a) shows that imposing the change of mechanical properties at the end of the transformation step leads to much higher values of the transformation plastic strain than changing the mechanical properties at the beginning of the step. It is essentially related to the fact that the transforming layer deforms plastically more when its yield stress is low during its transformation. As expected, the difference between the 'beg' and 'end' cases becomes less important for the finer mesh as can be evidenced from runs 4 and 9 (fig. 5a).

The calculations performed by varying continuously the mechanical properties within the transformation step show results quite near those of the 'beg' case (fig. 5b). The explanation is that the occurrence of local plasticity depends on the rate of increase of internal stresses created by the transformation progress compared to the rate at which the mechanical properties are increased via the mixture law. Due to the large yield stress of pearlite, these rates are such that local plasticity occurs as in the 'beg' case.

transformation (at different scales) should represent the same macroscopic behaviour.

In addition a good agreement is found between the evolution law obtained from our models and the one derived by Leblond et al., 1989 from a homogenization procedure (transformations plasticity strain is proportional to $V(1-\ln V)$). For a full transformation the slopes $d\varepsilon_{11}^{tp}/d\sigma_{11}$ obtained with our simulation (random progression model : 0.85×10^{-4}) is close to the ones calculated with other models (Greenwood-Johnson : $1.2 \times 10^{-4} \text{ MPa}^{-1}$, Leblond : $0.96 \times 10^{-4} \text{ MPa}^{-1}$).

3.4. Comparison with experiment

Finally, the comparison between our calculated results and the experimental ones (fig. 8) shows acceptable values of the transformation plastic strain till 30 % of transformation. For higher transformation contents, a "hardening" is observed for the model while experience shows a constant increase in transformation plasticity. Moreover recent calculations done considering the same mechanical properties of the two phases (for the random progression model) show an evolution of transformation plasticity close to linearity. Also the discrepancy between calculated and experimental evolutions can be related to the mechanical behaviour law of the phases. On one hand, at the considered temperature, creep contributions arise in both phases which are not taken into account. On another hand, the mechanical properties of pearlite can only be obtained for a fully transformed specimen. The mechanical properties of the transforming pearlite may be lower due to a greater defects mobility. These considerations may contribute to a larger plasticity during transformation.

CONCLUSIONS

From the results obtained by these F.E. calculations, we can draw the following conclusions :

- The spherical growth model still presents a noticeable influence of the size of the transformation step which should be further assessed, keeping in mind that calculations with finer meshes are quite heavy. Nevertheless, it must be noticed that increasing the size of the mesh from 6x6x6 to 10x10x10 (when mechanical properties are imposed at the end of the transformation step) leads to relatively small differences in the level of transformation plasticity deformation. Moreover, these results tend towards those of the random progressions model.
- The random progression model is satisfactory since a less marked effect of transformation step, mechanical properties affectation and boundary conditions occurs.
- The functional dependence of the transformation plastic strain on the volume fraction of pearlite is non linear in all cases.

This study is under development in order to take into account a time dependent mechanical behaviour of the phases and to derive a constitute law for transformation plasticity under triaxial stress states (Sjöström et al, 1991).

AKNOWLEDGMENTS

This work has been sponsored by S.T.U (National Swedish Board for Technical Development) and by C.N.R.S. (Centre National de la Recherche Scientifique). The authors wish to express their thanks to these organizations.

Table 1. Identification of the runs

Run number	Type of model (order)	Boundary conditions	Mesh	Change of Mechanical properties
1	Sph	symm	4x4x4	beg
2	Sph	symm	6x6x6	beg
3	Sph	symm	6x6x6	end
4	Sph	symm	10x10x10	beg
5	Sph	symm	6x6x6	-
6	Sph	symm	10x10x10	-
7	Sph	symm	10x10x10	cont beg
8	Sph	symm	10x10x10	cont end
9	Sph	symm	10x10x10	end
10	ran	symm	4x4x4	beg
11	ran	symm	6x6x6	beg
12	ran	tree	6x6x6	beg
13	ran	symm	6x6x6	end

Table 2. Mechanical data used

	Austenite	Pearlite
Elastic modulus E, Pa	$137.5 \cdot 10^9$	$137.5 \cdot 10^9$
Poisson's number ν	0.3	0.3
Yield strength Y, Pa	$25 \cdot 10^6$	$140 \cdot 10^6$
Hardening constant H', Pa	$3.8 \cdot 10^9$	$8.3 \cdot 10^9$
Transformation strain $\epsilon^{tr,1}$	-	$1.2 \cdot 10^{-3}$

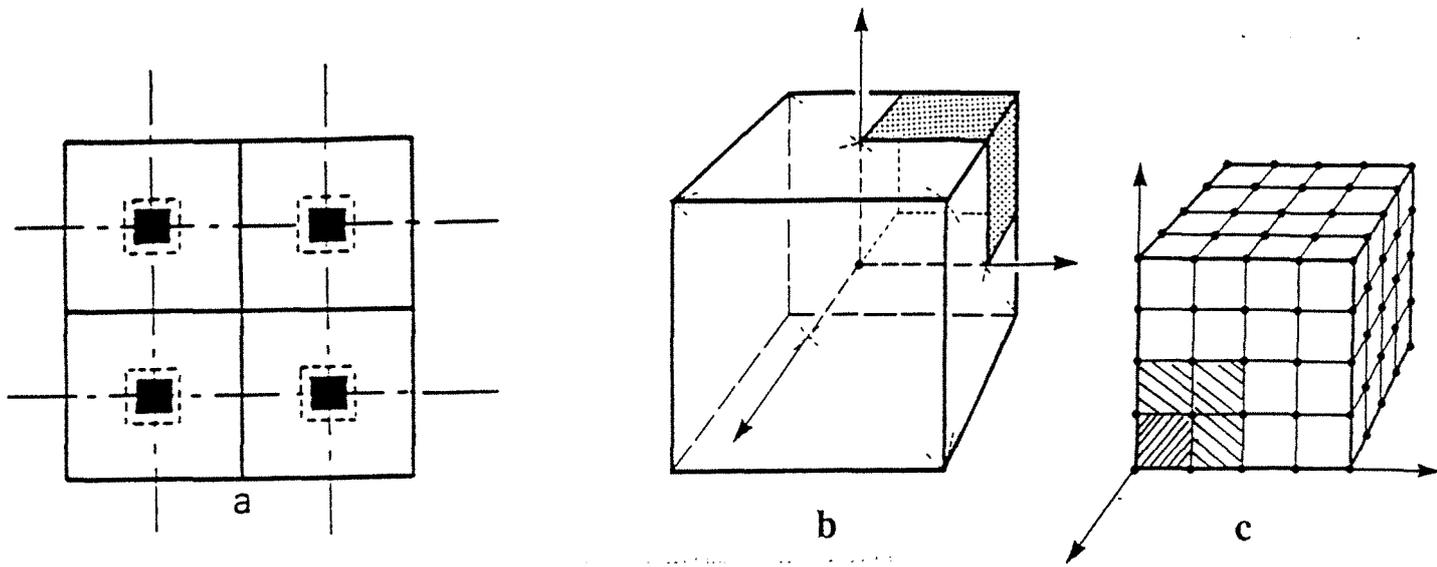


Fig. 1

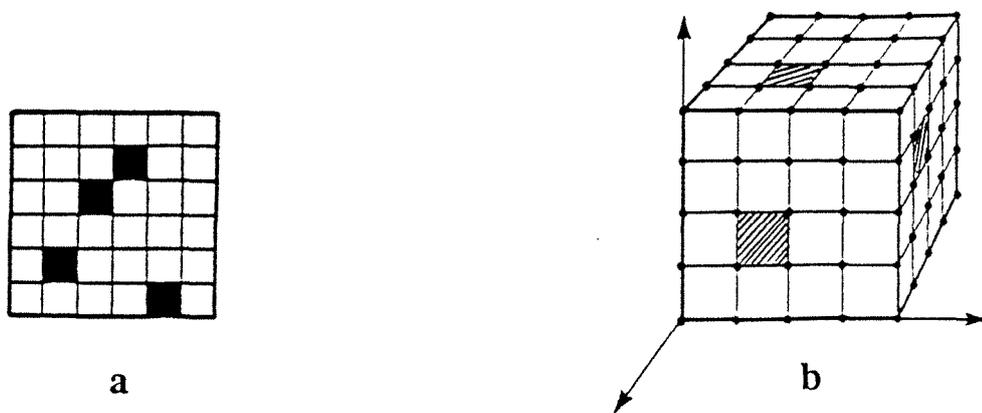


Fig. 2



Fig. 3

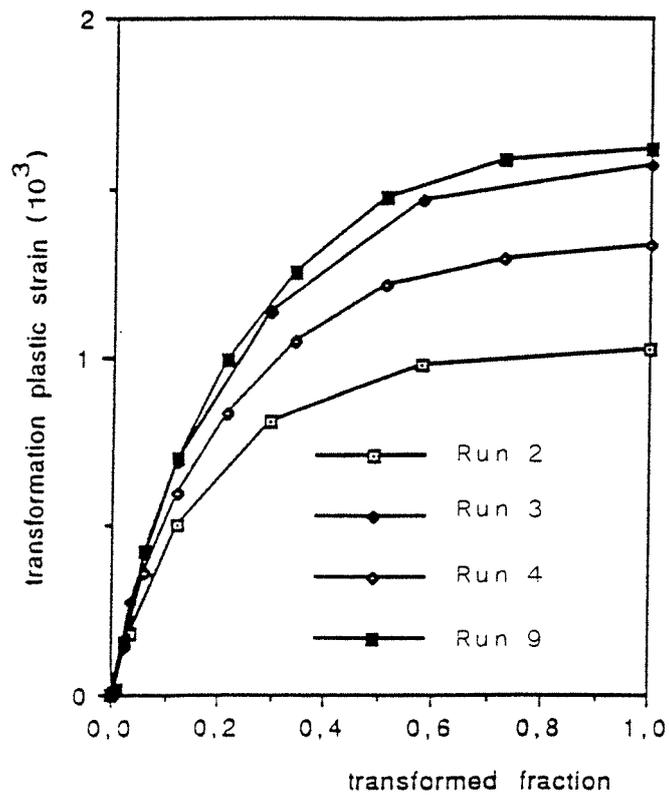


Fig. 5a

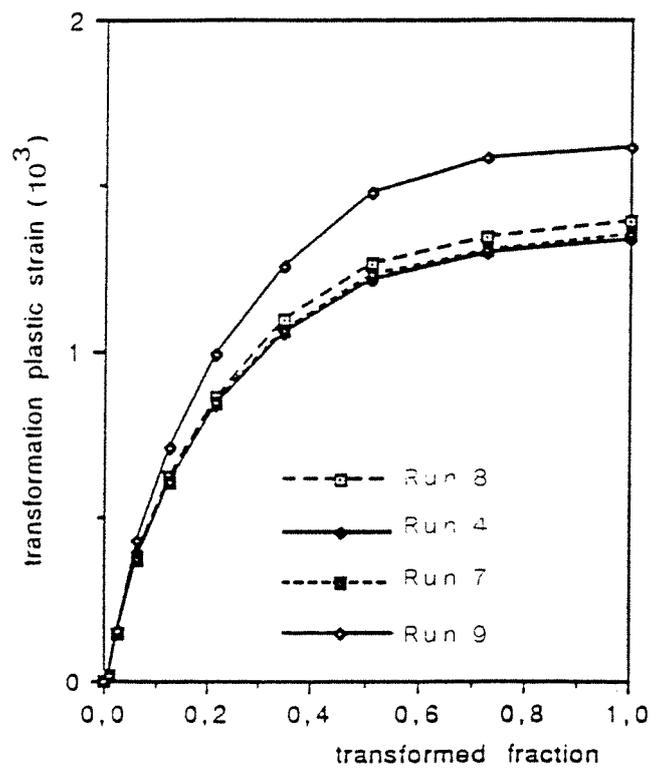


Fig. 5b

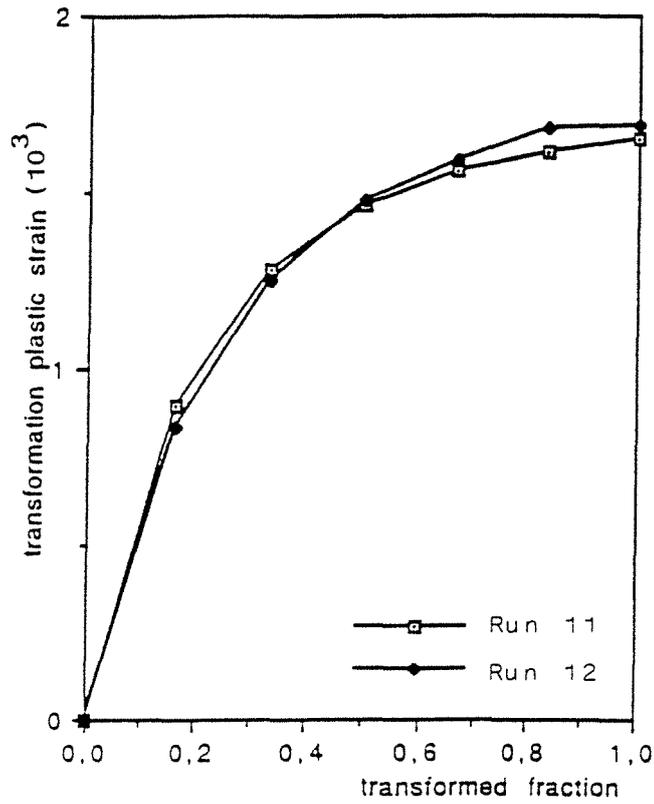


Fig. 7

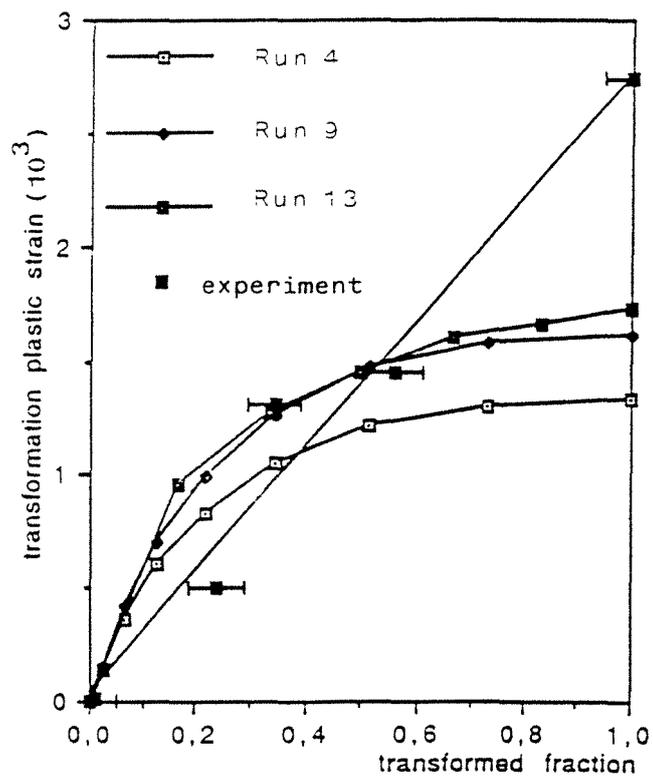


Fig. 8

II. ETABLISSEMENT D'UNE LOI DE COMPORTEMENT POUR LA PLASTICITE DE TRANSFORMATION

Dans cette partie, nous analysons les évolutions de la plasticité de transformation pour différentes conditions de sollicitations mécaniques appliquées pendant la transformation. Le cas d'états de contraintes uniaxiaux et multiaxiaux constants sera abordé successivement, avant d'envisager des sollicitations uniaxiales variables en fonction de l'avancement de la transformation. Dans la suite, nous réservons les notations majuscules pour les grandeurs macroscopiques définies à l'échelle de la cellule et les minuscules pour les grandeurs locales (échelle des phases).

II.1. ETATS DE CONTRAINTE CONSTANTS AU COURS DE L'AVANCEMENT

La cellule de base a été soumise à des états de contraintes externes constants (appliqués sur les faces de la cellule), uniaxiaux, biaxiaux et triaxiaux, ce pour les deux types de description d'avancement de la transformation (par croissance sphérique ou au hasard). Les conditions de sollicitation pour l'ensemble des calculs effectués sont rassemblées dans le tableau 1 ci-dessous : valeurs des contraintes pour chaque direction (Σ_{11} , Σ_{22} , Σ_{33}) et déviateurs correspondants (S_{11} , S_{22} , S_{33}). Notons qu'en raison des symétries géométriques inhérentes au modèle sphérique (existence de plans de symétrie externe simulant la présence de cellules voisines identiques), nous ne pouvons imposer que des contraintes normales aux faces de la cellule.

Calcul N°	Σ_{11}	Σ_{22}	Σ_{33}	S_{11}	S_{22}	S_{33}
1	0	0	0	0	0	0
2	5	0	0	3.333	- 1.666	- 1.666
3	10	0	0	6.666	- 3.333	- 3.333
4	15	0	0	10	- 5	- 5
5	20	0	0	13.333	- 6.666	- 6.666
6	30	0	0	20	- 10	- 10
7	10	10	0	3.333	3.333	- 6.666
8	20	20	0	6.666	6.666	- 13.333
9	20	20	10	3.333	3.333	- 6.666

Tableau 1 : Conditions de sollicitation (en MPa)

La contrainte externe est maintenue en dessous de la limite d'élasticité de l'austénite (25 MPa), à l'exception d'un calcul pour lequel une contrainte uniaxiale de 30

MPa est appliquée. Dans ce cas, l'évaluation de la plasticité de transformation nécessite de soustraire de la déformation totale de la cellule non seulement la déformation élastique et la déformation de transformation (à chaque pas), mais également la déformation plastique initiale due à la contrainte appliquée (il se produit dans cette situation une plastification originelle uniforme du volume de la cellule).

II.1.1. Conditions de sollicitations uniaxiales

Les évolutions de la plasticité de transformation en fonction de la contrainte uniaxiale appliquée sont reportées pour les deux modèles en figure 1a,b (maillage de 4.4.4 éléments pour le modèle de progression aléatoire et de 10.10.10 éléments pour le modèle de croissance sphérique), les propriétés mécaniques étant imposées à la fin du pas de transformation.

La fraction volumique de perlite formée est un paramètre pour chacune des deux courbes. On peut noter la non-linéarité marquée pour les taux de transformation faibles qui se traduit par une augmentation de la pente $dE_{11}^{Pl}/d\Sigma_{11}$ qui se produit à 15 MPa pour le modèle sphérique et entre 10 et 20 MPa pour le modèle aléatoire. Lorsque la contrainte appliquée devient supérieure à la limite d'élasticité de l'austénite, pour le modèle sphérique nous n'observons pas de nouveau changement de pente sauf pour les taux de phase transformée très faibles (inférieurs à 3%). Nous verrons par la suite que ces tendances peuvent être corrélées aux distributions de déformation plastique locale que nous présenterons dans le chapitre suivant.

Pour une transformation complète, nous comparons dans le tableau 2 ci-dessous les pentes $dE_{11}^{Pl}/d\Sigma_{11}$ obtenues par notre simulation avec celles calculées pour des modèles analytiques (que nous avons présentés dans la revue bibliographique du chapitre I), ce pour des niveaux de sollicitation inférieurs à la limite d'élasticité de l'austénite.

	Greenwood -Johnson	Abrassart	Leblond	Notre simulation
$dE_{11}^{Pl}/d\Sigma_{11}$ (MPa ⁻¹)	$1,2 \times 10^{-4}$	$3,6 \times 10^{-5}$	$9,6 \times 10^{-5}$	Sphérique $8,34 \cdot 10^{-5}$ Aléatoire $1,02 \cdot 10^{-4}$

Tableau 2 : Comparaison des pentes $dE_{11}^{Pl}/d\Sigma_{11}$ entre notre simulation et des modèles analytiques.

Nous avons reporté dans chacune des expressions obtenues par ces modèles analytiques les données mécaniques de la simulation. Nos résultats sont proches de celui obtenu par LEBLOND. Cela peut s'expliquer d'une part par les hypothèses géométriques que l'auteur pose dans son modèle (coeur de phase nouvelle en formation dans une gaine d'austénite, les deux ayant une forme sphérique) qui sont analogues à celles de la simulation dans le cas sphérique. D'autre part, l'auteur suppose également un comportement élastique de la phase formée. Or, les résultats locaux de notre simulation ont montré que la déformation plastique locale générée apparaît essentiellement dans l'austénite et reste d'amplitude beaucoup plus faible dans la perlite.

II.1.2. Conditions de sollicitations multiaxiales

Nous avons reporté en figure 2 a, b, c les composantes E_{ij}^{Pl} du tenseur de déformation de plasticité de transformation en fonction de la composante associée du déviateur des contraintes appliquées S_{ij} , pour les cas de sollicitations figurant dans le tableau 1. Trois "instants" de la transformation ont été considérés, correspondant à des fractions transformées de 12,5% (a), 50% (b) et 100% (c). Pour chacune d'entre elles, les résultats des deux modèles d'avancement ont été reportés, ce qui permet de les comparer.

La relation $E_{ij}^{Pl}(S_{ij})$ est quasi linéaire, la linéarité étant la mieux respectée en fin de transformation (de façon analogue au cas uniaxial). Seul le résultat obtenu pour une contrainte uniaxiale de 30 Mpa ($S_{11} = 20$ MPa) dans le cas du modèle aléatoire s'en écarte de façon sensible.

Les résultats obtenus permettent alors de formuler une loi constitutive pour la plasticité de transformation qui fait apparaître celle-ci comme étant proportionnelle au déviateur des contraintes : $E_{ij}^{Pl} = C S_{ij}$. Pour une transformation complète, la constante C a pour valeur $C = 9.10^{-5}$ MPa⁻¹ (valeur moyenne pour les deux modèles). Cette proportionnalité confirme le résultat théorique obtenu par LEBLOND. Il apporte également une justification aux approches phénoménologiques basées sur la thermodynamique des processus irréversibles, telle l'approche développée par GIUSTI, qui conduisent à introduire dans la loi de comportement du matériau la plasticité de transformation comme une déformation inélastique supplémentaire dépendant de façon linéaire du déviateur de contraintes. Toutefois, cette forme de loi a été obtenue pour des

contraintes appliquées constantes ; dans la suite, nous allons asseoir sa validité par des calculs où l'état de contrainte varie au cours de l'avancement de la transformation.

II.2. CONDITIONS DE SOLLICITATIONS UNIAXIALES VARIABLES AVEC L'AVANCEMENT DE LA TRANSFORMATION

Afin de réduire les temps de calcul, nous avons considéré une progression aléatoire de la transformation par groupe d'éléments pour un maillage de $6 \times 6 \times 6$ éléments, l'avancement s'effectue par la transformation de groupe de 6 éléments à chaque pas, nécessitant un total de 36 pas.

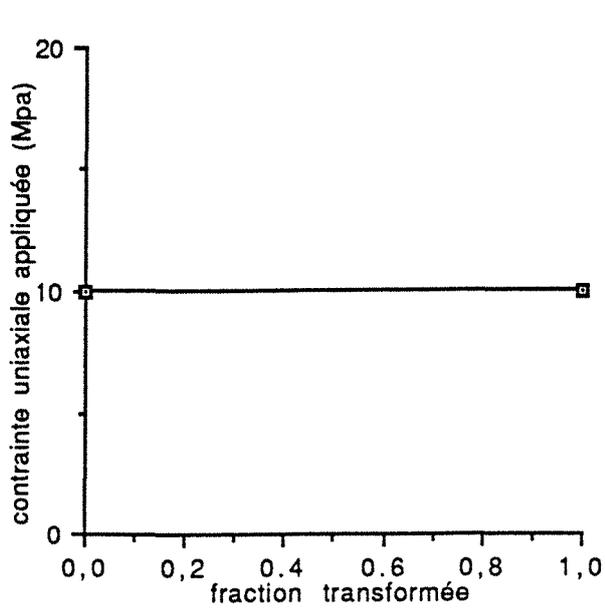
Les résultats d'un calcul à 20 MPa pour ce type de progression de la transformation montrent que les niveaux de plasticité de transformation sont plus élevés que dans le cas d'une transformation élément par élément, surtout lorsque les propriétés sont données en fin de pas (fig.3).

Bien que ce modèle donne une description moins fine de la transformation, il est cependant utilisable compte tenu de notre objectif dans ce paragraphe.

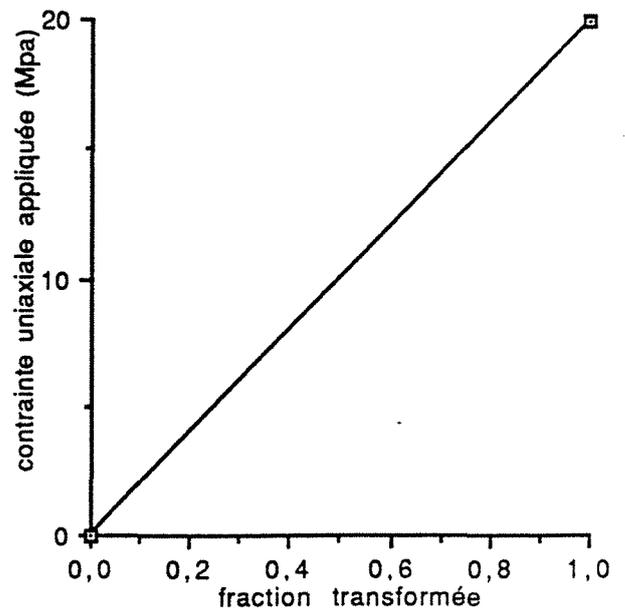
Nous considérons alors le cas de propriétés mécaniques affectées en fin de pas de transformation pour les calculs qui suivent.

Différentes lois d'évolution de la contrainte appliquée (uniaxiale) en fonction de l'avancement de la transformation ont été utilisées dans le but de mettre en évidence un éventuel effet d'histoire de la sollicitation externe sur le développement de la plasticité de transformation. Elles sont présentées figure 4 et comportent deux cas de sollicitations constantes (10 et 20 MPa) et deux lois de variation linéaire de la contrainte avec la fraction transformée (la première croissante de 0 à 20 MPa et la seconde décroissante de 20 à 0 MPa). Sur la figure 5, nous avons porté les évolutions de la plasticité de transformation calculées pour les 4 lois de variation de contrainte de la figure 4.

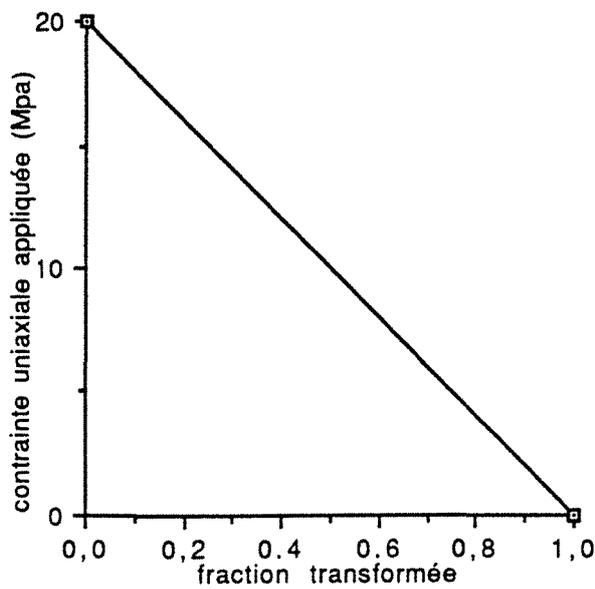
Nous comparons alors les pentes de plasticité de transformation dEP^l/dx pour un même état d'avancement associé à un même niveau de contrainte. Les possibilités de comparaison sont les cas b et d (fraction transformée $x=1$, $\sigma=20$ Mpa) et les cas a, b, c ($x=0,5$, $\sigma=10$ Mpa). Les pentes ainsi obtenues sont présentées dans le tableau 3 ci-dessous.



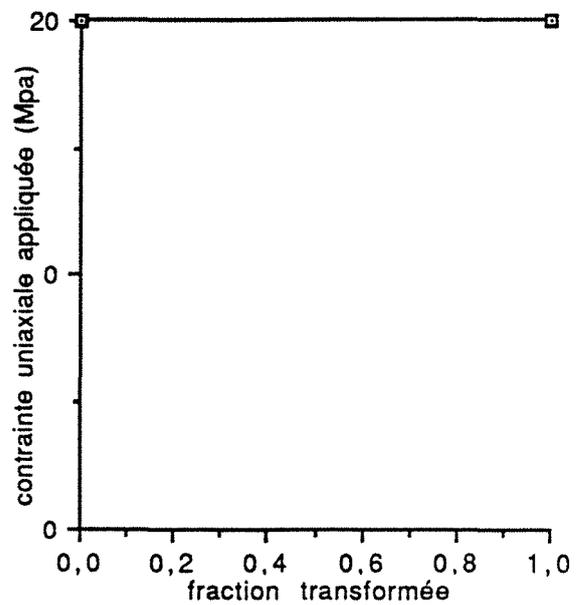
a) $S = 10 \text{ Mpa}$



b) $S = 20x$



c) $S = 20(1-x)$



d) $S = 20 \text{ Mpa}$

Figure 4 : Lois d'évolution de la contrainte uniaxiale appliquée en fonction de l'avancement de la transformation. Modèle de progression aléatoire par groupe de 6 éléments. Propriétés mécaniques imposées en fin de pas.

- a) Contrainte appliquée constante de 10 Mpa.
- b) Contrainte appliquée linéairement croissante de 0 à 20 Mpa.
- c) Contrainte appliquée linéairement décroissante de 20 à 0 Mpa.
- d) Contrainte appliquée constante de 20 Mpa.

Conditions de sollicitation (fig.31)	Fraction transformée x	1/2	1
	a		7.10^{-4}
b		7.10^{-4}	$3,6.10^{-4}$
c		7.10^{-4}	-
d		-	$3,5.10^{-4}$

Tableau 3 : Comparaison des pentes de l'évolution de la plasticité de transformation en fonction de la fraction transformée pour les conditions de sollicitation de la figure 4 évaluées pour les fractions $x = 1/2$; $x = 1$.

Des valeurs similaires de pente dEP^l/dx sont obtenues à $x = 0,5$ pour les cas a, b et c, comme le montrent la figure 5 et le tableau 3. De même, une bonne concordance des pentes apparaît en fin de transformation entre les cas b et d.

Par ailleurs, le calcul avec une sollicitation externe linéairement décroissante (de 20 à 0 MPa) au cours de l'avancement montre bien qu'aucun effet d'une anisotropie initiale de l'écoulement plastique (dû à l'état de contrainte externe non nul) ne perturbe l'évolution finale de la plasticité de transformation : pour la transformation complète, la contrainte appliquée est nulle et on observe effectivement une valeur nulle du taux de déformation de plasticité de transformation ($dEP^l/dx = 0$).

Le taux de variation (par rapport à la fraction transformée) de la plasticité de transformation est donc le même en fonction du niveau de contrainte appliquée, quelle que soit l'histoire antérieure de la sollicitation externe.

On en déduit que la déformation de plasticité de transformation vérifie une loi d'évolution du type $dEP^l/dx = K \Sigma f(x)$ dans le cas uniaxial et ne dépend donc pas du taux de variation de contrainte.

Les résultats obtenus dans ce paragraphe confirment donc la validité de la loi constitutive obtenue précédemment pour la plasticité de transformation qui s'exprime sous la forme $d\underline{EP}^l/dx = 3/2 K f(x) \underline{S}$, où la constante K dépend des propriétés mécaniques des deux phases et du changement de volume associé à la transformation. Cette loi peut être intégrée dans le cas de sollicitations maintenues constantes au cours de l'avancement.

CHAPITRE II

ANALYSE DES ETATS MECANQUES LOCAUX ET CORRELATION AVEC LES EVOLUTIONS DE LA PLASTICITE DE TRANSFORMATION

I - CHOIX DES PARAMETRES ET DES LIEUX D'ANALYSE

- I.1. Paramètres mécaniques
- I.2. Selection des lieux d'analyse

II - ANALYSE DES EVOLUTIONS DES PARAMETRES LOCAUX

- II.1. Modèle de croissance sphérique
 - II.1.1. Effet du niveau de contrainte appliquée
 - a) Contrainte appliquée nulle
 - b) Contrainte appliquée non nulle
 - II.1.2. Effet de la manière d'imposer les propriétés mécaniques
- II.2. Modèle de progression aléatoire
- II.3. Synthèse

III - DISCUSSION

- III.1. Loi de comportement des phases
 - III.1.1. Effet du comportement à l'écroutissage
 - III.1.2. Introduction d'un comportement visqueux des phases
 - III.1.3. Cas de propriétés des phases identiques
- III.2. Effet d'interactions entre cellules voisines

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

ANALYSE DES ETATS MECANIQUES LOCAUX ET CORRELATION AVEC LES EVOLUTIONS DE LA PLASTICITE DE TRANSFORMATION

Les résultats de la simulation d'une transformation par diffusion présentés dans la publication du chapitre précédent concernent les évolutions de la plasticité de transformation avec l'avancement de la transformation et avec la contrainte appliquée. Elles ont été discutées pour les deux modèles (de croissance sphérique et de progression aléatoire) en fonction des paramètres principaux que sont la finesse de la discrétisation, la manière d'imposer les propriétés mécaniques à la nouvelle phase, le type de conditions limites. La transformation effectuée sous sollicitation mécanique induit des comportements locaux témoignant de l'effet de la déformation de transformation imposée, la plasticité de transformation n'étant qu'une traduction macroscopique de ces effets.

La simulation aux éléments finis de phénomènes se situant à l'échelle des phases est alors d'autant plus intéressante qu'elle permet également d'avoir accès au développement des zones plastiques (ainsi que d'autres paramètres mécaniques locaux) formées autour des particules de phase nouvelle. Elle permet ainsi l'analyse d'une information de caractère local que ni l'expérience (échelle macroscopique) ni les modèles analytiques (souvent fondés sur une hypothèse simplificatrice d'uniformité des taux de déformations) (LEBLOND, FISCHER) ou de contrainte (RANIECKI) ne permettent d'aborder aisément.

Aussi est-il intéressant d'analyser pour chacun des deux modèles les résultats locaux de la simulation et d'essayer de les corrélérer aux évolutions correspondantes de la plasticité de transformation. Cette analyse sera menée dans le cas de sollicitations mécaniques appliquées uniaxiales constantes.

L'origine de la plasticité de transformation étant liée dans le cas présent à l'accommodation anisotrope de l'écoulement plastique, nous définissons en premier lieu des paramètres locaux rendant compte de ce mécanisme ainsi que les lieux géométriques sur lesquels l'analyse sera effectuée.

L'étude des états mécaniques locaux sera conduite d'abord pour le modèle de progression sphérique. Nous analyserons les effets des principaux paramètres du modèle sur les champs locaux de contrainte et de déformation et essayerons de les corrélérer aux évolutions de la plasticité de transformation. Dans le cas du modèle aléatoire, l'analyse des champs locaux est rendue beaucoup

plus complexe du fait de la topologie de progression de la transformation ; aussi ne donnerons-nous que quelques éléments d'analyse pour ce modèle.

Dans cette étude, nous intégrerons d'autres résultats de calculs obtenus plus récemment ou n'ayant pas été présentés dans la publication du chapitre II.

I - CHOIX DES PARAMETRES MECANIQUES ET DES LIEUX D'ANALYSE

I.1. Paramètres mécaniques

Parmi les résultats (à caractère local) que fournit le calcul, l'apparition et le développement des zones plastiques constitue évidemment un centre d'intérêt majeur de l'analyse. Le paramètre qui permet de mesurer ce type d'information et que nous privilégierons par la suite est la déformation plastique équivalente cumulée que nous notons ε_p , définie par $\varepsilon_p = \int \left(\frac{2}{3} d\underline{\underline{\varepsilon}}^p : d\underline{\underline{\varepsilon}}^p \right)^{1/2}$.

Pour une transformation par diffusion, la plasticité de transformation est un reflet de la plasticité développée localement autour de "particules" de phase nouvellement formée. Une mesure scalaire de la déformation plastique locale est cependant insuffisante pour expliquer son développement. La plasticité de transformation est due à l'orientation de l'écoulement plastique local par l'état de contrainte interne. La plasticité de transformation dépend de l'orientation de l'état de sollicitation appliquée : aucun écoulement plastique n'est observé à l'échelle globale de la cellule pour une simulation sous contrainte nulle, bien que la plasticité apparaisse localement. Cela est dû à une accommodation d'ensemble isotrope de l'écoulement plastique local.

On déduit de ces considérations que la plasticité de transformation provient d'une microplasticité favorablement orientée par l'état de contrainte externe. Dans le but de corréler le développement local de la transformation avec celui de la plasticité de transformation, nous avons donc introduit un paramètre supplémentaire qui permet de quantifier l'effet de la contrainte externe sur l'orientation de l'écoulement plastique local. Il est défini comme suit :

$$\eta = \frac{3}{2} \frac{\underline{\underline{\sigma}}^D : \underline{\underline{\Sigma}}^D}{J_2(\underline{\underline{\sigma}}) J_2(\underline{\underline{\Sigma}})}$$

où $\underline{\underline{\sigma}}^D$ et $\underline{\underline{\Sigma}}^D$ sont les déviateurs des états de contraintes internes et appliquées respectivement et η est normé à l'unité ($|\eta| < 1$) en divisant le produit doublement contracté du numérateur par le produit

des normes (au sens de Von Mises) des deux tenseurs. Une valeur unité (1 ou -1) est obtenue pour η lorsque les directions principales des tenseurs $\underline{\underline{\sigma}}$ et $\underline{\underline{\Sigma}}$ sont alignées, ce qui traduit une forte influence de la sollicitation appliquée sur l'orientation de l'écoulement plastique (elle conduit à une déformation plastique dans les directions principales de $\underline{\underline{\Sigma}}$).

Inversement, une valeur faible (en valeur absolue) signifie un couplage faible entre elles. Dans le cas particulier des calculs à contrainte appliquée nulle ou hydrostatique, η est nul par définition et il sera alors plus judicieux d'analyser la forme des zones plastiques développées au cours de l'avancement de la transformation. Nous appellerons η le facteur d'anisotropie dans la suite du développement. Notons que LEBLOND [1] a utilisé ce même paramètre afin de vérifier à partir des résultats d'une simulation aux éléments finis certaines hypothèses effectuées dans son modèle analytique .

En plus de ces deux paramètres qui permettent plus spécifiquement de corrélérer le passage du front de transformation et le développement de la plasticité de transformation, nous étudierons dans certains cas les évolutions de la contrainte hydrostatique σ_H qui permet de visualiser la mise en compression du matériau liée au passage du front de transformation (et sa remise en traction ultérieure) et de la contrainte équivalente σ_e qui quantifie le passage élastique-plastique ainsi que le phénomène d'écrouissage.

I.2. Sélection des lieux d'analyse

i) Dans le cas du modèle de progression sphérique, comme nous l'avons décrit précédemment, il est alors possible de décrire l'avancement de la transformation par l'analyse d'un huitième de la cellule (fig. 1). La transformation débute dans le coin du volume et s'y propage par la transformation des couches successives d'éléments. Pour un maillage de 10.10.10 éléments (situation type), la transformation nécessite 10 pas principaux (fig.1).

En raison du caractère sphérique de la croissance, la cellule unité contient une direction privilégiée, soit la diagonale principale du cube qui représente en quelque sorte un axe des "temps" (permet de repérer de façon univoque le degré d'avancement de la transformation). L'application d'une sollicitation mécanique externe rompt cependant l'isotropie de la situation. Dans le cas le plus simple (et que nous considérons de façon quasi exclusive pour l'analyse des états locaux) d'une contrainte appliquée uniaxiale (direction x), un deuxième axe privilégié est celui de la contrainte.

L'essentiel de l'analyse des états locaux sera effectuée pour les noeuds de la diagonale principale du cube qui sont numérotés iii (indices égaux) avec i variant, de 1 à 11 pour un maillage de 10 éléments linéaires.

De façon générale, un noeud est numéroté ijk , où les indices i,j,k correspondent aux axes z,y et x respectivement.

ii) Dans le cas du modèle de progression aléatoire (fig.2), un pas de transformation correspond à la transformation d'un seul élément (pour un maillage de 4.4.4 éléments, il y a ainsi 64 pas), dont la position à l'intérieur du maillage est choisie de manière aléatoire. La cellule de base représente ici l'échantillon et il n'y a, par conséquent, aucune symétrie naturelle telle que dans le cas i). Il n'y a donc pas dans ce cas de direction privilégiée d'analyse et il est nécessaire de suivre les évolutions des paramètres locaux au voisinage d'un même noeud.

II - ANALYSE DES EVOLUTIONS DES PARAMETRES LOCAUX

Nous avons choisi d'analyser plus particulièrement l'influence du niveau de contrainte appliquée et de la manière d'imposer les propriétés mécaniques à la nouvelle phase pour chacun des modèles (sphérique et aléatoire).

II.1. MODELE DE CROISSANCE SPHERIQUE

II.1.1. Effet du niveau de contrainte appliquée

a) Contrainte appliquée nulle

Le calcul à contrainte nulle permet de se faire une première idée des effets locaux de la transformation. Les figures 3 et 4 montrent les évolutions en fonction de l'avancement de la transformation de la déformation plastique cumulée ϵ_p et de la contrainte hydrostatique σ_H pour les noeuds diagonaux respectivement. Nous avons décrit l'avancement de la transformation par le pas de transformation correspondant afin de ne pas "écraser" les résultats pour les taux faibles (le cinquième pas représente une fraction transformée de 12,5% seulement). Les propriétés mécaniques sont affectées à la fin de chaque pas de transformation à la nouvelle phase (perlite).

Nous avons réduit l'information présentée aux noeuds 3.3.3, 5.5.5, 7.7.7, 9.9.9 et 11.11.11 pour une plus grande clarté de l'exposé. Le suivi de l'évolution de ϵ_p pour ces noeuds fait apparaître une plastification graduelle au fur et à mesure de l'avancée du front de transformation. Par exemple,

le noeud 5.5.5 est très peu plastifié jusqu'au pas 3 ; il est affecté par la transformation au pas 4 lors duquel la quatrième couche d'éléments se transforme. L'essentiel de la plastification se produit entre les pas 3 et 5 où le noeud est balayé par le front de transformation. Au-delà, on observe une saturation très rapide de la plasticité locale (très peu d'accroissement de ϵ_p est observé pour le noeud 5.5.5 au-delà du cinquième pas), car le noeud transformé a alors les propriétés élevées de la nouvelle phase. On déduit de ce calcul à contrainte nulle que l'essentiel de la plastification s'effectue pendant le passage du front de transformation (lorsque le matériau a les propriétés mécaniques de l'austénite).

L'occurrence plus tardive de la transformation dans les couches d'éléments qui sont les plus proches de la surface extérieure du cube conduit à une plasticité plus faible pour ces noeuds de surface (ϵ_p est nulle pour le noeud 11.11.11). Les niveaux atteints sont cependant comparables pour les noeuds internes (ex : 3.3.3) et ceux proches des bords externes (ex : 7.7.7) ; ils sont de l'ordre de grandeur de 10^{-3} à $1,7 \cdot 10^{-3}$.

L'effet de la transformation sur l'évolution des contraintes internes est clairement mis en évidence par les passages en compression qui accompagnent le passage du front de transformation (fig. 4). La contrainte hydrostatique chute brutalement au moment où le noeud est affecté par la transformation, devient négative et le matériau repasse ensuite en traction (par exemple, le noeud 7.7.7 passe en compression au pas 6 pour lequel $\sigma_H \approx -10$ MPa et atteint en fin de transformation une valeur $\sigma_H \approx 60$ MPa). La transformation tardive des noeuds proches de la surface externe conduit pour ceux-ci à une chute de σ_H pendant laquelle le matériau reste cependant en traction (ex : 9.9.9).

Comme nous l'avons déjà mentionné, aucune déformation plastique n'est observée à l'échelle macroscopique, même si les résultats de calcul montrent une plasticité locale relativement importante. Cela est dû à un écoulement plastique de caractère isotrope autour des particules formées conduisant globalement à une déformation de plasticité de transformation nulle.

Afin de tester la forme des zones plastiques, nous avons considéré les noeuds situés dans un plan de coupe du maillage perpendiculaire à la diagonale principale du cube, d'équation $x=y=z$. un tel plan a donc pour équation $x+y+z = k$, où k représente la distance du plan à l'origine. Pour un noeud donné dans un tel plan (défini par ses indices i,j,k), les noeuds obtenus par permutation des indices i,j,k (par ex. les noeuds 345,354,435,453,543,534) sont équidistants de la diagonale principale et s'inscrivent donc dans un 'cercle'. Pour cet ensemble de noeuds, nous avons alors vérifié que la déformation plastique obtenue est identique, ce qui confirme le caractère isotrope de l'écoulement plastique à contrainte nulle.

b) Contrainte appliquée non nulle

Il est alors intéressant de considérer un calcul effectué sous sollicitation non nulle (pour lequel une plasticité de transformation se développe) et d'analyser les effets induits sur le développement de la plasticité locale. Nous considérons tout d'abord le calcul effectué sous sollicitation externe uniaxiale de 20 MPa avec des propriétés mécaniques imposées à la nouvelle phase en fin de pas de transformation (fig. 5).

Un premier effet lié à l'application d'une contrainte est d'augmenter de façon générale les niveaux de déformation plastique et ce, d'autant plus que les noeuds se transforment plus tardivement. Les évolutions de ϵ_p pour le noeud 333 sont très similaires pour les deux cas de contrainte (nulle et 20 MPa) alors qu'une différence sensible de niveaux apparaît pour le noeud 5.5.5 ($\epsilon_p(5.5.5) = 1,7 \cdot 10^{-3}$ pour une contrainte appliquée nulle et $\epsilon_p(5.5.5) = 2 \cdot 10^{-3}$ pour 20 MPa en fin de transformation).

On dénote également pour ces noeuds internes un accroissement de plasticité qui se produit essentiellement au passage du front de transformation.

Un comportement sensiblement différent se manifeste pour les autres noeuds (plus proches de la surface externe du cube) : l'application d'une contrainte de 20 MPa conduit à une plastification antérieure de ces noeuds bien avant l'arrivée du front de transformation (les noeuds 7.7.7, 9.9.9 et 11.11.11 se plastifient au pas 2). Il en résulte des niveaux de ϵ_p beaucoup plus élevés ($\epsilon_p(9.9.9) = 1,1 \cdot 10^{-3}$ pour une contrainte appliquée nulle et $\epsilon_p(9.9.9) = 2 \cdot 10^{-3}$ pour une contrainte appliquée de 20 MPa).

Cette plastification des noeuds externes qui se produit dès le troisième pas de transformation (fraction transformée de 2,7%) est bien visualisée sur la figure 6b qui montre la déformation cumulée des noeuds diagonaux du cube aux différents pas. Il est intéressant de comparer ces distributions à celles obtenues pour une contrainte appliquée de 10 Mpa (figure 6a). En effet, on observe dans ce cas un développement graduel de la plasticité le long de la diagonale, car chaque noeud reçoit un accroissement de déformation plastique principalement lorsqu'il est balayé par le front de transformation. Par exemple, le noeud 4.4.4 est faiblement plastifié au troisième pas de transformation et un accroissement très faible de ϵ^P a lieu au-delà du cinquième pas.

A l'inverse, pour une contrainte de 20 MPa, les noeuds diagonaux situés près des bords externes du cube se plastifient dès le premier stade de la transformation (troisième pas), comme le montre la figure 6b. L'écoulement plastique est distribué de manière plus uniforme dans la cellule. Cette plastification des couches externes (noeuds proches des bords) augmente notablement lorsque la transformation progresse, contrairement à ce que nous avons observé dans le cas à 10 Mpa.

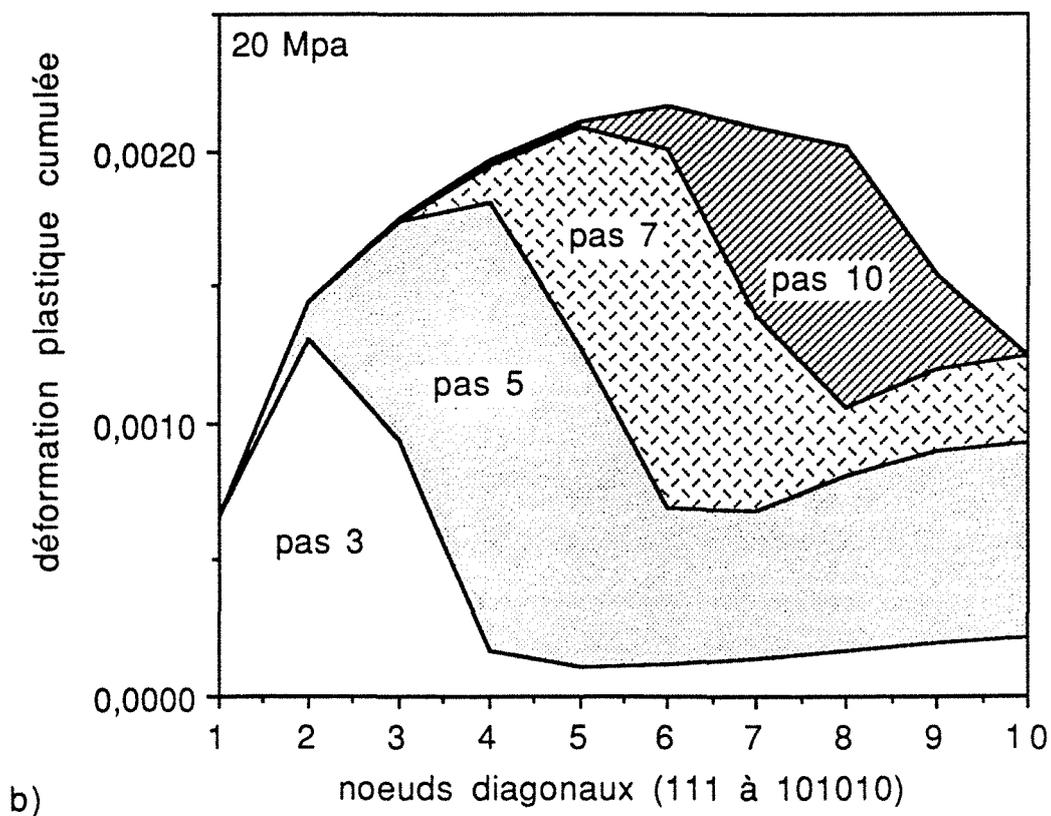
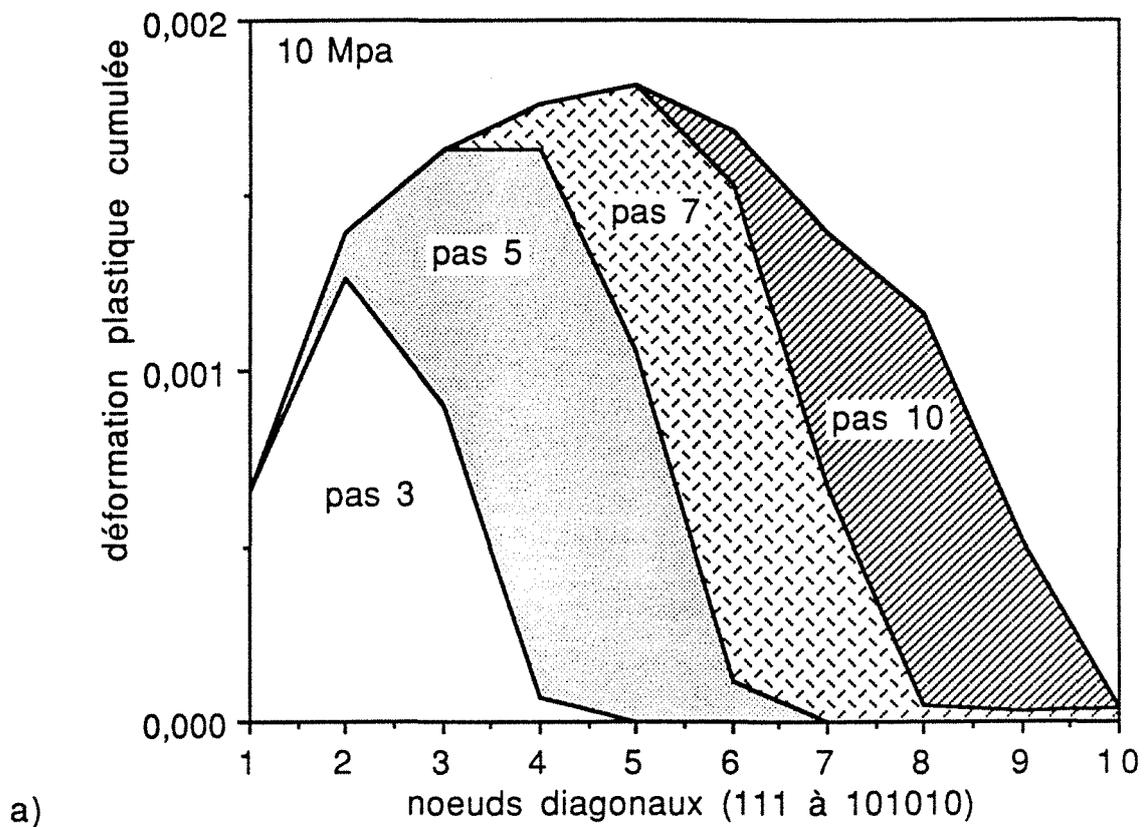


Figure 6 : Evolution de la déformation plastique cumulée le long de la diagonale principale du cube (noeuds 111 à 11.11.11) pour le modèle de croissance sphérique pour des propriétés imposées en fin de pas, pour deux niveaux de sollicitation : a) 10 MPa b) 20 MPa.

Nous avons corrélé le changement dans la distribution des zones plastiques qui se produit entre 10 et 20 Mpa à l'augmentation de la pente $dE_{11}^{Pl}/d\sigma_{11}$ que nous avons observé sur les courbes de la figure 1 du chapitre précédent. La majeure partie de la plasticité locale se développe ici aussi dans l'austénite et dans les zones en train de se transformer. Nous noterons également que quel que soit le niveau de contrainte appliquée, ce sont les noeuds situés au milieu de la diagonale (noeuds 555,666) qui subissent les déformations plastiques les plus importantes.

De même que dans le cas à contrainte nulle, nous avons étudié les symétries des zones plastiques dans ce cas relativement simple de contrainte uniaxiale appliquée (suivant x) ; nous considérons également un plan de coupe perpendiculaire à la diagonale principale du cube. Nous avons alors observé que les déformations plastiques sont identiques pour les noeuds obtenus par permutation des indices i et j : $\epsilon^P(ijk) = \epsilon^P(jik)$, ce qui montre une symétrie de l'écoulement plastique par rapport au plan d'équation $y = z$. Ceci est conforme à la symétrie identique obtenue pour le déviateur de la contrainte appliquée (dont les composantes suivant y et z sont égales à $-2/3 \sigma$). Ceci corrobore le fait que la déformation de plasticité de transformation et le déviateur de la contrainte appliquée ont mêmes directions principales.

II.1.2. Effet de la manière d'imposer les propriétés mécaniques

Les résultats des deux calculs précédents ont été obtenus dans une situation de propriétés mécaniques affectées en fin de pas et nous analysons dans ce qui suit l'effet de la manière d'imposer les propriétés mécaniques à la nouvelle phase (en début, en fin de pas) pour une même sollicitation uniaxiale appliquée (en l'occurrence 20 MPa). La figure 7 montre les évolutions de la déformation plastique cumulée en fonction de l'avancement, pour les noeuds diagonaux, dans le cas de propriétés affectées en début de pas.

On observe que la plasticité ne se développe pas de la même manière par rapport au cas de propriétés imposées en fin de pas (fig. 5). L'augmentation de ϵ_p pour un noeud, alors qu'il est balayé par le front de transformation, est ici beaucoup plus faible (ex. du noeud 5.5.5 entre les pas 4 et 5) ; la plastification locale se développe surtout avant et après le passage du front de transformation. On peut noter qu'entre les pas 4 et 5, c'est le noeud 777 (situé dans l'austénite) qui subit la plus forte augmentation de déformation plastique ; une augmentation plus faible est dénotée pour le noeud 333 qui est déjà transformé et a donc les propriétés plus élevées de la perlite.

En considérant le noeud 5.5.5, un premier fort accroissement de ϵ_p se produit du pas 2 au pas 3, suivi d'une légère augmentation du pas 3 au pas 4. La plasticité garde ensuite un niveau constant

jusqu'au pas 6, suivi d'une deuxième augmentation moins importante que la première et à caractère plus continu. L'effet de saturation qui se manifeste juste après le passage du front dans le cas de propriétés imposées en fin de pas apparaît ici en fin de transformation (comme le montre l'évolution de ε^p pour le noeud 3.3.3).

Ces différences de comportement s'expliquent par le fait que le noeud qui se transforme a, dans le cas de propriétés affectées en fin de pas, les propriétés de l'austénite et subit alors la majeure partie de sa plastification lors du passage du front.

Dans le cas de propriétés affectées en début de pas, les propriétés plus élevées de la nouvelle phase rendent alors plus difficile la plastification de la couche qui se transforme et il est alors plus facile pour les couches externes à la zone balayée par le front de transformation de se plastifier, surtout pour celles qui sont encore dans l'état austénitique. Pour les noeuds situés près de la surface externe, un effet de saturation se manifeste juste après la première plastification (ex : noeud 7.7.7) et il n'y a pas de seconde plastification.

Il est cependant intéressant de remarquer le développement d'un écoulement plastique dans les zones perlitiques, ce que, par exemple, le modèle de LEBLOND (revue bibliographique de la première partie) n'envisage pas (hypothèse de comportement élastique de la perlite).

Le passage du front de transformation s'accompagne d'une mise en compression des noeuds correspondants. On note par ailleurs d'après la figure 8 que la plastification des noeuds situés dans l'austénite (avant transformation) s'effectue essentiellement en traction. La seconde plastification de ces mêmes noeuds une fois transformés, a lieu dans un état de traction.

Le passage du front de transformation s'accompagne également d'une chute de la contrainte équivalente σ_e comme le montre la figure 9 ; on note que la valeur initiale de σ_e est très proche du niveau de sollicitation appliquée (soit 20 MPa). Les niveaux sont voisins de 25 Mpa dans les zones qui se plastifient (exemple du noeud 555 aux pas 3, 4 et 5). Les niveaux de contraintes atteints en fin de transformation sont proches de la contrainte appliquée pour les noeuds voisins de la surface externe du cube, alors qu'ils sont situés entre 80 et 100 MPa pour les noeuds internes. En réalité, les niveaux de contraintes -aux points de Gauss- sont supérieurs à la limite d'élasticité de la perlite (soit 110 Mpa), car les noeuds correspondants subissent une légère plastification alors qu'ils sont déjà transformés (fig.7). L'explication de cet écart réside dans l'opération de moyenne qui est effectuée dans le post-traitement des résultats : les valeurs aux noeuds sont calculées comme la moyenne sur les éléments adjacents à un noeud donné.

Le cas de propriétés imposées en début de pas conduit à des valeurs de déformation plastique cumulée plus élevées en fin de transformation que dans le cas où les propriétés sont affectées en fin de pas (fig. 5 et 7). Cette tendance semble a priori contredire les évolutions induites de la plasticité de

transformation dans ces deux cas (fig.10), cette dernière étant plus importante dans le cas de propriétés affectées en fin de pas.

Or, nous avons déjà mentionné auparavant l'insuffisance du seul paramètre déformation plastique cumulée pour rendre compte des évolutions de la plasticité de transformation, celle-ci étant due essentiellement à une interaction entre l'accommodation de transformation par déformation plastique et l'état de contrainte appliquée, qui conduit celui-ci à orienter localement l'écoulement plastique. Nous avons suivi les évolutions du facteur d'anisotropie (défini au début de ce chapitre) qui donne une mesure de cet effet d'orientation pour les noeuds diagonaux (fig.11) dans le cas où les propriétés mécaniques sont imposées en fin de pas.

Ce facteur est égal à l'unité au départ, chute pendant la plastification du noeud et se rapproche de l'unité lorsqu'il se transforme (ex. du noeud 5.5.5 au pas 5), ce qui témoigne d'un fort effet d'orientation de l'écoulement plastique local par la contrainte appliquée lorsqu'un noeud est balayé par le front de transformation.

La situation est différente dans le cas de propriétés affectées en début de pas, car le passage du front de transformation ne génère alors aucun écoulement plastique dans la couche de matière qu'il balaye. Ce sont essentiellement les couches austénitiques situées en avant du front de transformation qui vont subir une plastification 'bien orientée' ($\eta = 1$) par rapport à la contrainte appliquée.

Aussi, c'est la comparaison des niveaux de plasticité locale générés juste après le passage du front de transformation entre les deux cas d'affectation de propriétés mécaniques (DEBUT/FIN) qui peut donner des éléments pour expliquer le sens des évolutions correspondantes de plasticité de transformation. En effet, en considérant les noeuds 333,555,777 respectivement aux pas 3,5 et 7, on peut constater des niveaux de plasticité locale plus élevés dans le cas de propriétés affectées en fin de pas (par ex. $\epsilon^P = 1,4 \cdot 10^{-3}$ par rapport à $\epsilon^P = 1,1 \cdot 10^{-3}$ pour le noeud 333).

Nous soulignerons également que la décroissance de la pente des courbes de plasticité de transformation avec l'avancement peut être corroborée pour les deux cas d'affectation de propriétés mécaniques à l'effet de saturation observé pour les évolutions des déformations plastiques locales générées, dû essentiellement aux propriétés beaucoup plus élevées que possède la phase formée.

De ces résultats, nous déduisons que la source principale de plasticité locale donnant lieu à une déformation de plasticité de transformation est celle qui provient des couches du matériau en transformation dans le cas fin et de celles situées en avant du front (dans l'austénite) dans le cas début. Les autres couches donnent lieu à une plasticité locale très faible ou orientée de manière isotrope et n'induisant aucune plasticité significative à l'échelle macroscopique.

Cette analyse reste cependant plus qualitative que quantitative, du fait de l'effet d'ensemble que constitue la plasticité de transformation auquel participent tous les noeuds du maillage, ce qui impliquerait dans le cas idéal de pouvoir traiter une information considérable, compte tenu de la géométrie tridimensionnelle du modèle.

II.2. MODELE DE PROGRESSION ALEATOIRE

L'absence de front de transformation continu (un pas de transformation correspond à la transformation d'un seul élément) pour ce modèle nous a conduit à un suivi plus ponctuel de l'évolution des paramètres locaux. Les effets locaux de la transformation seront étudiés pour des maillages de 4.4.4 éléments principalement et une contrainte uniaxiale appliquée de 10 MPa. Dans ce cas, la transformation comporte 64 pas et nous avons sélectionné l'information locale et globale tous les huit pas de calcul ; une interpolation linéaire entre ces 8 pas permet d'obtenir des évolutions à caractère plus continu des paramètres de l'analyse. Nous concentrerons notre analyse sur les évolutions des paramètres locaux pour quelques noeuds que nous avons choisis en fonction de leur position dans le cube : les noeuds 555 et 553 qui se trouvent sur la surface externe du cube et le noeud 333 qui se trouve à l'intérieur du cube (fig.12).

La figure 13a donne les évolutions de la déformation plastique cumulée ϵ^P en fonction du pas de transformation pour les noeuds 555 et 553, dans les cas de propriétés affectées en début de pas (courbes a) et en fin de pas (courbes b). Nous observons que le noeud 555 subit une forte augmentation de déformation plastique (entre le pas 24 et le pas 32), au moment où l'élément (coin du cube) qui le contient subit la transformation de phases. Au-delà du pas 32, la variation de ϵ^P est très faible en raison de l'environnement du noeud qui a maintenant les propriétés élevées de la perlite.

Pour le noeud 553, l'évolution de la déformation plastique en fonction du pas est de la même forme : une augmentation forte de ϵ^P se produit entre les pas 24 et 40, suivie de variations beaucoup plus faibles. Il est à noter que le noeud 553 (commun à deux éléments) 'voit' la transformation pour la première fois au pas 40. Nous en déduisons que la variation de ϵ^P entre les pas 24 et 32 doit être liée à la transformation d'éléments voisins contenant ce noeud. Ceci est mis en évidence sur la figure 12 où nous avons visualisé les zones qui se transforment entre les pas 24 et 32 dans des plans de coupe perpendiculaires à l'axe Oz. Il apparaît clairement qu'entre ces pas, des éléments voisins aux deux éléments contenant le noeud 553 se transforment (couche N°4 et N°3).

Cette analyse a été menée pour d'autres noeuds externes du maillage qui présentent le même type de comportement.

Pour des noeuds internes du maillage (par exemple le noeud 333), l'évolution de la déformation plastique avec le pas de transformation est plus linéaire (fig.13b). Ce noeud (commun à 8 éléments)

'voit' la transformation pour la première fois au pas 6 ; il continue à subir des déformations plastiques jusqu'au dernier pas en raison de la transformation progressive des éléments de son voisinage. La déformation plastique cumulée en fin de transformation est plus faible que pour les noeuds externes.

Ces résultats montrent que la plastification d'un noeud a essentiellement trois origines : la transformation de l'environnement lointain quand le noeud est encore austénitique (se produit en début de transformation), la transformation de l'environnement proche (il reste de l'austénite autour du noeud) et sa propre transformation.

Nous pouvons remarquer que l'affectation de propriétés en début de pas conduit à des déformations plastiques locales plus faibles que l'affectation en fin de pas. Ceci est particulièrement marqué pour les noeuds externes, tel pour le noeud 555 : l'incrément de ϵ^P associé à la transformation est de 0,003 pour des propriétés affectées en fin de pas et seulement de 0,0015 pour des propriétés affectées en début de pas.

D'un point de vue global, l'effet résultant sur les évolutions de la plasticité de transformation est faible comme nous l'avons vu précédemment (publication du chapitre I). Il semble que c'est la plastification de l'environnement austénitique proche ou lointain d'un élément qui contribue de façon prédominante à la plasticité de transformation.

On peut noter que pour ce modèle, le développement de manière aléatoire de la nouvelle phase dans le volume du cube conduit à une plasticité distribuée de façon beaucoup plus uniforme par rapport au modèle de croissance sphérique (tous les noeuds du volume sont plastifiés dès le pas 8, soit pour une fraction de perlite formée égale à 12,5%). On observe des niveaux finaux (après transformation complète) de déformation plastique cumulée qui sont en moyenne beaucoup plus importants que ceux observés pour le modèle de croissance sphérique (ils peuvent atteindre 0,8%).

Comme pour le modèle de croissance sphérique, nous avons observé que l'augmentation de la plastification consécutive à la transformation d'un noeud s'accompagne d'une mise en compression du matériau ainsi que d'un fort effet d'orientation de l'écoulement plastique local à cet instant.

II.3. Synthèse

L'analyse des états locaux a permis pour chaque modèle de fournir quelques éléments pour expliquer les évolutions de la plasticité de transformation . Pour le modèle sphérique, la source principale de plasticité à l'échelle de la cellule provient des couches du matériau situées en aval du front de transformation (dans l'austénite qui est la phase la plus molle) et de celles qu'il balaye. Un

effet de saturation des évolutions de plasticité locale se manifeste après le passage du front qui se traduit par la décroissance de la pente de plasticité de transformation en fonction de l'avancement. La majeure partie de la plasticité se développe dans l'austénite, ce qui rend raisonnable les hypothèses de loi de comportement des phases introduites dans certains modèles analytiques, tels ceux de GREENWOOD-JOHNSON et LEBLOND (l'austénite se plastifie, alors que la perlite reste élastique).

L'analyse est plus difficile pour le modèle aléatoire pour lequel n'existe plus de directionnalité de la transformation, car un effet d'environnement se superpose aux effets locaux de la transformation qui sont alors moins nets. Toutefois, les principaux effets observés pour le modèle sphérique le sont également dans ce cas.

La corrélation entre les états mécaniques locaux et la plasticité de transformation est difficile à effectuer d'une manière quantitative rigoureuse en raison du volume d'informations à traiter (géométrie 3D) et nous nous sommes restreint pour cette analyse à une quantité d'informations relativement limitée (noeuds de la diagonale principale pour le modèle sphérique et suivi du comportement de quelques noeuds pour le modèle aléatoire).

Bien qu'il soit illusoire de vouloir reconstituer la plasticité de transformation à partir des états mécaniques locaux (en raison du caractère non intégrable de la plasticité qui ne permet pas de construire aisément des potentiels plastiques à l'échelle macroscopique), l'analyse locale est intéressante en elle-même car elle fournit des données (localisation des déformations plastiques dans chaque phase, orientation de l'écoulement plastique, contraintes internes générées au cours de l'avancement) auxquelles ni l'expérience ni les modèles analytiques ne permettent d'avoir accès. Cette analyse de caractère partiel demanderait à être systématisée pour certains types d'informations (forme et évolution des zones plastiques, orientation moyenne de l'écoulement plastique généré dans chaque phase, contraintes générées).

III - DISCUSSION

La dernière partie de ce chapitre a pour objectifs d'apporter des éléments pour essayer d'expliquer les écarts entre les évolutions de plasticité de transformation avec l'avancement calculées et mesurées. La figure 14 reprend la comparaison des évolutions de plasticité de transformation pour les deux modèles telle que nous l'avons montré dans la publication du chapitre I. Si un effet de l'affectation des propriétés mécaniques (en début ou en fin de pas) subsiste pour le modèle sphérique en raison de la taille importante des derniers pas, en revanche un bon accord entre les deux modèles est observé dans le cas où les propriétés mécaniques sont affectées en fin de pas de transformation. Ceci tend à montrer que les deux modèles, bien que situés à des échelles de description différentes, représentent un même comportement du matériau à l'échelle macroscopique.

En revanche, la forme parabolique obtenue pour la simulation ne permet pas à celle-ci de décrire le comportement tel qu'il est mesuré sur éprouvette, comme le montre la même figure : la plasticité de transformation se développe d'une façon très régulière pour l'expérience et l'évolution obtenue est quasi linéaire.

Il est à noter que des différences importantes sont obtenues pour des taux de transformation supérieurs à 50%, et la déformation de plasticité de transformation calculée pour une transformation complète est nettement inférieure à celle mesurée.

Si les points expérimentaux pour des transformations partielles sont délicats à obtenir, et sont donc entachés d'une incertitude non négligeable (cf barres d'erreur sur la mesure de x), la valeur de la plasticité de transformation pour une transformation complète est confirmée par de nombreux essais, et l'ordre de grandeur par différents auteurs.

Aussi, nous pouvons envisager deux points de discussion qui sont l'évolution de la déformation de plasticité de transformation avec l'avancement et le niveau de plasticité de transformation atteint pour une transformation complète.

Pour cela, nous analyserons successivement l'influence de la loi de comportement des phases et celle des interactions entre cellules voisines sur les résultats de la simulation, en particulier sur les évolutions de la plasticité de transformation.

III.1. INFLUENCE DE LA LOI DE COMPORTEMENT DES PHASES

Dans notre modèle, nous avons utilisé une loi de comportement élastoplastique des phases avec écrouissage isotrope. Deux points sont à souligner :

- d'une part la prise en compte de l'écrouissage suppose que la nouvelle phase formée est consolidée par toute la déformation plastique qui a lieu dans l'austénite, ce qui ne reflète certainement pas la réalité. Plusieurs auteurs ont traité ce problème en utilisant des modèles d'écrouissage où la nouvelle phase ne se consolide que partiellement par les déformations plastiques de la phase mère, [2,3,4]. Il nous a alors paru intéressant de situer l'amplitude des variations que peut entraîner le choix d'un comportement à l'écrouissage où le matériau perd la mémoire de la déformation plastique accumulée dans la phase mère ;

- d'autre part, pour la température de transformation choisie dans notre étude, l'austénite et la perlite ont un comportement visqueux. Pour étudier cet effet, nous avons effectué un calcul en prenant en compte un terme de fluage dans la loi de comportement des phases.

Finalement, nous simulerons une situation extrême où les deux phases ont les mêmes propriétés mécaniques.

III.1.1. Effet du comportement à l'écroissage

D'un point de vue calcul, la prise en compte d'une perte de mémoire de l'écroissage revient à changer l'état de référence par rapport auquel on mesure la déformation plastique équivalente d'un point d'intégration (c'est cette quantité qui intervient dans la loi d'écoulement plastique) alors qu'il se transforme en la nouvelle phase : la déformation plastique équivalente qui a été accumulée pour ce point avant qu'il ne se transforme sert alors de nouvel état de référence à l'instant de transformation, ce qui signifie que le point d'intégration a une contrainte d'écoulement égale à la limite d'élasticité de la perlite au moment où il se transforme. Il est alors évident que la suppression de mémoire de l'écroissage (situation dénommée 'sans mémoire') conduit à augmenter les déformations plastiques générées dans la perlite (comparativement à la situation 'avec mémoire').

Sur la figure 15, nous avons représenté pour les deux modèles (sphériques et aléatoires) les évolutions de la plasticité de transformation avec et sans mémoire sous contrainte appliquée de 20 Mpa. Dans le cas du modèle sphérique, l'écart entre les situations avec et sans mémoire est de l'ordre de 10% à la fin de la transformation. Par contre, l'effet est beaucoup plus important pour le modèle aléatoire, l'écart entre les deux courbes augmentant au fur et à mesure de l'avancement pour atteindre une valeur de l'ordre de 25% en fin de transformation. On observe donc une différence sensible des niveaux de plasticité de transformation atteints lorsqu'on supprime la mémoire de l'écroissage, entre le modèle sphérique (valeur finale $1,8 \cdot 10^{-3}$) et le modèle aléatoire (valeur finale $2,45 \cdot 10^{-3}$). Cette différence importante s'explique par les niveaux de plasticité locale générée qui sont plus élevés pour le modèle aléatoire que pour le modèle sphérique, comme l'analyse locale précédente l'a montré.

La courbe d'évolution de plasticité de transformation avec suppression de la mémoire de l'écroissage conserve cependant la même forme parabolique qui reste très éloignée de la courbe expérimentale.

III.1.2. Introduction d'un comportement visqueux des phases

La prise en compte du fluage dans la loi de comportement de chaque phase est faite en ajoutant aux déformations élastiques et plastiques une contribution inélastique supplémentaire dépendante du temps et qui vérifie une loi de normalité - au même titre que la déformation plastique -, mais ici sans seuil. Nous considérons le fluage secondaire pour lequel une loi de comportement couramment

utilisée est la loi de Norton [5,6] qui s'écrit dans le cas uniaxial $d\epsilon^f = K\sigma^m \exp\left(\frac{-Q}{RT}\right) dt$, où Q est la chaleur d'activation, R la constante des gaz parfaits ($R= 8,32$ J/Mole), T la température et σ la contrainte. Les coefficients K et m sont spécifiques du matériau utilisé et de ses conditions d'emploi (température, domaine de vitesse de sollicitation). Nous avons introduit le fluage pour le modèle sphérique.

D'après des données expérimentales [8], nous avons déterminé ces coefficients pour chaque phase à la température de 673 °C :

- pour l'austénite : $K = 3,6.10^{10}$ Mpa^{-m}.s⁻¹ ; $m = 1$
- pour la perlite : $K = 4,05.10^6$ Mpa^{-m}.s⁻¹ ; $m = 2,55$

La chaleur d'activation est prise égale à 300000 J / Mole.

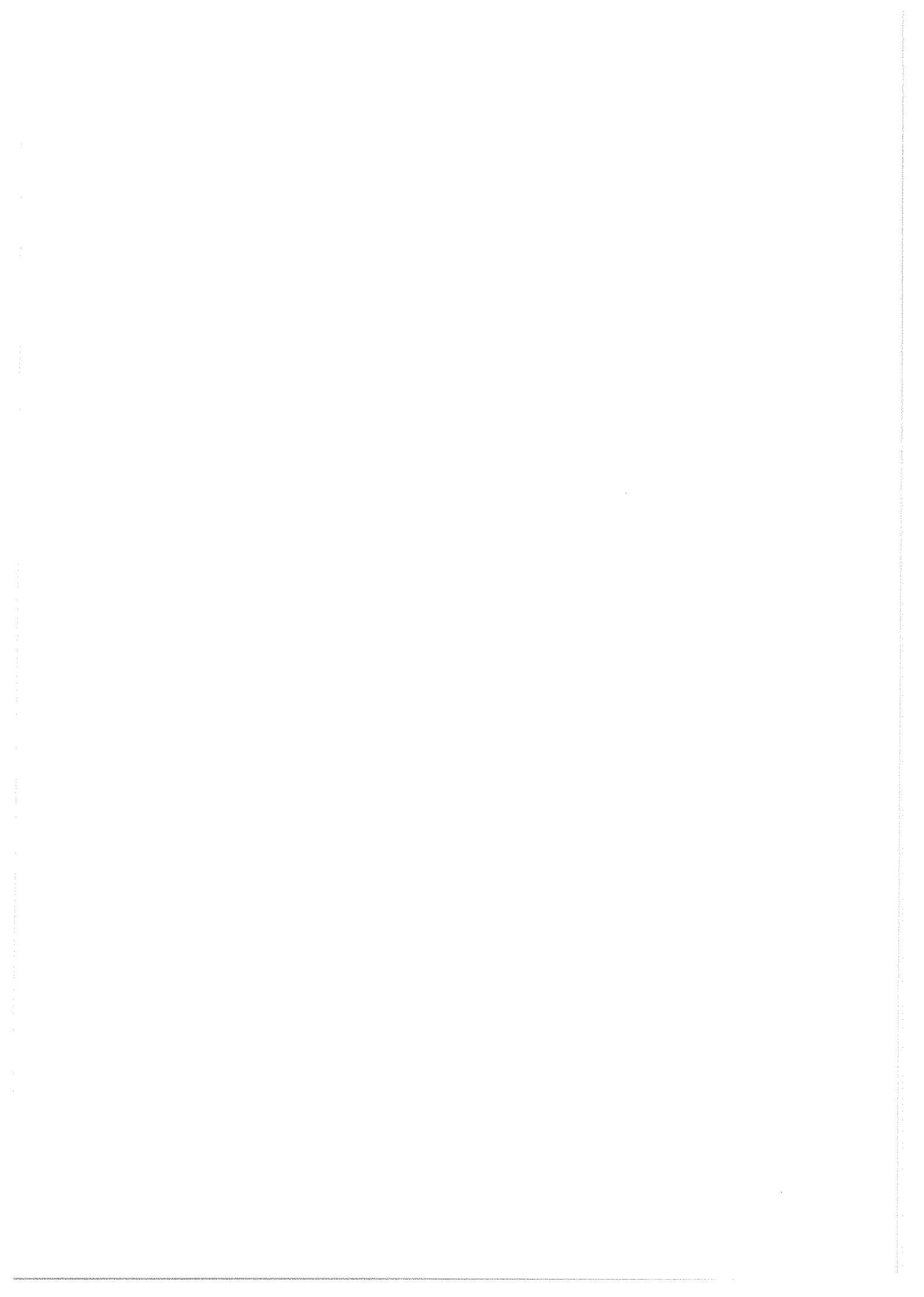
L'expression dans le cas triaxial de la loi de fluage est $d\epsilon_{ij}^f = 3/2 C\sigma e^{m-1} dt s_{ij}$, avec $C = K \exp\left(\frac{-Q}{RT}\right)$.

Dans notre modèle, le temps n'apparaît pas explicitement mais il est introduit par le biais de la cinétique $x(t)$ de transformation. Nous avons choisi une loi de Johnson-Mehl-Avrami [6] qui s'exprime sous la forme $x(t) = 1 - \exp(-bt^n)$. Les coefficients n et b sont identifiés expérimentalement à partir des temps de transformation correspondant à des fractions transformées de 10% et 90%, soit respectivement 26 et 120s, pour une transformation perlitique isotherme à 673 °C sous une contrainte uniaxiale de 20 Mpa [8]. Les valeurs obtenues sont $n=2$ et $b=1,56.10^{-4}$.

La loi de cinétique permet alors d'une part d'exprimer les instants t_i associés aux pas de transformation x_i suivant : $t_i = (-\ln(1-x_i)/b)^{1/n}$ et d'autre part d'exprimer l'incrément de déformation de fluage en fonction de l'incrément de phase formée et du temps courant, en introduisant dans la loi de fluage $dt = \frac{dx}{nbt^{n-1}} \exp(-bt^n)$. Nous avons imposé une durée de transformation limitée à 120s, qui donne en fait une condition d'arrêt du calcul (elle correspond à une fraction transformée de 90%, alors que la transformation des 9 premières couches représente une fraction de 73%).

La plasticité de transformation est alors évaluée de la même manière que dans le cas sans fluage, en soustrayant de la déformation totale la déformation élastique due à la contrainte appliquée et la déformation de changement de volume. La figure 16 donne le résultat du calcul pour le modèle sphérique pour une contrainte appliquée de 20 Mpa dans le cas de propriétés imposées en fin de pas de transformation. Nous comparons les évolutions dans les cas avec et sans fluage.

Il ressort de la comparaison des deux courbes que la prise en compte d'un comportement visqueux pour chaque phase modifie relativement peu le développement de la plasticité de



transformation. Un comportement des phases avec fluage conduit à des niveaux de plasticité de transformation plus élevés qu'un comportement sans fluage : l'écart entre les deux courbes augmente (il atteint 15% à 90% de perlite formée). L'accroissement de l'écart entre les deux courbes s'explique par la contribution de fluage qui augmente au fur et à mesure que la transformation avance. Nous avons mené une analyse locale des déformations permanentes cumulées pour mieux situer l'effet de la contribution de fluage.

Nous avons représenté figure 17 les évolutions des déformations plastiques et de fluage cumulées pour un noeud interne (noeud 333, fig.17c,d) et un noeud externe (noeud 999, fig.17a,b), ainsi que le cumul des deux contributions, afin de comparer les déformations inélastiques obtenues dans les cas avec fluage et sans fluage. Pour le noeud 333, en absence de fluage, nous observons que la déformation plastique cumulée atteint des niveaux voisins en fin de transformation à ceux obtenus avec fluage ($1,5 \cdot 10^{-3}$). Nous notons aussi des niveaux de déformation plastique plus faibles lors du passage du front de transformation (entre les pas 2 et 3) qui peuvent être liés à une relaxation de contrainte due au fluage. Il apparaît que la déformation de fluage augmente surtout après la transformation du noeud, à partir du pas 6 (fig.17c). La figure 17d visualise bien que l'écart de déformation permanente en fin de transformation entre les deux cas réside essentiellement dans le développement d'une déformation permanente supplémentaire (de fluage) lorsque le noeud est déjà transformé.

Pour le noeud 999, la déformation plastique cumulée est bien plus faible que dans le cas sans fluage et ceci tout le long de la transformation ($\epsilon_p = 1,5 \cdot 10^{-3}$ dans le cas avec fluage et $\epsilon_p = 2 \cdot 10^{-3}$ dans le cas sans fluage). La déformation de fluage croît avec l'avancement de la transformation. Pour ce noeud, nous voyons (fig.18) que la déformation inélastique totale (plastique et fluage) est voisine de la déformation plastique dans le cas sans fluage. La déformation de fluage se substitue donc partiellement à la déformation plastique.

La prise en compte d'un comportement visqueux ne modifie pas la forme de l'évolution de la plasticité de transformation, qui reste non linéaire et conduit à une faible augmentation de la plasticité de transformation. Il faut alors envisager d'autres effets physiques pour expliquer l'écart modèle / expérience. Dans la publication du chapitre précédent, nous avons déjà avancé quelques explications possibles de cette différence, l'une d'elles étant la difficulté de mesurer les propriétés mécaniques de la perlite dans les conditions réelles de sollicitations du matériau en cours de transformation. Celles que nous utilisons dans la simulation sont celles mesurées pour un échantillon complètement transformé (dans un état stable) et les propriétés de la perlite en cours de formation peuvent être plus faibles, en raison d'une plus grande mobilité des défauts. Il nous a alors paru intéressant de simuler un cas extrême qui est celui où les deux phases ont les mêmes propriétés.

III.1.3. Cas de propriétés plastiques des phases identiques

La figure 18 montre une comparaison du cas à propriétés mécaniques identiques avec celui où les propriétés sont affectées en fin de pas, pour le modèle sphérique. Les écarts résultant en fin de transformation sont importants ($2,17.10^{-3}$ pour le cas à mêmes propriétés et $1,75.10^{-3}$ dans l'autre cas), alors que les pentes initiales sont identiques. Ces évolutions s'expliquent par le développement de la plasticité locale générée (fig.19) : pour un noeud donné, les pentes initiales des courbes d'évolution de ϵ_p avec l'avancement sont identiques dans les deux cas ; lorsque les deux phases ont les mêmes propriétés, l'effet de saturation ne se manifeste plus, un noeud déjà transformé continuant à se plastifier. On dénote cependant une diminution de pente après transformation qui est attribuée à l'effet d'écroutissage pour les noeuds internes, et comme nous le verrons à l'effet des conditions limites pour les noeuds externes. Cela se traduit par la non-linéarité de l'évolution de la plasticité de transformation (fig. 18).

Les résultats des calculs à mêmes propriétés pour les deux modèles (fig. 20) montrent un écart très important de comportement et de niveaux. Si les pentes initiales sont identiques, un fort effet de non-linéarité subsiste pour le modèle sphérique. Par contre, la plasticité de transformation évolue d'une manière beaucoup plus linéaire pour le modèle de progression aléatoire et atteint un niveau de $3,6.10^{-3}$ en fin de transformation (contre $2,17.10^{-3}$ pour le modèle sphérique). Cela conduit dans le cas de propriétés identiques des phases à une évolution quasi linéaire de la plasticité de transformation. La non-linéarité observée dans le cas de propriétés différentes des phases s'explique par une modification de l'environnement d'un élément transformé qui comporte une proportion décroissante d'éléments d'austénite dans sa sphère d'accommodation. On déduit alors de là une plus grande difficulté à plastifier un volume environnant dont les propriétés mécaniques moyennes ne cessent d'augmenter (propriétés plus élevées des éléments de perlite), ce qui induit l'effet de saturation observé de la plasticité de transformation.

Pour ce modèle aléatoire, les résultats des évolutions locales de la déformation plastique cumulée pour les noeuds 555 et 333 sont donnés figure 21. Nous avons porté les résultats de calculs à mêmes propriétés mécaniques, comparés aux résultats originaux (propriétés mécaniques différentes imposées en début de pas).

Pour le noeud 555, on note que les différences de niveau de ϵ_p entre les deux cas apparaissent essentiellement après la transformation du noeud (état perlitique), au-delà du pas 32. Pour le noeud 333, cet écart croît progressivement avec l'avancement de la transformation ; il atteint 3.10^{-3} en fin de transformation. Ces différences de niveau de ϵ_p sont plus importantes que celles que nous avons observées dans le cas du modèle sphérique (fig.19). Néanmoins, elles ne permettent pas à elles seules d'expliquer les écarts des évolutions de la plasticité de transformation pour les deux modèles. Nous verrons par la suite que l'effet de saturation observé pour le modèle sphérique provient

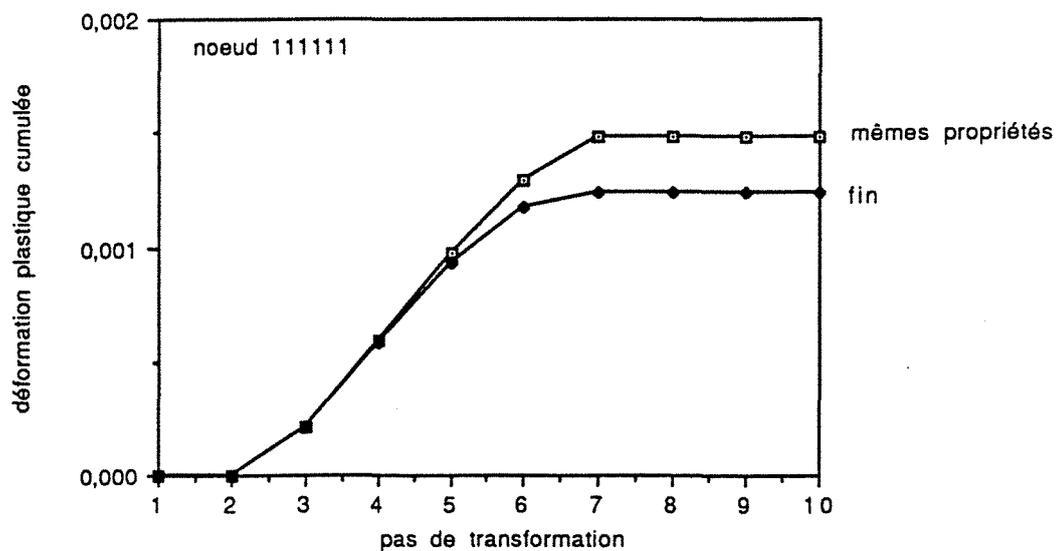
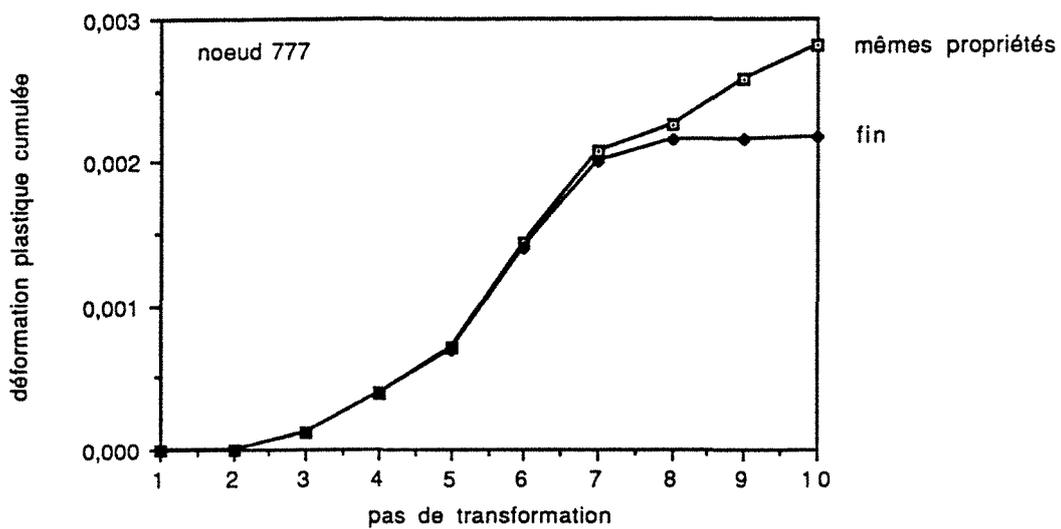
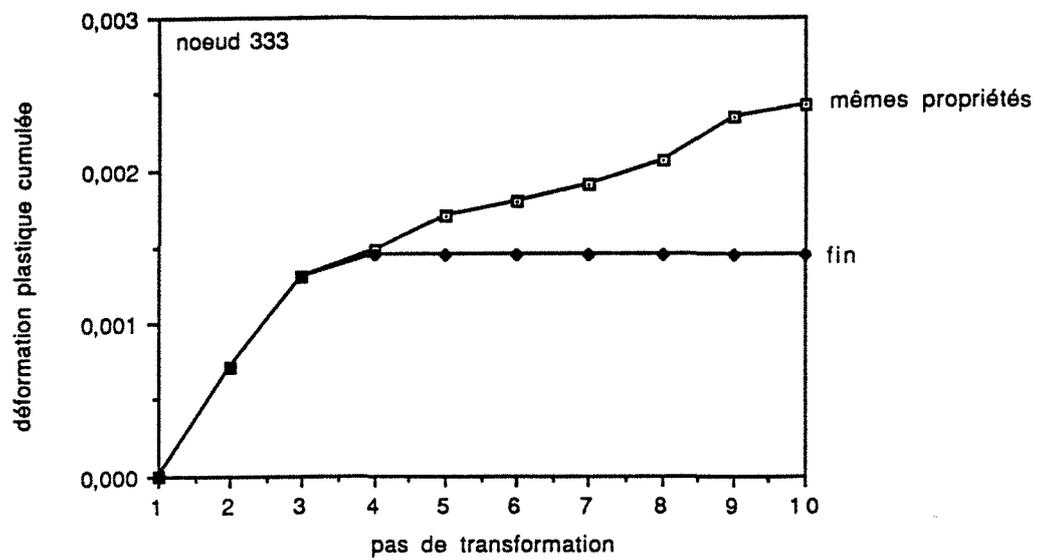


Figure 19 : Modèle de croissance sphérique. Contrainte uniaxiale de 20 MPa. Comparaison des évolutions de la déformation plastique cumulée pour un calcul à mêmes propriétés mécaniques et un calcul à propriétés imposées en fin de pas. Cas des noeuds 333, 777 et 111111.

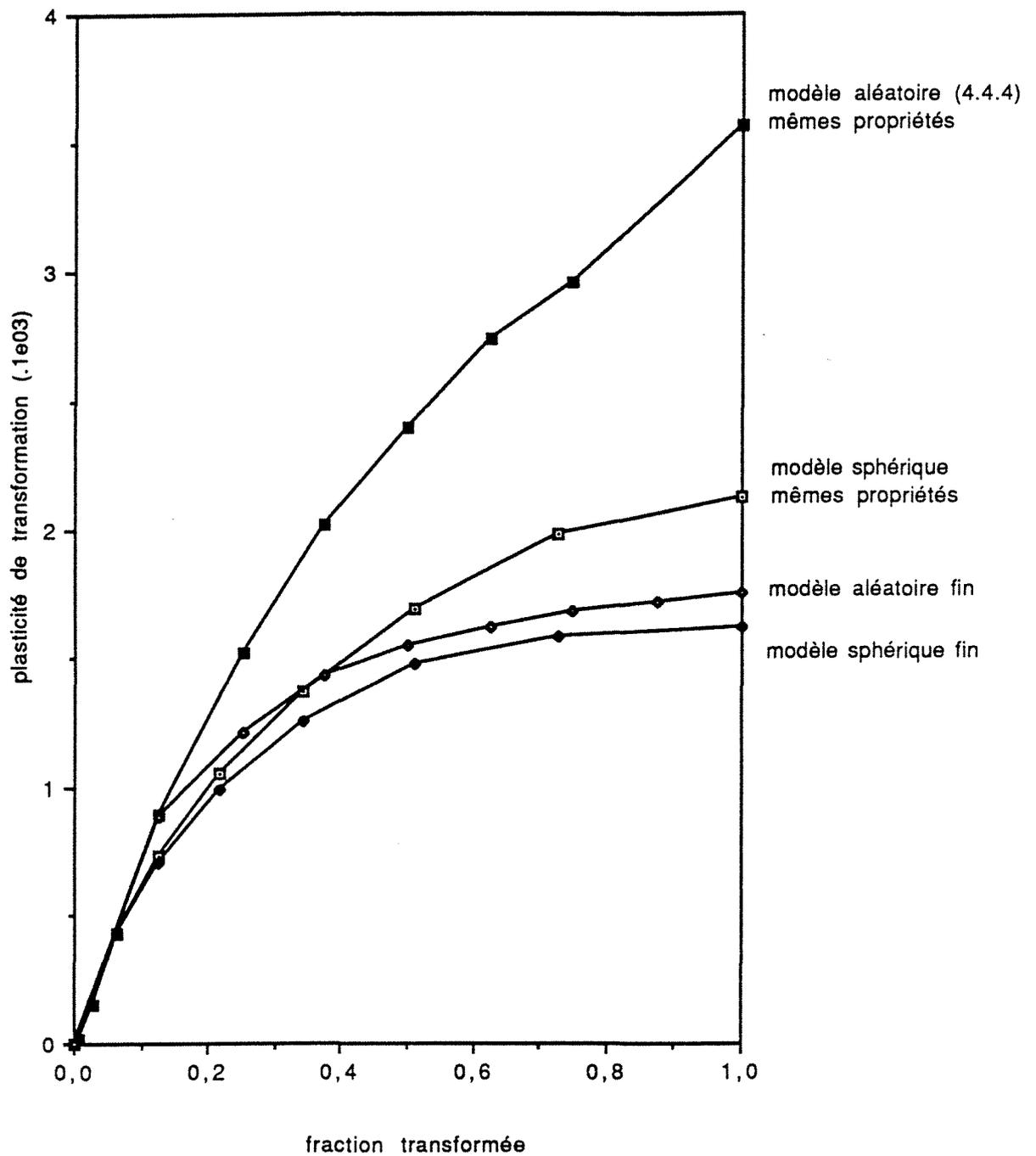


Figure 20 : Comparaison des évolutions de la plasticité de transformation pour les deux modèles dans les cas de propriétés mécaniques des phases identiques et différentes (propriétés affectées en fin de pas). Contrainte uniaxiale appliquée de 20 MPa.

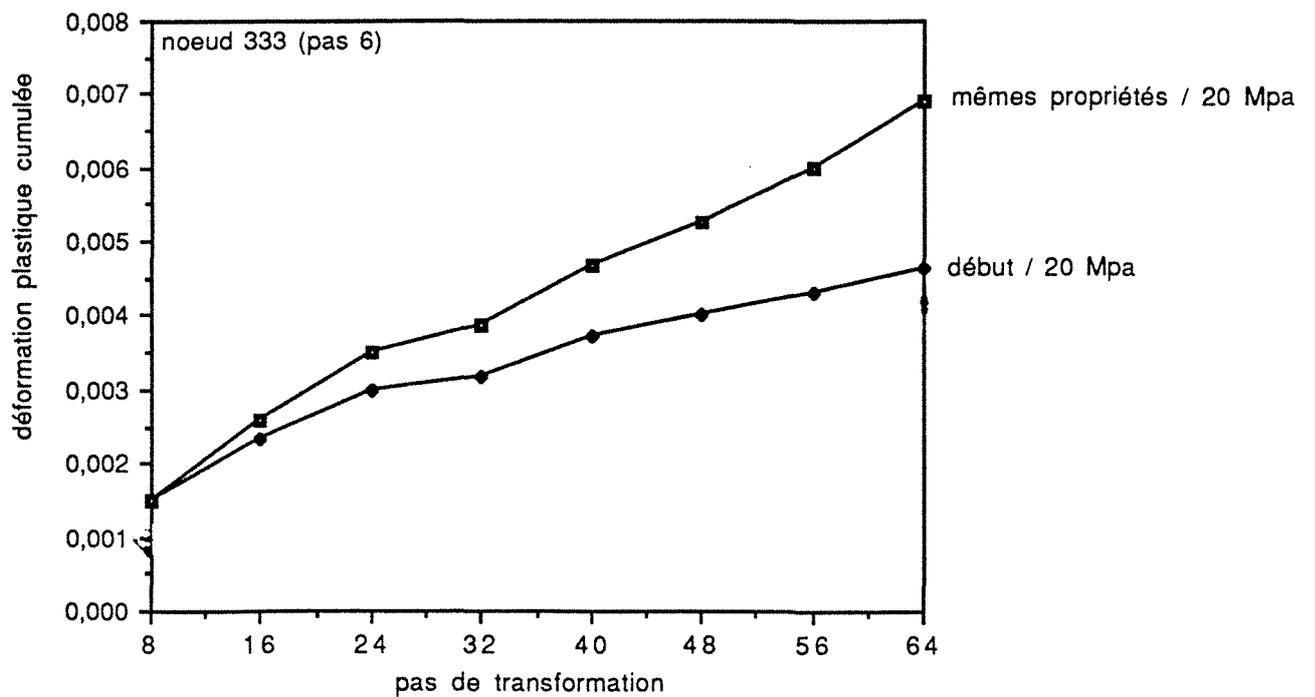
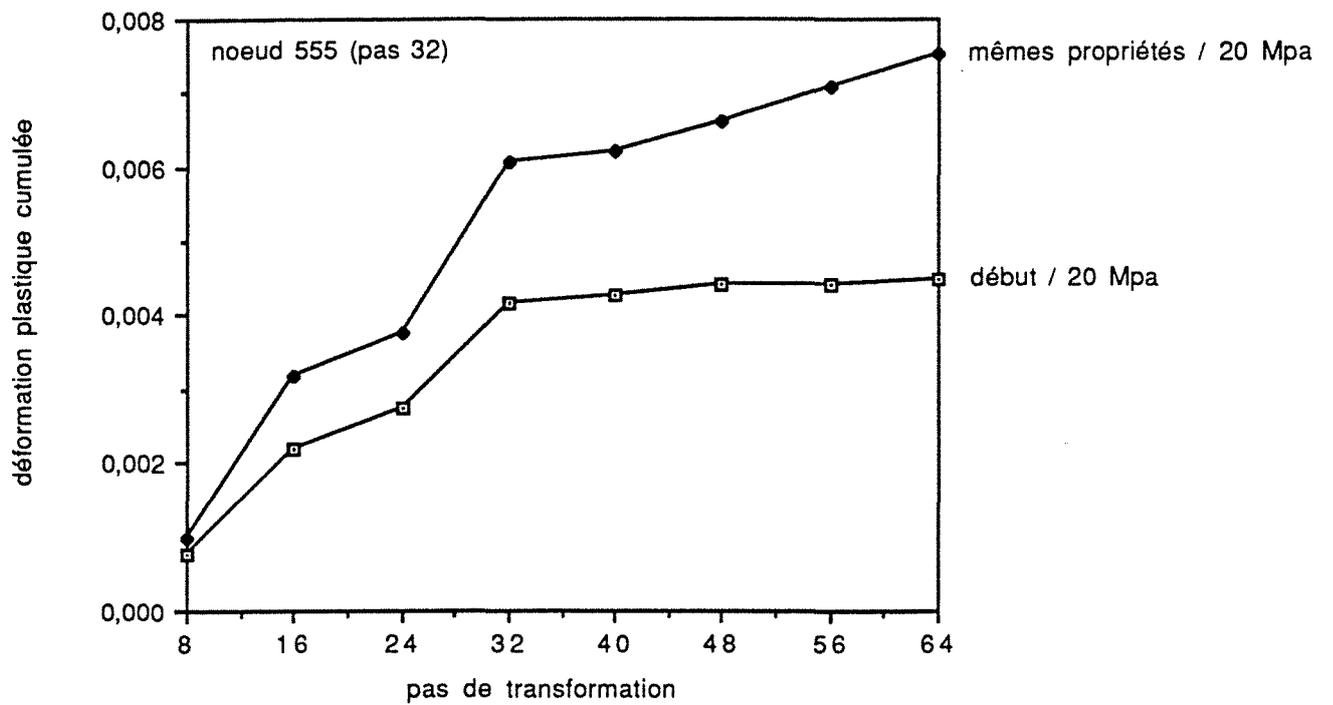


Figure 21 : Modèle de progression aléatoire. Comparaison des évolutions de la déformation plastique cumulée pour un calcul à mêmes propriétés mécaniques et à propriétés différentes imposées en début de pas. Noeuds externe (555) et interne (333).

essentiellement des conditions limites pour ce modèle. Par contre, pour le modèle aléatoire, nous avons montré qu'il n'y a pas d'effet des conditions limites sur les évolutions de plasticité de transformation (publication du chapitre I).

III.2. EFFET D'INTERACTIONS ENTRE CELLULES VOISINES

L'effet d'interaction entre cellules voisines intervient exclusivement pour le modèle sphérique que nous allons considérer par la suite.

Les évolutions de plasticité de transformation obtenues dans le cas du modèle sphérique ont montré un fort effet de saturation qui se manifeste au-delà d'environ 50% de perlite formée, quelles que soient les propriétés mécaniques relatives des deux phases. Nous pouvons rattacher cet effet à la transformation des dernières couches qui peut conduire à moins de plasticité générée en raison de la présence de frontières rigides.

Afin de situer cet effet de conditions limites sur le développement de la plasticité de transformation, nous avons effectué pour le modèle sphérique un calcul en conditions de frontières libres (contrainte appliquée de 20 Mpa, propriétés affectées en fin de pas), que nous comparons au calcul original (fig. 22). Les évolutions sont identiques jusqu'à 50% de fraction transformée, le cas à frontière libre conduisant ensuite à davantage de plasticité de transformation ($1,9 \cdot 10^{-3}$ en fin de transformation). Ces écarts dans les derniers pas de transformation sont corroborés par le développement de plasticité à l'échelle des phases. La figure 23 donne les déformations plastiques cumulées pour les noeuds diagonaux aux différents pas dans le cas de frontières libres. On observe une forte augmentation de ϵ_p entre les pas 9 et 10 (ϵ_p est multipliée par un facteur 3 pour les noeuds diagonaux internes), contrairement au cas à frontières rigides pour lequel nous avons observé une faible augmentation de ϵ_p dans les derniers pas de transformation (fig.6).

Ce calcul en frontière libres prend cependant en compte des propriétés différentes des deux phases et cet effet de propriétés mécaniques se superpose donc à l'effet d'interaction entre cellules voisines ; nous avons alors effectué ce même calcul avec des propriétés de phases identiques, afin d'isoler l'effet des conditions limites et de situer l'évolution obtenue pour la plasticité de transformation (en particulier les niveaux atteints) par rapport au modèle aléatoire. La figure 24 montre la comparaison des évolutions avec l'avancement de la plasticité de transformation pour les deux modèles, dans le cas de propriétés des phases identiques et pour des conditions de frontières rigides et libres pour le modèle sphérique. Pour le modèle sphérique, les niveaux atteints par celle-ci sont beaucoup plus élevés que dans le cas à mêmes propriétés mécaniques avec des frontières rigides

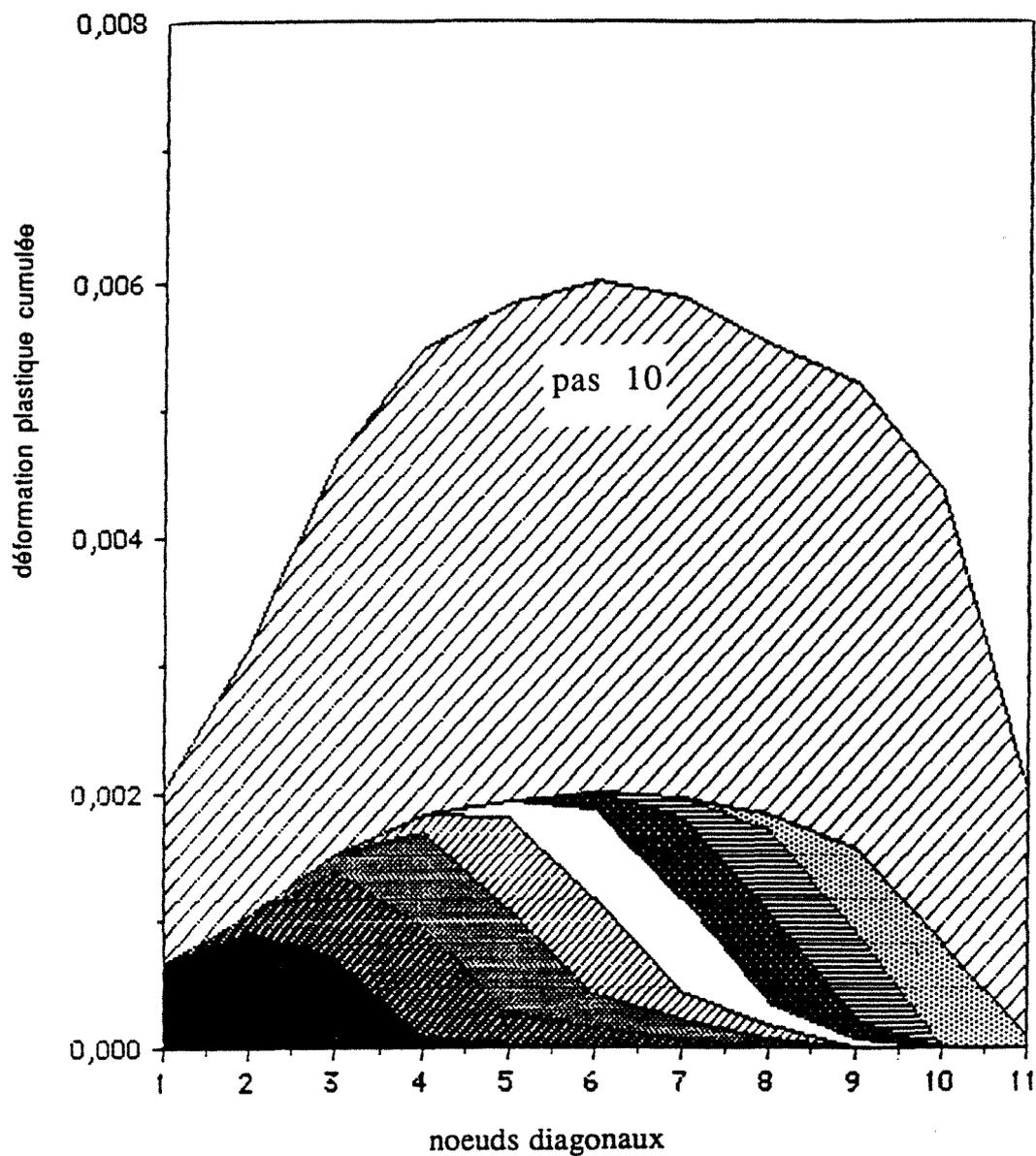


Figure 23 : Evolution de la déformation plastique cumulée le long de la diagonale principale du cube (noeuds 111 à 11.11.11) pour le modèle de croissance sphérique en conditions de frontières libres pour une contrainte appliquée de 20 MPa.

et l'évolution se rapproche de la linéarité. De plus, l'évolution et les niveaux atteints sont très proches de ceux obtenus avec le modèle aléatoire.

Ce résultat montre d'une part que les effets de conditions limites qui représentent les interactions entre cellules voisines jouent un rôle essentiel dans le développement de la plasticité de transformation. D'autre part, il souligne l'importance des propriétés de la perlite, puisque l'effet des conditions limites est bien moindre lorsque la perlite a des propriétés élevées (fig.22).

L'ensemble des résultats obtenus avec des propriétés différentes des phases conduit à une évolution de la plasticité de transformation avec saturation, quel que soit le modèle de progression de la transformation.

Les modifications dans les lois de comportement (aucune mémoire de la déformation avant transformation, et prise en compte du fluage) conduisent à augmenter la déformation de plasticité de transformation lorsque la transformation est complète, et la rapprocher de la valeur expérimentale. Cependant, dans le cas se rapprochant le plus de l'expérience, les valeurs de plasticité de transformation obtenues au début de la transformation sont beaucoup trop élevées.

Les simulations à mêmes propriétés mécaniques ont nettement mis en évidence d'une part le rôle des conditions aux limites rigides qui conduisent à des plastifications plus faibles des couches externes et le rôle de la valeur de la limite d'élasticité affectée à la perlite. En effet, des mêmes propriétés mécaniques conduisent à une évolution de plasticité de transformation avec l'avancement de la transformation proche de celle obtenue expérimentalement, bien que les niveaux soient plus élevés ($3,6 \cdot 10^{-3}$ / $2,9 \cdot 10^{-3}$). Ces calculs conduisent à supposer que la perlite devrait se plastifier davantage. Ce résultat peut être rapproché de celui observé par LIEBAUT [9] qui a réalisé, à l'échelle 'macroscopique', des simulations de lois de comportement. Ces simulations qui prenaient en compte la plasticité de transformation (en terme de déformation supplémentaire), conduisaient à une contrainte d'écoulement plus élevée que celle mesurée expérimentalement au-delà de 60% de transformation.

Aussi pouvons nous nous interroger sur les propriétés mécaniques de la perlite se formant, qui pourraient être plus faibles du fait d'une plus grande mobilité ou densité des défauts.

La poursuite de ce travail peut se faire dans deux voies.

Un développement de la modélisation pourrait alors consister en l'établissement d'une description de la transformation qui combine les deux modèles d'avancement, qui sont chacun associés à des échelles physiques différentes (échelle du germe en croissance pour le modèle sphérique et échelle de l'éprouvette pour le modèle aléatoire). Le nouveau modèle

permettrait alors de décrire l'apparition au hasard de germes de perlite ainsi que leur croissance.

Cependant, il nous semble fondamental d'approfondir le comportement observé au-delà de 50% de transformation (modes de couplage, couplage déformation-sphéroidisation...).

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] J.B. LEBLOND. J. Mech. Phys. Solids. Vol. 34, N°4, 1986, 411.
- [2] S.DENIS. Thèse de Doctorat ès-Sciences Physiques, INPL, 1987.
- [3] S.SJÖSTRÖM. Dissertation 84. LINKÖPING UNIVERSITY (Sweden) (1982).
- [4] J.B.LEBLOND. Int. Jnl of Plasticity, Vol. 5,573, 1989.
- [5] J.L. CHABOCHE, J.LEMAITRE. Mécanique des matériaux solides, 1965. Dunod.
- [6] POIRIER. Plasticité à haute température des solides cristallins, 1976. Eyrolles.
- [7] J. BENARD, A. MICHEL, J. PHILIBERT, J. TALBOT. Métallurgie générale, 2nde édition, 1984. Masson.
- [8] E. GAUTIER. Thèse de Doctorat ès-Sciences Physiques, INPL, 1985.
- [9] C.LIEBAUT, Thèse de Doctorat de l'INPL, 1988.

TROISIEME PARTIE

**SIMULATION PAR ELEMENTS FINIS DU COMPORTEMENT
MECANIQUE D'UN MATERIAU QUI SUBIT UNE TRANSFORMATION
MARTENSITIQUE**

CHAPITRE I

Etude Mécanique et Thermodynamique d'un matériau qui subit une transition de phase cohérente. Application à la transformation martensitique

I - Analyse mécanique d'une transition de phase cohérente

- I.1. Le concept de cohérence
- I.2. Dérivée particulière d'une intégrale sur un volume présentant une surface de discontinuité
 - I.2.1. Approche Eulérienne
 - I.2.2. Approche Lagrangienne - relations cinématiques de compatibilité
- I.3. Bilan mécanique d'une transition de phase cohérente
 - I.3.1. Formulation Eulérienne
 - I.3.2. Approche Lagrangienne
 - I.3.3. Cas de la transformation martensitique

II - Etude thermodynamique d'une transition de phase cohérente : bilans d'équilibre

III - Etude thermodynamique hors équilibre

- III.1. Condition générale d'évolution et production interne d'entropie
 - III.1.1. Cas élastique
 - III.1.2. Approche élastoplastique
- III.2. Généralisation du concept de potentiel chimique
- III.3. Conditions de validité de l'étude thermodynamique
- III.4. Formulation d'un critère de sélection des variants de martensite
- III.5. Introduction du critère dans un modèle
 - III.5.1. Analyse du potentiel mécanique de transformation
 - III.5.2. Choix de la loi de comportement des phases

NOMENCLATURE DES PRINCIPAUX SYMBOLES UTILISES

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

ETUDE MECANIQUE ET THERMODYNAMIQUE D'UN MATERIAU QUI SUBIT UNE TRANSITION DE PHASE COHERENTE - APPLICATION A LA TRANSFORMATION MARTENSITIQUE

Le présent chapitre est consacré à l'étude thermodynamique d'une transition de phase cohérente à l'échelle macroscopique qui est celle de la mécanique des milieux continus (par opposition à l'échelle atomique), le cas considéré étant celui d'une transformation d'austénite en martensite dans le cas des alliages ferreux.

Une telle étude présente un caractère fondamental qui la situe en amont de la modélisation micromécanique proprement dite et s'avère nécessaire pour ce type de transformations qui présentent un niveau de complexité supplémentaire par rapport aux transformations mettant en jeu des processus purement diffusionnels, certains caractères de cette transformation étant directement contrôlé par l'état de contrainte local généré au cours de l'avancement de la transformation.

Les niveaux d'interaction peuvent être très différents (interaction entre grains, entre variants de martensite à l'intérieur d'un grain ou entre matrice austénitique et variant de martensite) et associés à autant d'ordres de contrainte. Nous nous attacherons essentiellement à l'étude du comportement d'un mélange biphasé en cours d'évolution structurale et aux couplages mécaniques-métallurgiques induits.

Après un bref rappel du concept de cohérence et du distinguo relatif à l'échelle considérée (atomique ou continue), nous décrivons tout d'abord le comportement d'un tel système d'un point de vue purement mécanique. L'application du principe des puissances virtuelles fournit un bilan d'équilibre où apparaissent des contributions que l'on peut classer suivant leur caractère moteur ou résistif sur l'avancement et qui met également clairement en évidence les liens entre le comportement mécanique et les effets liés à la transformation.

A cet égard, l'existence d'une interface mobile - lieu de séparation géométrique des deux phases - est une source de spécificité de ce type de transformation où apparaissent des effets d'"anisotropie" de comportement induits par l'état de contrainte local.

L'approche thermodynamique qui suit fournit dans un premier temps des bilans d'équilibre associés à deux représentations complémentaires (le choix des variables thermodynamiques

conditionne celui des potentiels), dans le cas présent énergies libres de Gibbs et de Helmholtz qui généralisent le bilan mécanique par l'apport du terme d'énergie chimique.

L'approche hors équilibre qui est abordée ensuite à partir de l'identification de la production interne d'entropie met en évidence le degré de complexité supplémentaire de ce type de milieu par rapport au cas des fluides. Cette complexité est liée aux états de contraintes et va nécessiter une autre définition du concept de potentiel chimique intégrant le comportement de l'interface. Une condition d'évolution (localement et globalement pour le système considéré) est alors formulée et les conditions de validité de l'étude thermodynamique sont discutées.

L'intérêt et l'originalité de cette approche mécanique et thermodynamique résident tout d'abord dans le choix du système considéré (mélange de deux phases distinctes) qui permet de rester dans le cadre micromécanique qui est celui de ce travail, bien qu'une approche macroscopique ait été développée (Annexe I).

L'application de principes variationnels (principe des puissances virtuelles, méthode des potentiels thermodynamiques) permet d'effectuer la transition micro - macro et laisse envisager l'application de critères d'évolution plus ou moins locaux suivant l'échelle physique considérée.

Par ailleurs, outre son caractère mathématique rigoureux et sa généralité, une telle approche permet d'établir des critères d'évolution au cas plus spécifique d'une transformation martensitique et pouvant être intégrés dans une simulation numérique.

Une nomenclature des principaux symboles utilisés est fournie en fin de chapitre.

I - ANALYSE MECANIQUE D'UNE TRANSITION DE PHASE COHERENTE

Le cadre utilisé est celui des transitions de phase du premier ordre dans les solides soumis à des champs de contraintes arbitraires, non nécessairement hydrostatiques. Définissons tout d'abord la notion de cohérence, au sens de la représentation qu'en donne la mécanique des milieux continus.

I.1. LE CONCEPT DE COHERENCE

On considère un solide dont les particules sont identifiées par leurs positions \underline{X} dans une configuration de référence et de positions \underline{x} (\underline{X}, t), où \underline{x} (\underline{X}, t) est la position de la même particule à l'instant t , dans la configuration actuelle. Ce solide subit une transition de phase caractérisée par la progression

d'une interface à l'intérieur de son volume. Le domaine représenté figure 2 correspond à une portion de solide partagée par l'interface en une région de phase mère (austénite) et une région transformée (martensite). Les interfaces dans les configurations de référence et actuelle sont supposées être des domaines surfaciques (cas idéalisé de zones de transition sans épaisseur) dénotés Σ_{0t} et Σ_t respectivement. Ces surfaces possèdent en chaque point un plan tangent (défini de manière unique) et Σ_t est supposé être une surface d'ordre 1 par rapport au mouvement des points matériels dans Ω_t , i.e. la fonction $\underline{x}(\underline{X},t)$ est continue au passage de Σ_t , alors que ses dérivées par rapport aux variables d'espace et de temps sont discontinues [1].

La continuité du mouvement à travers Σ_t s'exprime par la condition : $[\underline{x}] = 0$ et cette relation servira de définition au concept de transition de phase cohérente, au sens mécanique du terme. Il s'agit ici d'une notion macroscopique [2], qui est d'ailleurs compatible avec une incohérence des réseaux cristallographiques des deux phases (situation qui est typiquement celle d'une transformation martensitique). Nous ne discuterons pas des liens entre cette notion mécanique (continue) de cohérence et sa signification traditionnelle en terme de réseau cristallographique (discret), nous référant à l'analyse qu'en donnent Olson et Cohen [3] ou encore Larché et Cahn [4,5,6].

Nous notons par la suite \underline{u} le champ de déplacement d'une particule et \underline{U} son champ de vitesse.

I.2. DERIVEE PARTICULAIRE D'UNE INTEGRALE SUR UN VOLUME PRESENTANT UNE SURFACE DE DISCONTINUITÉ

L'existence d'une interface en tant que surface de discontinuité manifeste un lien physique et mathématique entre le comportement de grandeurs définies sur le volume considéré et leur comportement au voisinage de l'interface. L'étude mécanique et thermodynamique qui suit est basée sur l'évolution (par rapport au temps) de quantités définies sur un tel volume, incluant une surface de discontinuité, lorsque l'on suit ce volume dans son mouvement. La première difficulté est donc de nature mathématique : exprimer la dérivée particulaire d'une intégrale de volume en présence d'une surface de discontinuité. Nous énonçons le résultat, la démonstration étant fournie en Annexe 2.

Soit $I = \int_{\Omega_t} b(\underline{x},t) d\Omega_t$ l'intégrale sur un volume Ω_t d'une grandeur b définie dans la configuration

actuelle (b scalaire, vectorielle ou tensorielle). La dérivée particulaire de I s'exprime selon

$$\frac{dI}{dt} = \int_{\Omega_t} \frac{\partial b}{\partial t} d\Omega_t + \int_{\partial\Omega_t} b \underline{U} d\mathbf{A}, \text{ où } d\mathbf{A} \text{ est le vecteur aire infinitésimale.}$$

La méthode du bilan [19] permet alors d'interpréter cette équation : le premier terme du membre de droite correspond à la variation de b dans un domaine Ω_t considéré comme fixe et le deuxième terme s'identifie à la convection due à la variation de Ω_t .

Examinons maintenant le cas où U et b sont continus et continûment différentiables par morceaux : les deux approches - Eulérienne et Lagrangienne - sont abordées, chacune d'elles fournissant des informations complémentaires qui seront utilisées par la suite.

I.2.1. Approche Eulérienne

Σ_t est une surface de discontinuité pour \underline{U} et b ; la vitesse de propagation \underline{w} de Σ_t est définie par $\underline{w}(x,t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left(\frac{MM'}{\Delta t} \right)$, qui est un vecteur normal à Σ_t en M , par définition (fig. 3).

On applique la méthode du bilan sur Ω_t^1 et Ω_t^2 séparément, d'où pour b tensoriel :

$$\frac{dI}{dt} = \int_{\Omega_t} \frac{\partial b}{\partial t} d\Omega_t + \int_{\partial\Omega_t^1} b\underline{U} d\mathbf{A} + \int_{\Sigma_t^-} b^1 \underline{w} d\mathbf{A} + \int_{\partial\Omega_t^2} b\underline{U} d\mathbf{A} - \int_{\Sigma_t^+} b^2 \underline{w} d\mathbf{A}$$

où Σ_t^- et Σ_t^+ désignent les portions de Σ_t respectivement dans les domaines Ω_t^1 et Ω_t^2 (les grandeurs

physiques subissant un saut à l'interface, on dissocie fictivement Σ_t en deux portions égales mais qui permettent de différencier le domaine d'appartenance de la grandeur que l'on intègre).

L'application du théorème de la divergence à la deuxième et à la quatrième intégrale fournit :

$$\frac{dI}{dt} = \int_{\Omega_t} \left(\frac{\partial b}{\partial t} + \text{div } b\underline{U} \right) d\Omega_t + \int_{\Sigma_t} \Delta(b \circ (\underline{U} - \underline{w})) d\mathbf{A}, \text{ où } \underline{w} \text{ est la vitesse de l'interface et}$$

$\Delta Y = Y_2 - Y_1$ est le saut de la grandeur Y au passage de Σ_t (\circ désigne le produit tensoriel).

La relation précédente, valable pour une grandeur b d'ordre quelconque, ne fait intervenir que la vitesse relative $\underline{v} = \underline{U} - \underline{w}$ du milieu par rapport à l'interface, ce qui est conforme à l'invariance galiléenne de la mécanique classique. De plus, $d\mathbf{A}$ est le vecteur surface infinitésimal qui s'écrit $d\mathbf{A} = \underline{n} dA$ et l'on fait apparaître $v_n = \underline{v} \cdot \underline{n}$ la vitesse relative normale à Σ_t . On réécrit alors

$$\frac{dI}{dt} = \int_{\Omega_t} \left(\frac{\partial b}{\partial t} + \text{div } b \underline{U} \right) d\Omega_t + \int_{\Sigma_t} \Delta(b v_n) dA \quad (\text{I.1})$$

I.2.2. Approche lagrangienne

L'approche Lagrangienne fournit la relation de compatibilité d'Hadamard $\Delta \underline{U} = -V_n \Delta(\underline{F} \cdot \underline{N})$, démontrée en Annexe 3, où V_n est la vitesse normale d'un point géométrique astreint à rester sur l'interface (de normale \underline{N}) et \underline{F} le tenseur gradient de la déformation.

Par ailleurs, la relation (I.1) écrite en représentation Lagrangienne pour une grandeur B prend la forme simplifiée
$$\frac{dI}{dt} = \int_{\Omega_0} \frac{\partial B}{\partial t} d\Omega_0 + \int_{\Sigma} \Delta(B) V_n dA \quad (I.2),$$
 où les termes de convection sur $\partial\Omega_0$ ont disparu par rapport à (I.1) et $\Delta(B) = B_1 - B_2$ est le saut de B à l'interface.

I.3. BILAN MECANIQUE D'UNE TRANSITION DE PHASE COHERENTE - CAS DE LA TRANSFORMATION MARTENSITIQUE

I.3.1. Formulation Eulérienne

Le principe des puissances virtuelles s'écrit alors : $P_{(e)} + P_{(i)} = 0$, soit

$$\int_{\partial\Omega} \underline{t} \underline{U}^T dA - \int_{\Omega} (\underline{\sigma} : \dot{\underline{\varepsilon}}) d\Omega = 0, \quad \text{pour un volume } \Omega \text{ ne contenant pas de surface de discontinuité.}$$

On peut encore écrire $P_{(i)} = - \int_{\Omega} (\underline{\sigma} : \dot{\underline{\varepsilon}}) d\Omega$ sous la forme

$$P_{(i)} = - \int_{\Omega} \frac{1}{\rho} (\underline{\sigma} : \dot{\underline{\varepsilon}}) \rho d\Omega, \quad \text{où l'on fait apparaître la masse volumique } \rho \text{ dans la configuration}$$

actuelle. Pour un matériau homogène, $P_{(i)}$ apparaît comme la dérivée particulière d'une intégrale de volume d'une grandeur définie par la densité massique $-\frac{1}{2\rho} \underline{\sigma} : \underline{\varepsilon}$

(en effet $\underline{\sigma} = \frac{\partial W}{\partial \underline{\varepsilon}}(\underline{\varepsilon})$, le terme précédent est donc $-\frac{W}{\rho}$, de dérivée $-\frac{1}{\rho} \dot{W} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial W}{\partial \underline{\varepsilon}} : \dot{\underline{\varepsilon}} = -\frac{1}{\rho} \underline{\sigma} : \dot{\underline{\varepsilon}}$) et

$P_{(i)}$ s'écrit donc $P_{(i)} = -\frac{d}{dt} \int_{\Omega} W d\Omega$, où W représente la densité d'énergie élastique stockée.

On applique alors la méthode du bilan à $P_{(i)}$ dans le cas d'un volume Ω contenant une surface de discontinuité (cf. fig.3), tel que $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$, ce qui fait apparaître dans $P_{(i)}$ la discontinuité de W à l'interface Σ :

$$P_{(i)} = \int_{\Omega} \frac{\partial W}{\partial t} d\Omega - \int_{\Sigma} \Delta(W) V_n dA, \quad \text{avec } \Delta(W) = W_1 - W_2.$$

$P_{(e)}$ est inchangée, et le bilan mécanique s'écrit :

$$\int_{\partial\Omega} \underline{t} \underline{U} dA = \int_{\Omega} \frac{\partial W}{\partial t} d\Omega + \int_{\Sigma} \Delta(W) V_n dA$$

I.3.2. Approche Lagrangienne

L'application du principe des puissances virtuelles permet de formuler un bilan analogue au précédent. En conservant les mêmes notations qu'au 1), et en introduisant le tenseur $\underline{\underline{F}}$ gradient de la déformation, on peut écrire :

$$P_{(e)} = \int_{\partial\Omega} \underline{\underline{t}} \cdot \underline{\underline{U}} \, dA \quad \text{et d'après l'Annexe 4, } P_{(i)} = - \int_{\Omega} \frac{\partial W}{\partial t} \, d\Omega + \int_{\Sigma} \Delta (\underline{\underline{t}} \cdot \underline{\underline{U}}) \, dA.$$

Dans le cas quasi-statique, $P_{(i)} + P_{(e)} = 0$, soit

$$\int_{\partial\Omega} \underline{\underline{t}} \cdot \underline{\underline{U}} \, dA = \int_{\Omega} \frac{\partial W}{\partial t} \, d\Omega - \int_{\Sigma} \Delta (\underline{\underline{t}} \cdot \underline{\underline{U}}) \, dA = \int_{\Omega} \frac{\partial W}{\partial F_{ij}} F_{ij} \, d\Omega - \int_{\Sigma} \Delta (\underline{\underline{t}} \cdot \underline{\underline{U}}) \, dA.$$

Or, la relation d'Hadamard obtenue au paragraphe I.2.2. s'écrit

$\Delta (\underline{\underline{U}}) = - \Delta (\underline{\underline{F}}) \cdot \underline{\underline{V}}$ et $\underline{\underline{t}} = \underline{\underline{T}} \cdot \underline{\underline{N}}$, où $\underline{\underline{T}}$ est le premier tenseur de Piola-Kichhoff [26], variable intensive associée à $\underline{\underline{F}}$. On rappelle ([28], [29]) qu'il exprime la force exercée par unité d'aire de la configuration actuelle, mais qu'il est transporté sur l'unité d'aire de la configuration de référence. Son expression en fonction du tenseur des contraintes de Cauchy est $\underline{\underline{T}} = \det(\underline{\underline{F}}) \underline{\underline{\sigma}} \underline{\underline{F}}^{-T}$. On exprime alors

$$\int_{\partial\Omega} \underline{\underline{t}} \cdot \underline{\underline{U}} \, dA = \int_{\Omega} \frac{\partial W}{\partial F_{ij}} F_{ij} \, d\Omega + \int_{\Sigma} \Delta (F_{ki} T_{kj}) N_j V_i \, dA, \quad \text{soit}$$

$$\int_{\partial\Omega} \underline{\underline{t}} \cdot \underline{\underline{U}} \, dA = \int_{\Omega} \frac{\partial W}{\partial F_{ij}} F_{ij} \, d\Omega + \int_{\Sigma} \Delta (\underline{\underline{N}} \underline{\underline{F}} \underline{\underline{T}} \underline{\underline{N}}) V_n \, dA.$$

I.3.3. Cas de la transformation martensitique

On peut définir les parties extérieures et intérieures des tenseurs de déformation et de contrainte suivant les expressions ($\underline{\underline{A}}$ désigne $\underline{\underline{F}}$ ou $\underline{\underline{T}}$ indifféremment)

$$\underline{\underline{A}}^e = \underline{\underline{N}} \circ \underline{\underline{A}} \underline{\underline{N}} + \underline{\underline{A}} \underline{\underline{N}} \circ \underline{\underline{N}} - (\underline{\underline{N}} \underline{\underline{A}} \underline{\underline{N}}) \underline{\underline{N}} \circ \underline{\underline{N}} \quad \text{et} \quad \underline{\underline{A}}^i = (1 - \underline{\underline{N}} \circ \underline{\underline{N}}) \underline{\underline{A}} (1 - \underline{\underline{N}} \circ \underline{\underline{N}}) \quad (\text{référence 9})$$

où $\underline{\underline{N}}$ est le vecteur normal à l'interface Σ en M . On définit en M un repère local en complétant le vecteur $\underline{\underline{N}}$ (3^e vecteur de base) par 2 vecteurs orthogonaux dans le plan tangent à Σ , ce qui permet

$$\text{d'explicitier } A^e \text{ et } A^i : \quad \underline{\underline{A}}^e = \begin{pmatrix} 0 & 0 & A_{13} \\ 0 & 0 & A_{23} \\ A_{13} & A_{23} & A_{33} \end{pmatrix} ; \quad \underline{\underline{A}}^i = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & 0 \\ A_{12} & A_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Hill [7] a montré qu'à l'interface (dans le cas de matériaux composites, à microstructure figée) prévalent les conditions suivantes : la partie extérieure du tenseur des contraintes et la partie intérieure du tenseur de déformation sont continues sur Σ .

On retrouve tout d'abord la condition de continuité du vecteur contrainte issue de l'équation de conservation de la quantité de mouvement ($\Delta \underline{t} = m \Delta \underline{U}$ obtenue en Annexe 4). De plus, les seules discontinuités possibles du tenseur gradient de déformation portent sur la composante F_{zz} et les cisaillements F_{xz} , F_{yz} .

Par un changement de base conservant le vecteur \underline{N} , on peut ramener la discontinuité de $\underline{\underline{F}}$ à une discontinuité de la dilatation F_n et une discontinuité du cisaillement F_{dn} , où \underline{d} est la direction de cisaillement parallèlement au plan tangent local à Σ . Si l'on identifie le plan tangent à l'interface au plan d'habitat, on caractérise ainsi la transformation par un tenseur dont l'expression dans le repère local $(\underline{d}, \underline{N})$ constitué est :

$$F_{(\underline{d}, \underline{N})}^{\text{tr}, 1} = \begin{pmatrix} 1 & \gamma_0 \\ 0 & 1 + \varepsilon_0 \end{pmatrix} \quad (\text{dans le cas des alliages ferreux, on a typiquement } \varepsilon_0 = 0.03 \text{ et } \gamma_0 = 0.19, [26])$$

où ε_0 est la dilatation de transformation normale au plan d'habitat et γ_0 le cisaillement de transformation (fig. 5).

On note que cette caractérisation de la cinématique découle également directement de la relation de compatibilité d'Hadamard, dans le cas général d'une évolution dynamique.

On décompose alors les tenseurs $\underline{\underline{F}}$ et $\underline{\underline{T}}$ dans le repère local $(\underline{d}, \underline{N})$ constitué, le produit $\underline{N} \underline{\underline{F}} \underline{\underline{T}} \underline{N}$ étant invariant par changement de base.

La transformation mettant en jeu généralement une discontinuité finie de déformation, cela nécessite d'imaginer un chemin mécanique suivi par un point matériel lorsqu'il se transforme en la nouvelle phase (la résolution du problème dans le cas général de l'élasticité finie est incrémentale). En supposant plus précisément que la transformation ne produit localement pas de contraintes au point qui subit une discontinuité de $\underline{\underline{F}}$ (fig. 6), on évalue :

$$\Delta (\underline{N} \underline{\underline{F}} \underline{\underline{T}} \underline{N}) = \int_{\underline{1}}^{\underline{\underline{F}}^{\text{tr}, 1}} \underline{N} \, d\underline{\underline{F}} \underline{\underline{T}} \underline{N} = \int_{\underline{1}}^{\underline{\underline{F}}^{\text{tr}, 1}} T_n dF_n + T_{dn} dF_{dn}, \text{ soit}$$

$$\Delta (\underline{N} \underline{\underline{F}} \underline{\underline{T}} \underline{N}) = T_n \Delta F_n + T_{dn} \Delta F_{dn} = T_n \varepsilon_0 + T_{dn} \gamma_0.$$

On réécrit alors le bilan mécanique du I.3. sous la forme plus explicite :

$$\int_{\partial \Omega} \underline{1} \cdot \underline{U} \, dA = \int_{\Omega} \frac{\partial W}{\partial F_{ij}} F_{ij} \, d\Omega + \int_{\Sigma} (T_n \varepsilon_0 + T_{dn} \gamma_0) V_n \, dA$$

On substitue ensuite aux dérivées temporelles les dérivées par rapport au taux de phase formée x (le temps joue ici le rôle d'un paramètre d'histoire), soit en posant $V_n = \frac{dr_n}{dt}$:

$$\int_{\partial\Omega} \underline{t} \cdot \frac{d\underline{u}}{dx} dA = \int_{\Omega_1} \frac{\partial W}{\partial x} d\Omega_1 + \int_{\Omega_2} \frac{\partial W}{\partial x} d\Omega_2 + \int_{\Sigma} (T_n \varepsilon_o + T_{dn} \gamma_o) V_n dA$$

La contribution du terme d'interface s'écrit encore

$$\int_{\Sigma} (T_n \varepsilon_o + T_{dn} \gamma_o) \frac{dr_n}{dx} dA = \frac{\Omega}{\Sigma} \int_{\Sigma} (T_n \varepsilon_o + T_{dn} \gamma_o) \frac{\Sigma dr_n}{\Omega dx} dA, \text{ où } \Omega \text{ est le volume total du mélange.}$$

Or, l'accroissement du taux de phase est lié à une avancée de Σ dans la direction de la normale, d'où $dx = \Sigma \frac{dr_n}{\Omega}$ - pour une interface de taille suffisamment petite pour que l'on puisse considérer la

vitesse interfaciale uniforme - et le terme d'interface s'écrit alors

$$\frac{\Omega}{\Sigma} \int_{\Sigma} (T_n \varepsilon_o + T_{dn} \gamma_o) dA = \overline{\Omega (T_n \varepsilon_o + T_{dn} \gamma_o)}, \text{ où la barre supérieure désigne la moyenne sur l'interface. On écrit ce dernier terme sous la forme } \overline{\Omega} \cdot (\overline{T_n} \varepsilon_o + \overline{T_{dn}} \gamma_o).$$

Les termes décrivant les variations d'énergie mécanique des deux phases s'écrivent, après division

$$\text{par } \Omega : \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_1} \frac{\partial W}{\partial x} d\Omega_1 = \frac{\Omega_1}{\Omega} \cdot \frac{1}{\Omega_1} \int_{\Omega_1} \frac{\partial W}{\partial x} d\Omega_1 = x \frac{d\overline{E}}{dx} (M) \text{ et}$$

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_2} \frac{\partial W}{\partial x} d\Omega_2 = (1 - x) \frac{d\overline{E}}{dx} (A) \text{ par analogie, où } E \text{ est l'énergie moyenne.}$$

On peut alors formuler le bilan mécanique sous la forme

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\partial\Omega} \underline{t} d\underline{u} dA = x dE (M) + (1 - x) dE (A) + (\overline{T_n} \varepsilon_o + \overline{T_{dn}} \gamma_o) dx \quad (I.4)$$

Ce bilan fait clairement apparaître les interactions entre le processus de transformation et le comportement mécanique associé. L'effet de la transformation sur la mécanique est évident lorsque l'on considère la formulation en taux de variation dans (I.4), un accroissement de fraction transformée dx conduisant à des variations des énergies de déformation des deux phases. Cette variation provient simultanément de la variation (temporelle) correspondante des volumes sur lesquels elles sont évaluées (origine géométrique) et du changement d'état mécanique lié à la nécessité d'une accommodation interne des déformations de transformation - a priori incompatibles -, manifestant son origine mécanique. La possibilité de propriétés mécaniques élastiques de la martensite différentes de celles de l'austénite rend cette interaction encore plus complexe.

L'effet inverse du comportement mécanique sur la transformation est essentiellement contenu dans le terme d'interface $\overline{T_n} \epsilon_o + \overline{T_{dn}} \gamma_o$, chaque point matériel situé sur Σ subissant un saut de la composante normale du tenseur $\underline{\underline{F}} \cdot \underline{\underline{T}}$ lorsqu'il est balayé par l'interface. De plus, la direction normale à Σ en ce même point indique également la direction locale de propagation de la transformation. L'état de contrainte (composantes T_n, T_{dn}) contrôle ainsi simultanément l'avancement et l'"anisotropie" de la transformation et il est justifié d'appeler le terme $\overline{T_n} \epsilon_o + \overline{T_{dn}} \gamma_o$ la force motrice mécanique associée à la transformation. On note qu'il traduit le changement (discontinu) de configuration relâchée par rapport à laquelle sont évaluées les énergies de déformation dans chacune des phases. Ces dernières auront une contribution motrice ou résistive sur l'avancement de la transformation suivant le signe de la quantité $x d\overline{E}(M) + (1-x) d\overline{E}(A)$.

II - ETUDE THERMODYNAMIQUE D'UNE TRANSITION DE PHASE COHERENTE : BILANS D'EQUILIBRE

Les équations de la mécanique ont permis de mettre en évidence le couplage mécanique - métallurgique ainsi que l'anisotropie du comportement à l'interface.

Cependant, une analyse purement mécanique est insuffisante, car elle ne fait pas apparaître les contributions d'origine chimique ou entropique. Une telle approximation qui consiste à négliger les contributions entropiques peut se justifier dans le cas des ondes de choc dans les gaz (Courant et Friedrich, [10] ; Wallace, [11] ; Drugan et Shen, [12]), mais pas dans le cas d'une transition de phase du premier ordre qui se produit en l'absence de toute contrainte externe appliquée.

L'application des principes de la thermodynamique à la résolution des problèmes physiques laisse envisager deux approches distinctes : la méthode des transformations fermées (ou méthode des cycles) et la méthode des potentiels thermodynamiques. La première a été utilisée par Ortin et Planes [13] qui ont évalué par calorimétrie les différentes contributions thermodynamiques invoquées lors d'une transformation martensitique. Dans notre travail, nous utiliserons la méthode des potentiels qui permet sous certaines conditions une formulation variationnelle de la thermodynamique.

Les principes présidant au choix des potentiels thermodynamiques sont rappelés en Annexe 5 ; leur utilisation permettra tout d'abord la formulation de bilans d'équilibre. L'approche hors d'équilibre sera abordée au paragraphe III.

Le bilan d'équilibre obtenu en Annexe 5 (équation II.1) à partir de la minimisation de l'énergie libre de Gibbs (représentation en variables température-contrainte) s'écrit :

$$(1 - x) dE^c(A) + x dE^c(M) + \overline{\Delta W^c} = d(\Delta G^c) - \frac{1}{\Omega} \int_{\partial\Omega} \underline{t} \cdot \underline{u} dA$$

$$\text{avec } \overline{\Delta W^c} = \frac{1}{\Sigma} \int_{\Sigma} \Delta W^c dA; \quad \overline{dE^c(A)} = \frac{1}{\Omega_A} dE^c(A); \quad \overline{dE^c(M)} = \frac{1}{\Omega_M} dE^c(M); \quad \overline{d\Delta G^c} = \frac{1}{\Omega} d\Delta G^c$$

Dans ce bilan, la discontinuité d'énergie complémentaire $\overline{\Delta W^c}$ est nulle, si l'on suppose que la transformation d'un point matériel ne produit pas de contraintes lors du chemin fictif imaginé pendant la transformation (fig. 8). Aussi, il ne peut être utilisé pour la formulation d'un critère.

Ceci nous amène à l'écriture du même bilan en variables (T, F_{ij}) faisant apparaître explicitement la contribution d'interface.

Le potentiel à minimiser (condition d'équilibre) est l'énergie libre de Helmholtz dont on soustrait le travail des forces de surface et dont la densité volumique est $f = u - TS = g + T_{ij} F_{ij}$, d'où l'on

$$\text{exprime } df = -s dT + T_{ij} dF_{ij} + \sum_i \mu_i dn_i = T_{ij} dF_{ij} + \mu d\Omega$$

On en déduit $dF = \int_{\Omega_A \cup \Omega_M} T_{ij} dF_{ij} d\Omega + d(\Delta G^c) + \int_{\Sigma} \Delta W dr_n dA$ en conservant les notations de

l'Annexe 5. La condition d'équilibre $\delta F = \delta W^{\text{ext}}$ s'écrit alors

$$\int_{\Omega_A \cup \Omega_M} T_{ij} dF_{ij} d\Omega + d(\Delta G^c) + \int_{\Sigma} \Delta W dr_n dA = d \int_{\partial\Omega} \underline{t} \cdot \underline{u} dA = \int_{\partial\Omega} \underline{t} \cdot d\underline{u} dA. \text{ On obtient alors}$$

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\partial\Omega} \underline{t} \cdot \frac{d\underline{u}}{dx} dA = \frac{d}{dx} \overline{\Delta G^c} + \overline{\Delta W} + x \frac{d\overline{E}}{dx}(M) + (1-x) \frac{d\overline{E}}{dx}(A) \quad (\text{II.2})$$

Dans le cas d'une transformation martensitique, le terme d'interface $\overline{\Delta W}$ peut être évalué de manière identique à celle employée au paragraphe I et le bilan précédent prend la forme plus spécifique

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\partial\Omega} \underline{t} \cdot d\underline{u} dA = d(\Delta G^c) + (T_n \varepsilon_o + T_{dn} \gamma_o) dx + x d\overline{E}(M) + (1-x) d\overline{E}(A) \quad (\text{II.3}) \quad \text{avec}$$

des notations similaires à celles du paragraphe précédent. Dans ce bilan, compte tenu du chemin mécanique imaginé, la contribution d'interface est non nulle et a pu être exprimée en fonction des aspects cinématiques et statiques propres à la transformation.

La comparaison de ce bilan thermodynamique avec le bilan mécanique (équation I.4) montre que l'énergie chimique apparaît ici comme un terme moteur supplémentaire pour la transformation. Pour

être complet, le bilan précédent devrait comporter une énergie de création d'interface (terme résistif). En considérant une interface d'aire constante, il est raisonnable de négliger ce terme.

Nous retrouvons bien un bilan analogue à celui rencontré dans la littérature pour les transformations martensitiques se produisant sous contrainte [40,41]. En particulier, en considérant le début de transformation pour lequel les énergies de déformations sont faibles, on retrouve le critère énoncé par PATEL et COHEN montrant l'apport du travail à l'interface comme terme moteur supplémentaire pour la transformation [42].

III - ETUDE THERMODYNAMIQUE HORS EQUILIBRE

L'application des deux principes fondamentaux de la thermodynamique à un matériau siège d'une transition de phase cohérente permettra d'identifier la production interne d'entropie, que l'on exprimera en fonction d'un tenseur qui généralise le concept de potentiel chimique.

III.1. PRODUCTION INTERNE D'ENTROPIE ET CONDITION GENERALE D'EVOLUTION

L'expression du premier principe est la suivante (formulation Lagrangienne), [29] $\frac{d}{dt} (U+E^c) = P_e + Q$ sur tout volume Ω , où E^c est l'énergie cinétique et U l'énergie interne

$$\text{soit } \frac{d}{dt} \left(\int_{\Omega} u \, d\Omega + \frac{1}{2} \int_{\Omega} \rho_0 \underline{U}^2 \, d\Omega \right) = \int_{\partial\Omega} \underline{t} \underline{U} \, dA + \int_{\partial\Omega} \underline{q} \underline{n} \, dA$$



où $\underline{t} = \underline{T} \underline{n}$ est le vecteur traction nominale et \underline{q} le flux de chaleur reçue par conduction à travers $\partial\Omega$ (on néglige les sources d'entropie volumique).

L'inégalité fondamentale issue du deuxième principe s'énonce :

$$\frac{dS}{dt} \geq \int_{\partial\Omega} \frac{\underline{q} \underline{n}}{T} \, dA, \text{ ce qui correspond à la décomposition usuelle de } \frac{dS}{dt} \text{ en une partie due à des échanges du système avec le milieu extérieur } \frac{dS_e}{dt} = \int_{\partial\Omega} \frac{\underline{q} \underline{n}}{T} \, dA \text{ et une partie } \frac{dS_i}{dt} \text{ qui représente}$$

l'irréversibilité due à des processus dissipatifs à l'intérieur du système.

$\frac{dS_e}{dt}$ peut être positive ou négative, alors que $\frac{dS_i}{dt}$ est toujours positive (ou nulle si le processus est réversible).

En éliminant le flux de chaleur par l'équation de l'énergie, on déduit :

$$\frac{dS_i}{dt} = \frac{1}{T} \left[\int_{\partial\Omega} \underline{t} \underline{U} \, d\Omega - \frac{d}{dt} \int_{\Omega} (u - Ts) \, d\Omega - \frac{d}{dt} \frac{1}{2} \int_{\Omega} \rho_0 U^2 \, d\Omega \right] \geq 0$$

Dans notre cas de processus quasi-statique, on peut négliger la contribution de l'énergie cinétique, et, en posant $f = u - Ts$ énergie libre spécifique (de Helmholtz), on obtient :

$$\frac{dS_i}{dt} = \frac{1}{T} \left[\int_{\partial\Omega} \underline{t} \cdot \underline{U} \, d\Omega - \frac{d}{dt} \int_{\Omega} f \, d\Omega \right] \geq 0 .$$

III.1.1. Cas élastique

Pour un processus isotherme et en considérant un élément de volume monophasé, l'énergie de Helmholtz est égale à la densité élastique d'énergie stockée dans le matériau, [24]. Dans le cas présent, il faut également considérer la différence de constitution atomique entre les deux phases (e.g. passage d'un réseau CFC à CC), nécessitant d'introduire un terme supplémentaire d'énergie chimique. On peut alors écrire $f = W(\underline{F}) + \mu_i$, où μ_i est le potentiel chimique de l'une des deux phases (par unité de volume molaire). Les potentiels chimiques étant uniformes et indépendants du temps, on a

$\frac{d}{dt} \left(\int_{\Omega} \mu_i \, d\Omega \right) = \int_{\Sigma} \Delta\mu V_n \, dA = \Delta\mu \int_{\Sigma} V_n \, dA = \Delta\mu \Omega_x$, où $\Delta\mu = (\mu_M - \mu_A)$ est la différence de potentiels chimiques entre les deux phases, fonction de la température. Le terme $\Delta\mu \Omega_x$ peut encore s'écrire $\Delta\mu \frac{d\Omega_M}{dt}$ et apparait comme la dérivée par rapport au temps de l'énergie chimique ΔG^c . On reporte alors cette expression ainsi que celle obtenue en Annexe 6 pour $\frac{dE}{dt}$:

$\frac{dE}{dt} = \int_{\partial\Omega} \underline{t}_i U_i \, dA + \int_{\Sigma} \Delta (P_{ij}) N_j V_i \, dA$, ce qui permet d'éliminer la puissance des efforts extérieurs dans l'expression de la production interne d'entropie :

$$\frac{dS_i}{dt} = -\frac{1}{T} \left(\int_{\Sigma} \Delta P_{nn} V_n \, dA + \frac{d\Delta G^c}{dt} \right).$$

On déduit de cette expression que le comportement irréversible a deux sources distinctes. La dissipation mécanique décrite par le premier terme du membre de droite provient uniquement de l'interface, ce qui est logique compte tenu du comportement élastique des phases. Le deuxième terme d'origine chimique traduit la plus grande stabilité de la phase formée [30] (la possibilité de poursuite de la transformation est liée à une valeur négative de la différence de potentiel chimique pour un élément de volume non contraint). Il s'exprime également sous forme d'une contribution d'interface, ce qui permet d'écrire :

$$\frac{dS_i}{dt} = -\frac{1}{T} \int_{\Sigma} \Delta \underline{\Sigma}_{nn} V_n \, dA, \text{ où } \underline{\Sigma} = \underline{P} + \mu \underline{1} = f \underline{1} - \frac{F}{T}$$
 est le tenseur de moment-énergie [31].

On peut alors exprimer la production interfaciale d'entropie σ telle que $\frac{dS_i}{dt} = \int_{\Sigma} \sigma \, dA$, soit $\sigma = -\frac{1}{T} \Delta(\Sigma_{nn}) V_n$.

$T\sigma$ apparaît comme le produit d'un flux V_n par une force thermodynamique associée $-\Delta(\Sigma_{nn})$. (dans le cas des fluides, le potentiel chimique joue également le rôle d'une force vis-à-vis du flux de matière, [16]). La condition $\frac{dS_i}{dt} \geq 0$ et le caractère arbitraire du volume considéré permettent d'obtenir une condition locale sous la forme :

$$\Delta(\Sigma_{nn}) \leq 0 \quad (\text{III.1})$$

La formulation utilisée pour exprimer la dérivée matérielle de l'énergie élastique en Annexe 6 avait permis de condenser les énergies de déformation des deux phases à l'interface et à la frontière externe du mélange. Si l'on considère ces énergies de déformation comme dans II, une condition macroscopique d'évolution généralisant le bilan d'équilibre thermodynamique (équation II.3) est alors obtenue, compte tenu de $\frac{dS_i}{dt} \geq 0$, soit

$$\frac{d}{dx}(\Delta G^c) + x \frac{d E_M^e}{dx} + (1-x) \frac{d E_A^e}{dx} + (T_n \varepsilon_0 + T_{dn} \gamma_0) \leq \frac{1}{\Omega} \int_{\partial\Omega} \mathbf{t} \cdot \frac{d\mathbf{u}^T}{dx} \, dA \quad (\text{III.2})$$

La comparaison du bilan d'équilibre avec le bilan mécanique (équation I.4) montre que l'énergie chimique apparaît ici comme une énergie motrice supplémentaire pour la transformation, qui est convertie en énergie mécanique (énergie de déformation stockée dans le volume des phases et travail produit à l'interface) et -éventuellement- partiellement dissipée sous forme de chaleur à l'interface. Dans le cas particulier où le terme chimique est négligeable (température proche de la température d'équilibre thermodynamique entre les phases), la condition d'évolution locale (équation III.2) s'écrit $\Delta(P_{nn}) \leq 0$ et la transformation présente un caractère dissipatif qui conduit à une décroissance de l'énergie élastique stockée dans le mélange.

III.1.2. Approche élastoplastique

Afin d'éviter les problèmes liés à la définition de potentiels macroscopiques vérifiant des propriétés d'extrémum à l'équilibre pour un comportement élastoplastique des phases, nous suivrons ici aussi la même démarche d'identification de la production interne d'entropie, d'où dériveront les conditions d'évolution du système.

Les développements du chapitre précédent (cas élastique) doivent alors être modifiés pour tenir compte de l'expression de l'énergie de Helmholtz pour un matériau élastoplastique ; la première tâche consiste donc à identifier la densité d'énergie libre f . Pour cela, on se place dans un formalisme de petites déformations et on suppose que les variables internes sont le tenseur de déformation plastique et des variables d'écoulement V_K . On a alors $f = f(\underline{\underline{\varepsilon}}^p, \underline{\underline{\varepsilon}}^e, V_K, T)$ et

$$df = \frac{\partial f}{\partial \underline{\underline{\varepsilon}}^e} : d\underline{\underline{\varepsilon}}^e + \frac{\partial f}{\partial \underline{\underline{\varepsilon}}^p} d\underline{\underline{\varepsilon}}^p + \frac{\partial f}{\partial V_K} dV_K.$$

On suppose par souci de simplification l'écoulement isotrope, soit $V_k = \varepsilon^p$ déformation plastique cumulée et la loi d'écoulement s'exprime selon $\sigma_{eq} = \sigma_Y + R(\varepsilon^p)$, où σ_Y est la limite d'élasticité et $R(\varepsilon^p)$ le rayon de la surface d'écoulement.

Le comportement élastique est supposé découplé du comportement plastique et on a par ailleurs $\frac{\partial f}{\partial \underline{\underline{\varepsilon}}^e} = - \frac{\partial f}{\partial \underline{\underline{\varepsilon}}^p}$, car les déformations n'interviennent que sous la forme de leur partition $\underline{\underline{\varepsilon}} - \underline{\underline{\varepsilon}}^e = \underline{\underline{\varepsilon}}^p$ [32]. On obtient alors $df = dW^e - \sigma_{eq} d\varepsilon^p + \frac{\partial f}{\partial \varepsilon^p} d\varepsilon^p$. On peut alors imaginer un processus conduisant à un comportement rigide parfaitement plastique pour lequel on a donc $dW^e = 0$ et $dR = 0$. On a alors $df = -\sigma_Y d\varepsilon^p + \frac{\partial f}{\partial \varepsilon^p} d\varepsilon^p$. Or, KATO et PAK [24] ont montré que l'énergie interne et l'entropie restent inchangées dans ce cas, soit $df = 0$, ce qui impose $\frac{\partial f}{\partial \varepsilon^p} = \sigma_Y$ pour ce comportement particulier.

On obtient alors $df = dW - R(\varepsilon^p) d\varepsilon^p$, soit en intégrant : $f = W^e - \int (\sigma_{eq} - \sigma_Y) d\varepsilon^p$. (On suppose que l'état de référence est celui pour lequel les déformations élastiques et plastiques sont nulles).

On note que le deuxième terme représente l'énergie bloquée dans les systèmes de dislocations. On part ensuite de $\frac{dS_i}{dt} = \frac{1}{T} \left[\int_{\partial\Omega} \underline{\underline{t}} \cdot \underline{\underline{U}} dS - \frac{d}{dt} \int_{\Omega} f d\Omega \right] \geq 0$, soit en utilisant les résultats du

paragraphe précédent : $\frac{dS_i}{dt} = -\frac{1}{T} \left[\int_{\Sigma} \Delta \Sigma_{NN} V_N dA + \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \int (\sigma_{eq} - \sigma_Y) d\varepsilon^p d\Omega \right]$

Posons $W_s^p = \int (\sigma_{eq} - \sigma_Y) d\varepsilon^p$; on a alors $\frac{d}{dt} \int_{\Omega} W_s^p d\Omega = \int_{\Omega} \frac{\partial W_s^p}{\partial t} d\Omega + \int_{\Sigma} \Delta W_s^p V_N dA$. On obtient

alors la somme d'un terme de volume $-\frac{1}{T} \int_{\Omega} \frac{\partial W_s^p}{\partial t} d\Omega$ qui représente la dissipation par déformation plastique dans le volume des phases et d'un terme d'interface qui s'écrit :

$$-\frac{1}{T} \int_{\Sigma} \Delta \left(\Sigma_{NN} + W_s^p \right) V_N dA.$$

III.2. GENERALISATION DU CONCEPT DE POTENTIEL CHIMIQUE

La dérivée temporelle du potentiel de Gibbs G s'exprime en fonction de la production d'entropie par la relation $\frac{dG}{dt} = -T \frac{dS_i}{dt}$ dans le cas isotherme.

On a donc, compte tenu de l'expression obtenue pour $\frac{dS_i}{dt}$, $\frac{dG}{dt} = \int_{\Sigma} \Delta (\Sigma_{nn}) V_n dA$.

On réécrit cette dernière relation sous la forme $\frac{dG}{dt} = \int_{\Sigma} \Delta (\Sigma_{ij} N_i N_j) V_n dA$.

Par analogie avec la définition de G dans le cas des fluides, où $dG = \sum_{i=1}^n \mu_i dn_i$, on identifie le

tenseur $\underline{\Sigma}$ à un tenseur potentiel chimique $\underline{\Sigma} = f \underline{1} - \underline{F}^T \cdot \underline{T}$

$\frac{dS_i}{dt} \geq 0$ implique $\frac{dG}{dt} \leq 0$, d'où l'on déduit la condition locale $\Delta (\Sigma_{ij} N_i N_j) \leq 0$, soit $\Delta (\Sigma_{nn}) \leq 0$,

l'équilibre correspondant à $\frac{dG}{dt} = 0$, soit $\Delta (\Sigma_{nn}) = 0$. Montrons qu'effectivement, Σ_{nn} généralise au cas des solides soumis à des états de contraintes non hydrostatiques le concept de potentiel chimique utilisé pour le cas des fluides.

\underline{T} s'exprime en fonction du tenseur des contraintes de Cauchy suivant

$\underline{T} = \det(\underline{F}) \underline{\sigma} \cdot \underline{F}^{-T} = J \underline{\sigma} \cdot \underline{F}^{-T}$, avec dans le cas des fluides, $\underline{\sigma} = -p \underline{1}$ où p est la pression.

On en déduit $\underline{\Sigma} = f \underline{1} + p J \underline{F}^{-T} \underline{1} \underline{F}^T$, soit $\underline{\Sigma} = (f + p J) \underline{1}$ où $J = \frac{\rho_0}{\rho} = \frac{v}{v_0}$ est le rapport des volumes spécifiques.

On obtient alors $\Sigma_{nn} = \underline{N}^T \underline{\Sigma} \underline{N} = f + p \frac{v}{v_0}$. Or, $f = u - Ts$ et $g = \sum_i \mu_i n_i = f + p \frac{v}{v_0}$, d'où l'on déduit

$\Sigma_{nn} = \sum \mu_i n_i$ et on retrouve donc la définition usuelle du potentiel de Gibbs. Cela justifie la dénomination de tenseur potentiel chimique pour $\underline{\Sigma}$, la condition $\Delta (\Sigma_{nn}) = 0$ correspondant à l'égalité des potentiels chimiques $\mu_1 = \mu_2$ dans le cas de deux fluides en interaction.

Le critère d'évolution $\Delta (\Sigma_{nn}) \leq 0$ à l'interface généralise la condition de stabilité de l'écoulement de la matière au cas des solides où il signifie que la direction de transformation est orientée vers la région de plus faible potentiel Σ_{nn} . La même inégalité a été obtenue indépendamment par Heidug et Lehner [31] qui ont montré de plus qu'elle est valable quelle que soit la loi constitutive du matériau. Son caractère tensoriel traduit à la fois l'organisation de la matière en un réseau d'atomes (réseau cristallographique) où apparaissent des états de contraintes non hydrostatiques, et un effet d'orientation géométrique de l'interface.

III.3. CONDITIONS DE VALIDITE DE L'ETUDE THERMODYNAMIQUE

L'identification de $\frac{dS_i}{dt}$ fournit, en plus des bilans d'équilibre, une condition générale d'évolution hors d'équilibre (III.2.1.) ; l'application de principes variationnels est cependant plus délicate, lorsque par exemple les forces ne sont plus des fonctions linéaires des flux qui leur sont associés ([35], [36]). La stabilité de l'évolution n'est alors plus assurée, l'importance prise par les fluctuations pouvant empêcher le système d'atteindre l'état stationnaire (caractérisé par le minimum de la production d'entropie, Prigogine, [33]).

Cela peut être le cas pour une transformation martensitique, pour laquelle peuvent apparaître des bifurcations de la direction de propagation des variants. De plus, la thermodynamique ne permet pas de prévoir la cinétique de transformation et les modèles obtenus sont en fait des modèles à variables internes (vitesses locales de propagation de l'interface). L'identification du potentiel local (en l'occurrence $\Delta(\Sigma_{nn})$) nécessite la connaissance du comportement mécanique du matériau pendant la transformation ; dans un cas quasi-statique, il a été possible d'évaluer le travail produit à l'interface mais cette hypothèse est sans doute très discutable dans certaines situations (vitesse locale de l'interface proche de celle des ondes élastiques), où les notions mêmes de contraintes ou de déformations peuvent être privées de sens au passage du front de transformation. Par ailleurs, nous avons restreint cette étude à un comportement isotherme des phases. Or, un des effets de la transformation peut être d'augmenter la température au voisinage immédiat de l'interface. Nous nous plaçons dans la situation plus particulière où la transformation est induite par une discontinuité de déformation uniquement.

Enfin, si le deuxième principe permet de formuler une condition d'évolution d'un système, il ne considère cependant pas la notion de seuil en-deça duquel l'évolution n'a plus lieu, qu'il faut donc introduire en plus de la condition d'évolution.

III.4. FORMULATION D'UN CRITERE DE SELECTION DE VARIANTS POUR UNE TRANSFORMATION MARTENSITIQUE

Un intérêt spécifique de cette approche thermodynamique réside dans les possibilités qu'elle ouvre d'expliquer le rôle des contraintes internes générées par la transformation elle-même sur sa progression ou son arrêt, qui se traduisent par la transformation soudaine et non contrôlée (par les paramètres externes auxquels l'expérimentateur a accès, tels la température ou l'état de contrainte appliquée) d'une fraction importante du matériau (de l'ordre de plusieurs dizaines de %), [30]. Ces phénomènes se produisent hors équilibre, soit sans contrôle des variables thermomécaniques sur le processus de transformation. Le retour à l'équilibre thermomécanique s'accompagne d'une création d'énergie mécanique stockée dans le matériau qui peut être très importante et dont l'effet résistif possible peut conduire à stopper la progression de la transformation. Une compétition s'établit alors entre l'effet résistif des énergies de déformation nécessaires pour accommoder la déformation de

transformation de grande amplitude (le cisaillement associé à la transformation est de l'ordre de 19% pour les alliages ferreux [26]) et la possibilité pour la transformation de relaxer les contraintes internes générées. Ces considérations - de nature qualitative - soulignent le rôle prépondérant des contraintes internes sur l'avancement de la transformation.

De façon plus quantitative, la condition d'évolution globale obtenue dans le cas élastique (équation III.2) montre que l'avancement et l'anisotropie de la transformation sont gouvernés par des termes mécaniques qui sont les énergies de déformation des phases et l'état de contrainte à l'interface. Ces quantités varient avec l'avancement de la transformation et sont susceptibles de présenter des variations spatiales importantes. Par ailleurs, le terme d'énergie chimique à température constante est une quantité fixe et ne peut donc intervenir que comme un seuil.

Il apparaît de plus que seul le terme $T_n \epsilon_0 + T_{dn} \gamma_0$ dépend de l'orientation du plan d'habitat (sa normale), alors que les énergies de déformation sont des scalaires 'vrais' qui peuvent jouer le rôle de seuils énergétiques au cours de l'avancement, mais variables.

En considérant le début de formation du premier variant, ces dernières sont négligeables et l'orientation du plan d'habitat est alors fonction du terme $T_n \epsilon_0 + T_{dn} \gamma_0$.

Une formulation plus forte du critère est alors obtenue en condensant la condition d'évolution globale sous une forme locale, valable en chaque point de l'interface : $\frac{dS_i}{dt} = -\frac{1}{T} \int_{\Sigma} \Delta(\Sigma_{nn}) V_n dA \geq 0$, où $\Delta\Sigma_{nn} = \Delta W + \Delta\mu - (T_n \epsilon_0 + T_{dn} \gamma_0)$.

L'expression du principe de minimum de production d'entropie (qui est une condition plus forte que le second principe) permet alors d'écrire dans l'espace des forces : $(-\Delta(\Sigma_{nn}) + \Delta(\Sigma_{nn}^*)) V_n \geq 0$, où $-\Delta(\Sigma_{nn}^*)$ est une force thermodynamique non nécessairement 'admissible', i.e. qui n'est pas associée à la vitesse réelle V_n . Cette inégalité montre que pour une vitesse d'interface donnée, la force thermodynamique qui lui est associée maximise la puissance de dissipation. En y injectant la forme particulière de $\Delta(\Sigma_{nn})$, on obtient : $(\Delta W^* - \Delta W + (T_n \epsilon_0 + T_{dn} \gamma_0) - (T_n \epsilon_0 + T_{dn} \gamma_0)^*) V_n \geq 0$.

Ceci montre que le processus réel maximise le travail produit à l'interface et minimise la variation d'énergie de déformation dans le volume des phases.

III.5. Introduction du critère dans un modèle

L'utilisation du critère général précédant est difficile car il faut être capable d'évaluer les contraintes produites à l'interface entre les deux phases, ainsi que la discontinuité de densité d'énergie élastique. Nous avons simplifié le critère en ne considérant dans une première étape que le terme de travail produit à l'interface : considérant un petit élément de volume représentant un germe de

martensite au sein d'un volume de matière, la position de cet élément et l'orientation du plan d'habitat qui lui est associé sont celles qui maximisent l'expression $T_n \varepsilon_0 + T_{dn} \gamma_0$.

III.5.1. Analyse du potentiel mécanique de transformation

La forme obtenue pour cette énergie ne préjuge en rien des mécanismes fins de produisant lors du passage de l'interface, qui peuvent induire des couplages transformation - mécanique (déformation) non pris en compte par le simple bilan thermodynamique (qui est microscopique par rapport aux échelles nanoscopiques où ces phénomènes de couplage se produisent). En effet, à l'échelle du milieu continu, il est a priori difficile d'établir une distinction entre un cisaillement (ou une dilatation) d'origine mécanique et le cisaillement (ou la dilatation) qui serait "intrinsèque" à la transformation, sauf si l'on tient compte de la cristallographie du réseau (identification des systèmes cristallographiques associés à la formation des unités de martensite).

Au cours de l'application du modèle, on pourrait envisager que l'énergie de déformation élastique présente en un point donné du matériau contribue au potentiel de transformation : ainsi la transformation d'une unité de phase mère où le cisaillement mécanique est γ_e serait caractérisée mécaniquement par un cisaillement de transformation ($\gamma_0 - \gamma_e$), le cisaillement γ_e présent à l'instant de début de transformation réalisant une partie du "chemin de transformation" (fig. 9).

Des considérations analogues prévalent pour la dilatation associée à la transformation, ce qui conduit à quantifier le saut de \underline{F} au passage du front en fonction de l'état de déformation élastique préexistant.

Il pourrait alors être difficile de quantifier le saut du gradient de la déformation totale indépendamment de l'état mécanique existant avant transformation. Nous considérons que l'on peut simplement superposer la déformation associée à la transformation et toute autre déformation d'origine mécanique.

III.5.2. Choix de la loi de comportement des phases

Dans ce chapitre, nous avons vu que le comportement du matériau pendant la transformation peut être très différent selon la loi de comportement des phases (l'expression du critère est différente), que nous avons considérée élastique puis élastoplastique. Un comportement élastique, signifie que l'accommodation de la déformation liée à la transformation se fait élastiquement dans le volume des phases. Dans la situation élastoplastique, l'accommodation se fait par déformation élastique et plastique dans chaque phase ainsi que par déformation plastique à l'interface.

Le choix de la loi de comportement dépend de la nature du matériau considéré : dans le cas d'un thermoélastique, le changement de volume est faible et cela conduit à une accommodation élastique du cisaillement de transformation.

Pour un alliage ferreux, le changement de volume est élevé et il génère des contraintes internes conduisant à des déformations élastiques et plastiques.

Nous avons appliqué ces deux types de comportement :

- élastique lorsque les vitesses de déformation à l'interface sont importantes. En effet, dans une étude sur la propagation des surfaces de discontinuité dans des matériaux élasto-plastiques, Drugan et Shen [27] ont montré que dans un matériau élastoplastique, lorsqu'une surface de discontinuité se propage avec une célérité égale à une des vitesses des ondes élastiques, le comportement reste élastique au passage du front. Dans ce cas, les contraintes élevées générées devraient permettre l'accommodation des déformations plastiques par formation de nouveaux variants dits "autoaccommodants".

- élastoplastique lorsque ces vitesses sont plus faibles et nous prendrons alors pour limites d'élasticité de l'austénite et de la martensite les valeurs 300 Mpa et 1 Gpa respectivement. Nous ferons également l'hypothèse qu'il n'y a pas de déformation plastique supplémentaire à l'interface.

NOMENCLATURE DES PRINCIPAUX SYMBOLES UTILISES

Ω_0 : volume total du mélange dans la configuration de référence

Ω_0^1 : volume de phase formée dans la configuration de référence

Ω_0^2 : volume de phase mère dans la configuration de référence

Ω_t ou Ω : volume total dans la configuration actuelle

Ω_t^1 ou Ω_1 : volume de phase formée dans la configuration actuelle (Ω_M est le volume de martensite)

Ω_t^2 ou Ω_2 : volume de phase mère dans la configuration actuelle (Ω_A est le volume d'austénite)

Σ_{0t} : interface entre les deux phases dans la configuration de référence, à l'instant t.

Σ ou Σ_t : interface entre les deux phases dans la configuration actuelle, à l'instant t.

\underline{X} : vecteur position dans la configuration de référence

\underline{X}_{0t} : vecteur position d'un point géométrique de l'interface dans la configuration de référence, à l'instant t

\underline{x} (\underline{X}, t) ou \underline{x} : vecteur position dans la configuration actuelle

\underline{w} : vecteur vitesse d'un point de l'interface dans la configuration actuelle

\underline{V} : vecteur vitesse d'un point de l'interface dans la configuration de référence

V_n : vitesse normale d'un point de l'interface (direction normale N à Σ)

$\underline{u}, \underline{v}$: vecteurs vitesse d'un point matériel

$\underline{\gamma}$: vecteur accélération d'un point matériel

$\underline{\underline{F}}$: tenseur gradient de la déformation

Δ : opérateur donnant le saut d'une grandeur physique au passage de l'interface

$\underline{\underline{T}}$: tenseur des contraintes de Boussinesq, variable intensive conjuguée de $\underline{\underline{F}}$

\underline{t} : vecteur contrainte

ρ, ρ_0 : masse volumique dans les configurations actuelle et de référence respectivement
 m : débit massique

$\underline{\underline{\epsilon}}$: tenseur des petites déformations

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

W, W^c : densités d'énergie élastique et complémentaire respectivement

ϵ_0, γ_0 : paramètres cinématiques de la transformation martensitique (dilatation et cisaillement respectivement)

x : taux de phase formée

T : température thermodynamique

g : densité du potentiel énergie libre de Gibbs G

f : densité du potentiel énergie libre de Helmholtz F

μ : densité du potentiel chimique

ΔG_c : différence d'énergie chimique entre les deux phases

E, E^c : énergies élastique et complémentaire

W_{ext} : travail des efforts extérieurs

$\underline{\underline{P}}$: tenseur de moment-énergie d'Eshelby

$\underline{\underline{\Sigma}}$: tenseur de potentiel chimique généralisé

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] Y. BAMBERGER. Mécanique de l'ingénieur II. Herrmann, 1981.
- [2] R.C. FLETCHER. J. of Geophys. Res., 1973, Vol. 78, N° 32, 7661.
- [3] G.B. OLSON & COHEN. M. Acta Met., Vol. 27, 1907, 1978.
- [4] F. LARCHE & CAHN. J.W. Acta Met., Vol. 21, 1051, 1973.
- [5] F. LARCHE & CAHN. J.W. Acta Met., Vol. 29, 1579, 1978.
- [6] F. LARCHE & CAHN. J.W. Acta Met., Vol. 26, 53, 1979.
- [7] C. TRUESDELL & R. TOUPIN, 1960. The classical field theories. In : Handbuch der Physik, Vol. III, Principles of Classical Mechanics and Field Theory, Ed. S. Flügge.
- [8] P. GERMAIN. Mécanique, Tomes I et II, Ecole Polytechnique, 1986.
- [9] N. LAWS. J. of Elasticity, Vol. 5, n° 3-4, 1975.
- [10] R. COURANT & K.O. FRIEDRICHS. Supersonic Flow and Shock Waves Inter-science, New York, 1948.
- [11] D.C. WALLACE.
Phys. Rev. B 22 (1980), 1477.
Phys. Rev. B 22 (1980), 1487.
Phys. Rev. B 22 (1980), 1495.
- [12] W.J. DRUGAN & Y. SHEN. J. Mech. Phys. Solids, Vol. 38, n° 4, pp 553-574, 1990.
- [13] J. ORTIN & A. PLANES, 1988. Acta Met., Vol. 36, n° 8, 1873.
- [14] I. BAZAROV. Thermodynamique, Ed. Mir.
- [15] J.M. HONIG. Thermodynamics, Principles Characterizing Physical and Chemical Processes, Elsevier Scientific Publishing Company.
- [16] J.F. POMMARET. Lie Pseudogroups and Mechanics.
- [17] M. LEONTOVITCH. Introduction à la thermodynamique, Physique statistique, Ed. Mir
- [18] H.B. CALLEN. Thermodynamics and an Introduction to thermostatics, Second Edition.
- [19] J. de HEER. Phenomenological Thermodynamics, with Applications to Chemistry, Prentice-Hall, Inc.
- [20] H.J. KREUZER. Nonequilibrium Thermodynamics and its Statistical foundations, Clarendon Press, Oxford, 1981.
- [21] G.J. Von WYLEN. Fundamentals of classical thermodynamics, 3rd Edition, Ed.R.E. Sonntag.
- [22] M.E. GURTIN. Introduction to Continuum Mechanics, Academic Press, New York, 1981.

- [23] P.G. CIARLET. Elasticité tridimensionnelle, Collection Recherches en Mathématiques Appliquées, RMA1, Masson.
- [24] M. KATO & H.R. PAK. Phys. Stat. Sol. (b) 123, 415, 1984.
- [25] P. GERMAIN. Mécanique des milieux continus, Masson, 1986.
- [26] E. GAUTIER. Thèse de Doctorat ès-Sciences Physiques, INPL, Nancy, 1985.
- [27] W.J. DRUGAN & Y. SHEN. J. Mech. Phys. Solids, Vol. 35, n° 6, pp 771-787, 1987.
- [28] L.E. MALVERN. Introduction to the Mechanics of a continuum medium, Prentice-Hall, Inc.
- [29] J. SALENCON. Mécanique des milieux continus, I. Concepts généraux, Ellipses, Ecole Polytechnique, 1988.
- [30] J.W. CHRISTIAN. The theory of transformations in Metals and Alloys, Part I, second edition.
- [31] W. HEIDUG & F.K. LEHNER. Pageoph., Vol. 123, 91, 1985.
- [32] J. LEMAITRE & J.L. CHABOCHE. Mécanique des matériaux solides, Dunod, 1986.
- [33] I. PRIGOGINE, J. WILEY & Sons. Introduction to Thermodynamics of Irreversible Processes, Third Edition, 1967.
- [34] R. VALID. La mécanique des milieux continus et le calcul des structures, Coll. EDF-CEA-IRTA, Eyrolles.
- [35] P. GLANSDORFF , I. PRIGOGINE. Structure, stabilité et fluctuation, Masson et Cie.
- [36] S.R. de GROOT , P. MAZUR. Non-equilibrium thermodynamics, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1962.
- [37] M. EPSTEIN , G.A. MAUGIN. Acta Mech. 83, 127-133, 1990.
- [38] P. CHADWICK. J. of Elasticity, Vol. 5, n° 3-4, 1975.
- [39] J. GIUSTI. Thèse de Doctorat ès-Sciences Physiques, Université Pierre et Marie Curie, Paris VI, 1981.
- [40] J.W. CHRISTIAN. The theory of transformations in metals and alloys. Part I (second edition).
- [41] E. GAUTIER, A. SIMON, X.M. ZHANG, Proceedings "The martensitic transformation in science and technology", Ed. E. Hornbogen, N. Jost, DGM, 45, 1989.
- [42] J.R. PATEL, M. COHEN. Acta Metall. 1, 531, 1953.

CHAPITRE II

SIMULATION PAR ELEMENTS FINIS DE LA TRANSFORMATION MARTENSITIQUE

I - CONCEPTS MICROMECHANIQUES ET MODELE MULTIGRAIN

- I.1. Caractérisation cinématique et statique de la transformation
- I.2. Modèle micromécanique multigrain
 - I.2.1. Critères d'évolution et description du fonctionnement de la simulation
 - I.2.2. Résultats de la simulation

II - MODELE MICROMECHANIQUE DU COMPORTEMENT DU GRAIN

- II.1. Hypothèses et traits généraux du modèle
 - II.1.1. Choix des conditions limites
 - II.1.2. Modèle d'avancement de la transformation
 - II.1.3. Modes d'accommodation de la déformation de transformation et morphologie des variants
 - II.1.4. Fonctionnement de la simulation
- II.2. Résultats de la simulation
 - II.2.1. Distribution des variants et des contraintes internes
 - II.2.2. Plasticité de transformation
 - II.2.3. Effet des principaux paramètres du modèle sur les résultats de la simulation
 - II.2.3.1. Effet de la taille de la première plaquette
 - II.2.3.2. Effet du niveau de sollicitation mécanique appliquée (cas uniaxial)
- II.3. Discussion et développements futurs du modèle
 - II.3.1. Effet des paramètres du modèle éléments finis
 - II.3.2. Description de la transformation

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

SIMULATION PAR ELEMENTS FINIS DE LA TRANSFORMATION MARTENSITIQUE

Ce chapitre est consacré à la présentation de la simulation par éléments finis du comportement mécanique d'un matériau lors d'une transformation martensitique. Un des objectifs essentiels du modèle développé est d'obtenir une meilleure compréhension du comportement mis en jeu pendant la transformation, le but ultime recherché étant la formulation d'une loi constitutive pour la plasticité de transformation, dont la connaissance est nécessaire par exemple pour la prévision des déformations et des contraintes internes générées lors de traitements thermiques, telle la trempe dans le cas des aciers, [1].

Le comportement mécanique d'un matériau pendant une transformation par cisaillement fait appel à des mécanismes autrement plus complexes que ceux mis en jeu lors d'une transformation par diffusion tels que ceux décrits dans la première partie de ce travail. En effet, dans ce dernier cas, la transformation est contrôlée par des phénomènes de diffusion qui sont considérés indépendants de l'état de contrainte généré, ce qui semble tout à fait réaliste au regard des niveaux de contrainte et de déformations existants, et cela implique pour la simulation que l'ordre d'apparition des éléments de phase nouvelle peut être prescrit par avance.

En revanche, la transformation martensitique est contrôlée par une force thermodynamique fortement dépendante de l'état de contrainte local. La cinétique de transformation et l'orientation du produit formé (variants) sont affectés par l'état de contrainte local généré et ne peuvent, par conséquent, être déterminés par avance.

Ce phénomène d'orientation du produit de transformation constitue avec l'orientation de l'écoulement plastique généré par la déformation de transformation (changement de volume et cisaillement) les deux mécanismes à l'origine de la plasticité de transformation. Ces deux mécanismes résultent de l'effet combiné de la contrainte appliquée et des contraintes internes [4].

Si on a pu relier la déformation de plasticité de transformation à l'état de contrainte externe appliquée à taux de phase donné, dans le cas des transformations par diffusion, (ce qu'a montré la simulation dans ce cas en première partie), en revanche, la modification de la cinétique de transformation et de l'orientation des variants de martensite par l'état de contrainte interne généré

laisse supposer que l'obtention d'une telle loi nécessite la prise en compte de variables internes additionnelles.

Expérimentalement, le rôle de l'état de contrainte local est difficile - voire impossible - à quantifier et les sollicitations sont, dans la plupart des cas, uniaxiales seulement.

Cela situe à la fois la complexité des mécanismes que le modèle doit intégrer et détermine la nécessité et l'intérêt d'une telle simulation.

De plus, comme nous l'avons déjà mentionné lors de la revue bibliographique, les modèles ou simulations développés pour expliquer l'origine et l'évolution de la plasticité de transformation (chapitre I) sont incomplets quant aux mécanismes qu'ils considèrent (orientation de l'écoulement plastique ou orientation des variants de martensite).

Notre objectif est de décrire une transformation martensitique dans laquelle interviennent à la fois un cisaillement et une variation volumique.

La première partie est consacrée à la description des concepts micromécaniques nécessaires pour la simulation. Particulièrement, la formulation de critères de transformation et leur intégration dans la discrétisation par éléments finis sont un des aspects fondamentaux du modèle ; il sera alors opportun d'utiliser les résultats théoriques de l'étude thermodynamique (chapitre I).

La fiabilité d'un modèle et son adéquation à la réalité expérimentale dépendent évidemment du choix des phénomènes physiques pertinents et de leur représentation, compte tenu de l'échelle de la modélisation qui est la nôtre et du formalisme de type milieu continu utilisés.

Les différents choix et hypothèses effectués lors de la construction du modèle seront discutés en fonction de la réalité physique des phénomènes, lorsque celle-ci peut être appréhendée.

Un premier modèle décrivant le comportement d'un ensemble de grains est présenté, les résultats illustrant les possibilités, mais aussi les restrictions d'une telle simulation. La nécessité de décrire les phénomènes à une échelle plus fine nous conduira alors à étudier dans une deuxième partie le comportement du grain lui-même pendant la transformation, impliquant l'introduction de concepts supplémentaires. Nous présenterons les résultats obtenus à l'aide de la simulation en essayant d'analyser les effets de l'état de contrainte interne sur la morphologie du produit de transformation et de quantifier les deux contributions à la déformation de plasticité de transformation.

Puis nous mènerons une discussion sur l'apport de la modélisation, ses limites actuelles et les développements qu'elle permet d'envisager.

I - CONCEPTS MICROMECHANIQUES ET MODELE MULTIGRAIN

Le comportement mécanique d'un matériau lors d'une transformation martensitique est d'une grande complexité et fait intervenir différentes échelles d'interaction de façon simultanée (entre grains voisins, entre variants ou plus simplement entre une unité de phase mère et une autre de phase fille séparées par une interface) et met en jeu divers modes d'accommodation de la transformation (par déformation élastique ou plastique, par apparition de macles ou de variants formant un groupe autoaccommodant).

Le premier souci du mécanicien souhaitant établir un modèle de ces interactions est d'identifier quels sont les phénomènes physiques essentiels, et qui peuvent être pris en compte dans le cadre de la mécanique des milieux continus.

Le couplage mécanique-transformation se traduit comme pour les transformations avec diffusion par l'effet de l'état de contrainte local sur l'avancement de la transformation. Principalement, il faut être capable de décrire les phénomènes d'orientation du produit de transformation par la contrainte (source de plasticité de transformation) et de formuler des critères d'évolution, avant d'associer les concepts ainsi développés à la discrétisation propre aux éléments finis.

I.1. CARACTERISATION CINEMATIQUE ET STATIQUE DE LA TRANSFORMATION

Les théories cristallographiques de la transformation (approches phénoménologiques) nous ont servi de point de départ dans notre modélisation, car elles considèrent la transformation martensitique comme un mode de déformation [2].

Plus précisément, celle-ci y est décrite comme une déformation à plan invariant, ce dernier étant encore plus communément appelé plan d'habitat. Dans un repère constitué par la direction de cisaillement \underline{d} dans le plan d'habitat et la direction normale \underline{n} à ce même plan, la déformation associée à la transformation d'une unité de phase mère se compose d'un cisaillement γ_0 dans la direction \underline{d} et d'une dilatation ϵ_0 dans la direction \underline{n} (fig. 1) [3].

Dans le formalisme des petites déformations qui est celui utilisé dans la simulation numérique, le tenseur de déformation correspondant s'exprime selon : $\underline{\underline{\varepsilon}}_{(\underline{d}, \underline{n})}^{\text{tr}} = \begin{pmatrix} 0 & \gamma_0/2 \\ \gamma_0/2 & \varepsilon_0 \end{pmatrix}$ (1)

dans le repère défini précédemment.

Dans le cas des alliages ferreux (pour lesquels apparaissent à la fois un cisaillement et un changement de volume), les paramètres de transformation ont pour valeur : $\varepsilon_0 = 0.03$ et $\gamma_0 = 0.19$, [4].

Cette expression du tenseur de déformation a, par ailleurs, été obtenue de façon indépendante dans le chapitre précédent consacré à la thermodynamique de la transformation (dans un formalisme de grande déformation) à partir des conditions de discontinuité des tenseurs de contraintes et de déformations à l'interface, dans une hypothèse d'évolution quasi statique. Ces développements ont montré la validité de l'expression (1) en tout point de l'interface, séparant instantanément les volumes des deux phases et donc la compatibilité avec le cadre de la mécanique des milieux continus.

Des éléments statiques viennent compléter cette description cinématique. Le vecteur contrainte \underline{t} est décomposé en une contrainte normale σ_n et une contrainte de cisaillement τ parallèlement à la direction \underline{d} (fig. 1a,b).

I.2. MODELE MICROMECHANIQUE MULTIGRAIN

Une première approche consiste à définir un repère local pour chaque élément du maillage élément fini (fig. 2) dans lequel les éléments cinématiques et statiques décrits précédemment sont intégrés.

Dans cette première approche, chaque élément représente un grain qui se transforme en un seul variant de martensite et le modèle vise ainsi à décrire le comportement d'un ensemble de grains en interaction.

I.2.1. Critères d'évolution et description du fonctionnement de la simulation

La formulation thermodynamique développée dans le chapitre précédent fournit un critère d'avancement de la transformation concernant l'ordre de transformation des éléments et l'orientation du repère local qui leur sont associés. Nous avons mis en exergue un terme mécanique qui dépend de l'orientation de l'interface, représentant le travail produit par le passage du front de transformation en un point de matière:

$$\Delta W = \overline{\sigma_n} \varepsilon_0 + \overline{\tau} \gamma_0, \text{ où } \overline{\sigma_n} \text{ et } \overline{\tau} \text{ sont les éléments statiques moyennés sur l'interface.}$$

L'état de contrainte interne induit une orientation du produit de transformation dans la mesure où ΔW représente le travail moyen produit à l'interface entre les deux phases et l'expression obtenue pour ΔW montre qu'il dépend de l'orientation du plan d'habitat (du vecteur normal \underline{n}).

De façon plus détaillée, si \underline{T} est le tenseur des contraintes moyen pour un élément du maillage, le vecteur contrainte \underline{t} s'exprime selon $\underline{t} = \underline{T} \cdot \underline{n}$ ce qui détermine la contrainte normale $\sigma_n = \underline{n}^T \underline{T} \underline{n}$, et le vecteur contrainte de cisaillement d'expression $\underline{\tau} = \underline{t} - \sigma_n \underline{n} = (\underline{T} - \underline{n}^T \underline{T} \underline{n}) \underline{n}$ de module $\tau = |\underline{\tau}|$.

Le vecteur \underline{n} est paramétré dans le cas général (tridimensionnel) par 2 angles d'Euler θ et φ (fig. 3) et la force motrice ΔW devient une fonction de ces deux paramètres

$$\Delta W = F(\theta, \varphi) = (\underline{n}^T \underline{T} \underline{n}) \epsilon_0 + |(\underline{T} - \underline{n}^T \underline{T} \underline{n}) \underline{n}| \gamma_0$$

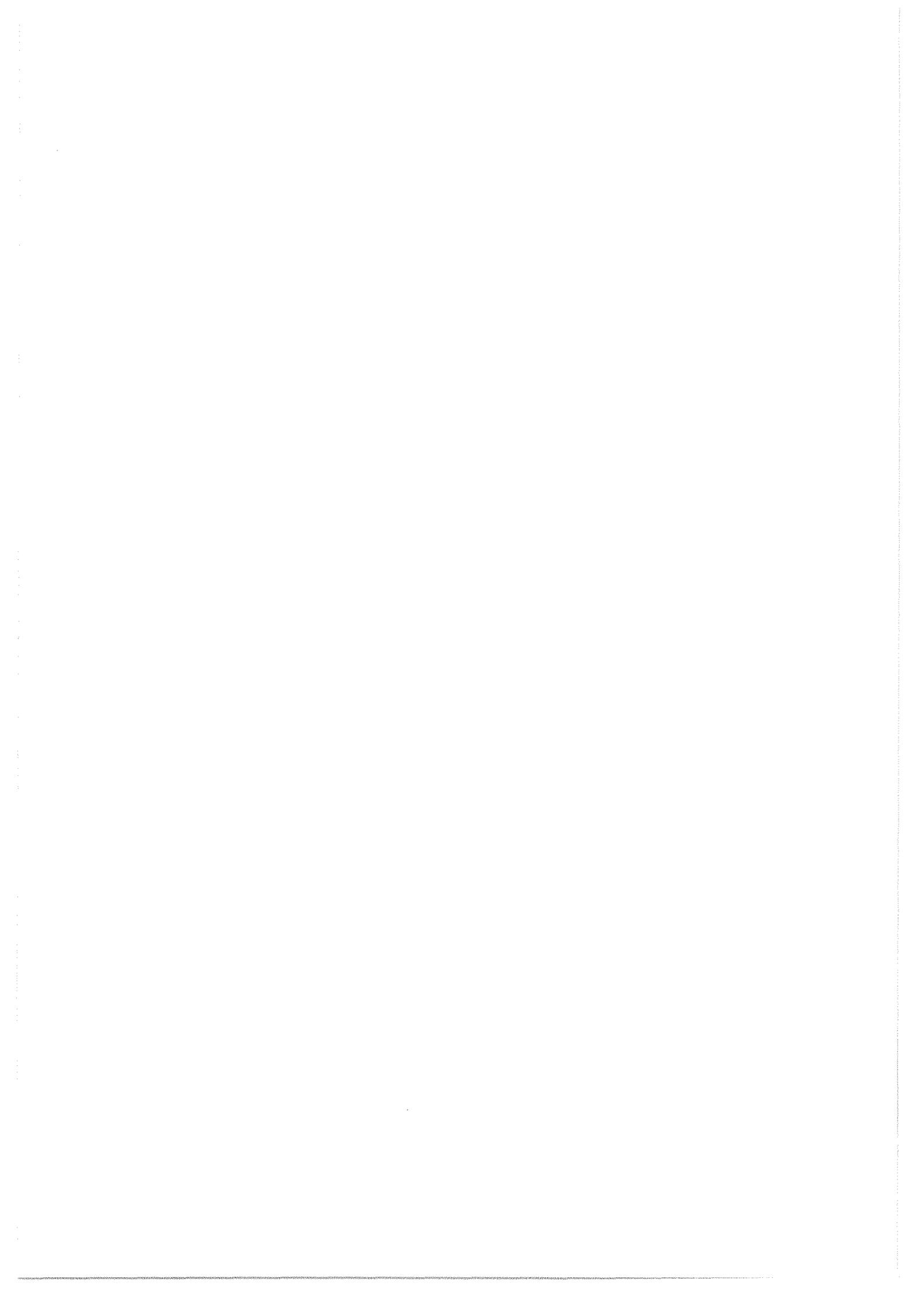
A chaque pas de transformation, parmi tous les éléments non encore transformés (éléments "austénitiques"), celui dont l'état de contrainte moyen (moyenne des contraintes aux noeuds de l'élément) induit la valeur maximale de ΔW est retenu, et l'orientation de son repère local (angles θ et φ) est déterminée par la direction correspondante du vecteur normal \underline{n} (angles θ et φ). Dans ce modèle, le nombre d'orientations des variants est considéré comme infini (dans la réalité, il est au maximum de 24 par grain, mais il est augmenté par les orientations des grains).

Le calcul débute par l'application du chargement extérieur qui est maintenu constant durant la progression de la transformation. Tous les éléments ayant au départ le même état de contrainte, nous choisissons l'élément où s'initie la transformation.

On impose à cet élément le tenseur de déformation (1) dans le repère local dont l'orientation est déterminée par l'état de contrainte appliquée ainsi que les propriétés mécaniques de la nouvelle phase. L'orientation du repère local étant connue, on peut alors exprimer le tenseur $\underline{\epsilon}^T$ dans un repère fixe et l'intégrer à la loi constitutive élastoplastique du matériau $\underline{d}\underline{\epsilon} = \underline{d}\underline{\epsilon}^e + \underline{d}\underline{\epsilon}^p + \underline{d}\underline{\epsilon}^tr$ dans le cas général. Ces différents concepts ont été intégrés dans le code de calcul aux éléments finis ASKA [5].

La déformation de transformation est imposée de manière incrémentale, ce qui peut permettre la formation simultanée de plusieurs variants. Cela modifie l'état de contrainte interne où se développe alors une situation mécanique hétérogène. Il est alors possible de tester le critère de façon locale pour chaque élément parent en intégrant dans celui-ci l'état de contrainte interne généré par la transformation. Le critère est testé après chaque incrément de la déformation de transformation*. Il en découle alors l'activation d'un nouvel élément et la procédure décrite plus haut est répétée jusqu'à ce

* On note que dans ce cas où seul le cisaillement est introduit le critère de transformation est un critère de type Tresca (cisaillement maximum).



que l'ensemble des éléments du maillage soit transformé. Un algorithme décrivant les principales étapes de la simulation est présenté figure 4.

Les calculs sont effectués à l'Université de Linköping, la majorité sur un CRAY XMP / 48.

I.2.2. Résultats de la simulation

Par souci de sérier les difficultés et de les traiter de façon indépendante et successive, nous avons considéré le cas plus simple d'un matériau thermoélastique pour lequel la transformation présente un caractère réversible (faible hystérésis) [6,7] ; seul le cisaillement est alors introduit ($\epsilon_0 = 0$). Dans ce cas, les déformations plastiques restent très faibles, ce qui nous a conduit à utiliser une loi de comportement élastique des phases (module d'Young identique pour les deux phases égal à 2.10^5 MPa et même coefficient de poisson 0,3). Le calcul est effectué en conditions bidimensionnelles de contraintes planes, pour un chargement uniaxial appliqué (10 MPa) en conditions de frontières libres.

Les résultats de cette première approche mettent en évidence l'effet des contraintes internes générées sur l'avancement de la transformation, à savoir l'ordre de transformation des éléments et l'orientation des variants de martensite qui leur sont associés (fig. 5 et 6).

En raison des symétries inhérentes à la géométrie du modèle, aux conditions de sollicitation et aux paramètres de transformation (cisaillement seul), il est suffisant d'examiner la situation développée pour un quart du maillage seulement.

La transformation progresse de façon "sphérique" à partir de l'élément central -où s'initie la transformation- et une majorité d'éléments présentent l'orientation à 45 degrés du plan d'habitat qui est celle du premier élément transformé. Certains éléments qui s'écartent des axes de symétrie du modèle ont des orientations différentes de 45 degrés, ce qui témoigne de variations du champ de contrainte local (le critère de transformation s'identifie dans le cas présent à un critère de cisaillement maximum et la dépendance de l'orientation s'analyse à partir des cercles de Mohr).

Cette première approche de la modélisation d'une transformation martensitique effectuée à l'échelle microscopique illustre l'introduction de concepts micromécaniques dans une simulation par éléments finis, décrivant principalement l'effet des contraintes locales sur le développement de la transformation.

Notons par ailleurs l'aptitude d'un tel modèle à représenter le comportement du monocristal : la transformation simultanée de tous les éléments avec la même déformation de transformation en conditions de sollicitations uniaxiales conduit à un cisaillement "macroscopique" d'amplitude indépendante de celle de l'état de contrainte appliquée (ici une dilatation $\gamma_0/2$ dans la direction de la contrainte appliquée et une contraction de même valeur dans la direction perpendiculaire).

Un tel modèle permettrait d'accéder directement au comportement macroscopique du matériau en cours de transformation, il ne prend cependant pas en compte de façon explicite les aspects morphologiques propres à la transformation. La formation de plaquettes de martensite de différentes orientations étant généralement observée à l'intérieur d'un grain [8], une description de la transformation à cette échelle s'avère donc nécessaire.

II - MODELE MICROMECHANIQUE DU COMPORTEMENT D'UN GRAIN

La plus grande complexité liée à la prise en compte de la description de la transformation à une échelle physique plus fine nous amène tout d'abord à quelques considérations de méthodologie.

Trois échelles physiques distinctes sont maintenant impliquées dans l'analyse, soit :

- l'échelle du grain
- une échelle intermédiaire qui intègre un ensemble de grains en interaction, de différentes orientations
- et l'échelle d'un "composant" du matériau.

L'idée qui supporte l'analyse micromécanique est que l'étude du comportement à l'échelle du grain peut être utilisée pour établir la loi constitutive d'un grain lors d'une transformation martensitique. Cette loi constitutive peut ensuite être utilisée dans un calcul aux éléments finis à l'échelle intermédiaire, où les éléments représentent des grains.

A cette échelle, une contrainte externe est appliquée conduisant à une déformation de plasticité de transformation calculée de façon analogue à celle employée pour la simulation d'une transformation par diffusion (chapitre I). A l'échelle du composant d'un matériau, il est alors possible d'effectuer des calculs de mécanique des milieux continus où la déformation de plasticité de transformation est considérée comme une déformation supplémentaire. Ces trois échelles sont évidemment imbriquées l'une dans l'autre de façon interactive.

Il existe cependant une difficulté fondamentale liée à la représentation d'une possible interaction entre grains : si une telle interaction existe, elle ne peut être prise en compte de façon appropriée à l'échelle du grain qu'après avoir effectué le calcul à l'échelle intermédiaire. Ceci exigerait de réitérer le calcul du grain par un calcul complètement couplé entre les deux échelles, ce qui est tout à fait prohibitif d'un point de vue temps de calcul.

Dans le présent travail, nous avons abordé la modélisation du comportement d'un grain pendant une transformation martensitique. Les différentes hypothèses et caractéristiques du modèle sont tout d'abord discutées, avant de décrire le fonctionnement de la simulation.

II.1. HYPOTHESES ET TRAITS GENERAUX DU MODELE

La nécessité de décrire le couplage entre l'état de contrainte et la transformation à l'intérieur d'un grain nous ont conduit à choisir le grain comme unité physique de base pour la modélisation.

Nous supposons que le matériau peut être décrit par la répartition spatiale de grains identiques. Le choix de conditions limites représentant un comportement périodique permet alors de faire la transition du niveau microscopique au niveau macroscopique. Nous avons déjà utilisé une telle approche pour la simulation du comportement d'un matériau pendant une transformation par diffusion.

Le grain est discrétisé par des éléments triangulaires (324 éléments) et la topologie du maillage ainsi formé (fig. 7) permet la formation de bandes d'éléments décrivant les plaquettes (variants) de martensite. Par rapport au modèle multigrain où l'orientation du plan d'habitat varie de façon continue, nous avons ici introduit un aspect cristallographique prenant en compte la nature discrète des orientations possibles du plan d'habitat, soit au maximum 24.

Cet aspect est introduit dans le modèle bidimensionnel qui autorise la formation de quatre types de variant formant entre eux un angle de 45 degrés. Deux bandes obliques (le vecteur normal au plan d'habitat ayant pour orientation 45 ou 135 degrés), une bande horizontale et une bande verticale peuvent ainsi être formées (fig. 7).

Dans chacune de ces quatre directions, une bande d'éléments peut être construite, décrivant un variant de martensite. Le plan d'habitat est représenté par sa trace dans le plan du modèle et il est parallèle à la plus grande direction du variant.

Une telle association entre la géométrie propre au maillage E.F. (données topologiques) et les caractéristiques morphologiques introduites semble réaliste lorsque l'on considère une situation tridimensionnelle (cas général) pour laquelle le nombre d'orientations possibles du plan d'habitat est 12 dans le cas des alliages ferreux ayant les plans d'habitat {2 2 5}, [4].

II.1.1. Choix des conditions limites

Comme nous l'avons mentionné auparavant, le choix d'une cellule de base avec des conditions limites appropriées permet d'accéder au comportement d'un ensemble de grains en interaction.

Le choix de conditions limites ressort en réalité de la procédure couplée décrite précédemment et une approche découplée telle que nous l'abordons laisse envisager deux situations extrêmes : des frontières rigides qui empêchent les plaquettes de pénétrer le joint de grain - dans ce cas, il n'est pas possible de représenter une déformation locale de la frontière au voisinage seul de la pointe du variant - ou des frontières libres qui représentent le comportement d'un grain dans un environnement non résistif (pas de forces d'interaction entre grains voisins).

Le comportement réel du grain se situe vraisemblablement entre ces deux extrêmes.

Afin de choisir entre ces deux types de conditions limites, nous avons étudié la réaction mécanique du modèle lorsque l'on impose la transformation d'une bande horizontale, dans un cas élastique ou seul un cisaillement est imposé (19%). La figure 8 montre la déformée du maillage dans le cas à frontières libres et les isocontraintes de Von Mises pour le cas à frontières rigides.

Dans le cas de frontières libres (fig. 8a), l'accommodation du cisaillement de grande amplitude (19%) imposé s'effectue par une translation en bloc de la partie supérieure du modèle. Comme nous pouvons le supposer, les niveaux de contraintes internes sont proches de zéro.

D'un point de vue physique, cette situation est probablement irréaliste car les joints de grains interviennent comme des obstacles à la propagation des plaquettes de martensite [8].

Nous avons alors décidé d'appliquer des contraintes aux frontières du grain, soit des bords droits et l'absence de cisaillement macroscopique, préservant ainsi la rectangULARITÉ de la cellule durant la transformation.

D'un point de vue thermodynamique, de telles conditions limites permettent une transition micro-macro cohérente avec le cadre des matériaux standards généralisés : l'application d'une sollicitation externe sans cisaillement sur les frontières du grain conduit à une réponse mécanique également sans cisaillement (en raison de la rectangULARITÉ du processus de transformation).

De telles conditions limites conduisent cependant à des niveaux de contraintes internes extrêmement élevés (concentration de contraintes en bout de plaquette, jusqu'à 10 GPa), comme le montre la figure 8b. Aussi la façon dont la déformation de transformation - qui met en jeu des paramètres de valeur finie - est accommodée, doit donc être discutée. Avant cela, nous présentons le modèle d'avancement de la transformation à l'intérieur du grain.

II.1.2. Modèle d'avancement de la transformation

La progression de la transformation s'effectue par la formation successive de variants de martensite à l'intérieur du maillage. L'ordre de transformation des variants et leur plan d'habitat correspondant sont déterminés de la manière suivante : l'état de contrainte locale dans chaque élément non encore affecté par la transformation est projeté sur l'un des quatre vecteurs normaux possibles (vecteur \underline{n} sur la fig. 7). Il peut être réduit en une contrainte σ_n normale au plan d'habitat et une contrainte de cisaillement τ le long de celui-ci (dans la direction \underline{d} indiquée fig. 7). L'élément et l'orientation pour lesquels la force motrice mécanique $\Delta W = \sigma_n \varepsilon_0 + \tau \gamma_0$ (fonction de \underline{n}) a une valeur maximale seront le "point" de germination (pour la prochaine plaquette) et la direction du variant respectivement. Une question fondamentale est de savoir si la plaquette se forme de manière immédiate ou si la transformation met en jeu une croissance successive élément par élément de celle-ci à partir de son point de germination, permettant aux effets résistifs liés aux accroissements de l'énergie de déformation de stopper la propagation du variant ou encore de permettre le développement d'un autre variant (nouveau plan d'habitat) avant la fin de la transformation du premier.

L'introduction de tels concepts semble difficile car ils nécessitent l'implication de tous les termes du bilan énergétique - dont principalement les énergies de déformation des deux phases - dans la formulation d'un critère d'évolution plus complet que celui utilisé dans le modèle actuel, et nous ne l'avons pas considéré pour le moment.

Nous supposons dans l'état actuel des choses que chaque nouveau variant se forme de manière instantanée dans sa plus grande direction jusqu'à la rencontre de la frontière du grain ou d'un autre variant déjà formé. Cette idée est associée à l'hypothèse que les temps de relaxation de la transformation sont inférieurs au temps de retour à l'équilibre mécanique du système perturbé, ce qui implique que l'état mécanique local ne contrôle pas totalement l'étape de croissance du variant (les variables mécaniques sont alors hors équilibre). Ceci est en accord avec le caractère dynamique de la propagation de la transformation (qui s'effectue avec une vitesse proche de celles des ondes élastiques du réseau pour les alliages ferreux).

Un nouveau variant ayant été activé, l'ensemble des éléments qui le constituent se transforme alors de manière groupée et ils reçoivent la déformation de transformation de façon simultanée.

Celle-ci étant imposée de façon incrémentale, nous considérons que - soit la plaquette se forme complètement avant l'initiation de la suivante, - soit de nouvelles plaquettes peuvent se former avant

la fin de la transformation de la première (fin de l'incrémentation), cette deuxième possibilité conduisant à tester le critère de transformation après chaque incrément.

En fait, nous avons constaté que les deux hypothèses conduisent à des résultats quasi identiques en ce qui concerne le choix des orientations des variants successifs : l'anisotropie de l'état de contrainte local est, en effet, pratiquement fixée dès le premier incrément de transformation du variant et les incréments suivants conduisent uniquement à un changement radial de l'état de contrainte local.

Dans ce travail, la première hypothèse a été retenue ; elle s'accorde avec l'hypothèse de caractère instantané de la croissance du variant qui a été formulée.

II.1.3. Modes d'accommodation de la déformation de transformation et morphologie des variants

La formation des variants de martensite s'accompagne d'une déformation de transformation mettant en jeu un cisaillement de valeur finie tout au long de la plaquette (19% en l'occurrence). Expérimentalement, un cisaillement important apparaît dans la matrice austénitique exclusivement en bout de plaquette.

Comme nous l'avons vu précédemment, une première simulation utilisant un comportement élastique des phases conduit cependant à des niveaux de contraintes supérieurs à 4 GPa tout au long de la plaquette et à une concentration extrêmement forte de contraintes à ses extrémités (jusqu'à 10 GPa), (figure 8b).

D'un point de vue expérimental [11], on peut définir deux mécanismes principaux d'accommodation de cette déformation:

- la formation de variants formant un groupe mutuellement auto-accommodant (par ex. en situation de macles) ;
- la déformation élastique et plastique dans chaque phase.

Dans une première approche, nous avons retenu dans notre modèle l'accommodation élastique et plastique en utilisant une loi de comportement élastoplastique des phases. L'écrouissage est supposé isotrope. Le calcul de la formation d'un variant de martensite permet alors de mettre en évidence les zones d'écoulement plastiques. Les données mécaniques et paramètres de transformation utilisés pour ce calcul figurent dans le tableau 1 ci-dessous.

Propriétés Phase	Module d'Young MPa	Coefficient de Poisson	Limite élastique MPa	Coefficient d'écroutissage MPa
AUSTENITE	2.10^5	0.3	300	3800
MARTENSITE	2.10^5	0.3	1000	8300
Paramètres de transformation $\gamma_0 = 0.19$; $\epsilon_0 = 0.03$				

Tableau 1 : données d'entrée pour la simulation.

La figure 9 donne les valeurs de déformation plastique équivalente cumulée en certains noeuds du variant et de son voisinage : l'écoulement plastique est concentré essentiellement en bout de plaquette (niveaux atteignant 20%) ; une légère plastification se poursuit également le long du variant, mais avec des niveaux sensiblement plus faibles (de l'ordre de 0,1%) ; les niveaux de contrainte sont ici proches de la limite d'élasticité de la martensite.

Notons qu'un tel résultat est à rapprocher de celui obtenu par le modèle analytique de LING et OWEN. Ces auteurs ont calculé les enveloppes de zones plastiques développées lors de la formation d'une plaquette de martensite en fonction de sa morphologie, caractérisée par le rapport épaisseur/longueur (solution d'Eshelby pour une inclusion ellipsoïdale en élasticité). Ils obtiennent une concentration de déformation plastique en bout de plaquette qui est d'autant plus marquée que la plaquette est fine.

L'accommodation par déformation plastique conduit bien sûr à une relaxation des contraintes internes qui atteignent par exemple 2,6 GPa au point A et 1 GPa au point E (alors que dans le cas d'accommodation élastique, elles s'élevaient respectivement à 10 GPa et 4 GPa).

Dans notre simulation, nous avons aussi considéré que le variant atteint le joint de grain avec une morphologie "en pointe". Il est d'ailleurs généralement observé expérimentalement que les variants de martensite présentent une forme très affinée au voisinage du joint de grain [8]. Des calculs mécaniques effectués par BENSALAH [12] ont d'ailleurs montré que cette forme diminue les contraintes internes.

Cette morphologie en pointe est introduite dans le modèle (fig. 7) en laissant les deux éléments terminaux du variant non transformés (lorsque la taille du variant formé excède une taille critique, en l'occurrence 6 éléments).

De telles considérations ne prévalent cependant pas lorsque le variant est stoppé par un autre variant déjà formé et il se forme alors une zone de contact locale entre variants.

II.1.4. Fonctionnement et nature des résultats de la simulation

Le calcul débute par l'application d'une contrainte externe qui induit un état de contrainte initial homogène pour les éléments du maillage ; pour l'ensemble des calculs, nous avons choisi un état de contrainte appliquée uniaxial (suivant x). Tous les éléments ayant alors le même état mécanique, un premier site (élément) est choisi et l'orientation de son plan d'habitat est fixée par la direction de la sollicitation appliquée. Après cela, le variant associé est défini (l'ensemble des éléments qui le constituent) et un calcul élastoplastique incrémental est effectué pour le variant. L'incrémental de la déformation de transformation étant achevée, tous les éléments non transformés sont testés suivant le critère de transformation décrit auparavant et un nouvel élément - site de germination d'une nouvelle plaquette - sera retenu.

A chaque pas de transformation, les contraintes internes développées par la formation de plaquettes de martensite permettent la poursuite de la transformation.

De cette manière, de plus en plus de variants se forment jusqu'à transformation complète de tous les éléments. Un algorithme résumant les étapes principales de la simulation est décrit figure 10 .

II.2. RESULTATS DE LA SIMULATION

L'illustration du fonctionnement du modèle par un calcul-type permet de situer le type de résultats et d'informations que l'on peut obtenir par cette simulation. Ils concernent d'une part des aspects locaux tels que la distribution des variants (orientation du plan d'habitat), les contraintes internes et déformations plastiques générées au cours de l'avancement , et d'autre part des résultats plus globaux que sont les évolutions des déformations à l'échelle de la cellule.

Nous avons choisi dans ce calcul une première bande diagonale de grande taille (elle représente environ 10% en fraction transformée), pour une contrainte uniaxiale appliquée (direction x) de 10 Mpa.

II.2.1. Distribution de variants et de contraintes internes

Un premier résultat concerne la distribution des variants de martensite tels qu'ils se forment au cours de l'avancement (fig. 11) : l'ordre d'apparition est indiqué ainsi que la direction du cisaillement associé à chaque nouveau variant.

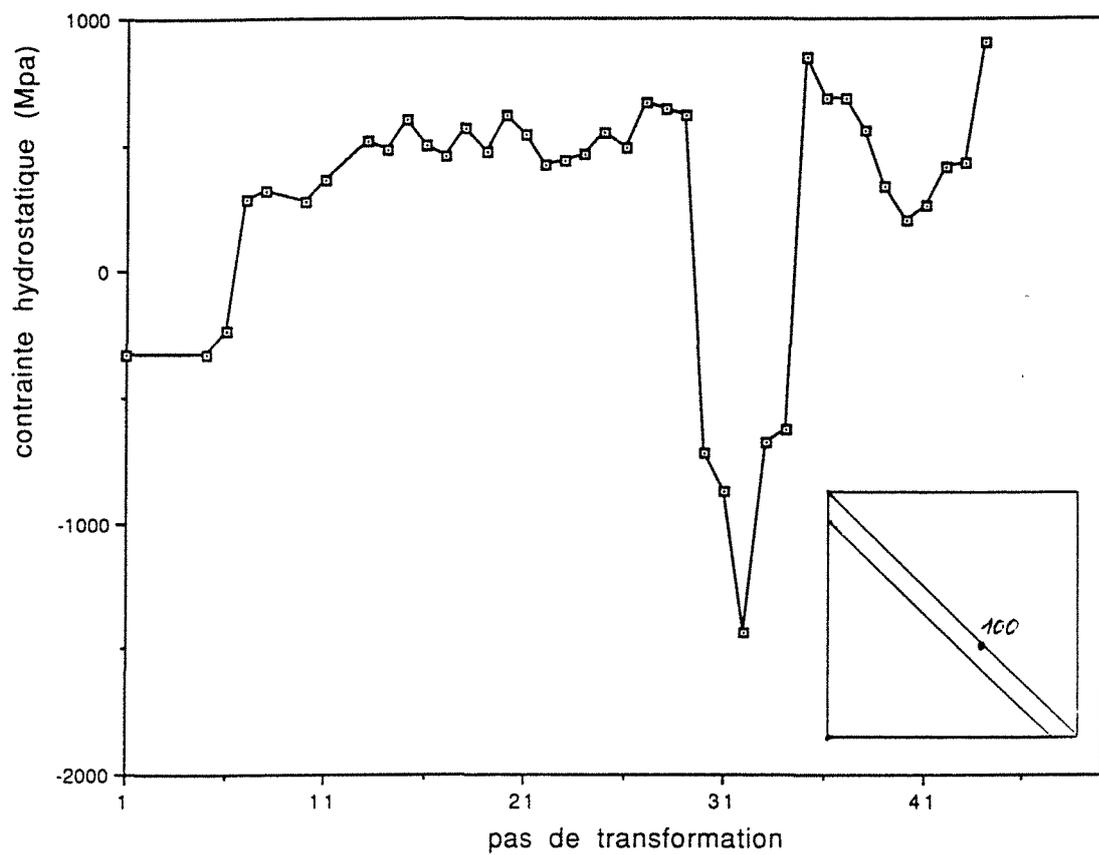


Figure 13: Evolution de la contrainte hydrostatique du noeud 100 en fonction de l'avancement de la transformation.

Une caractéristique de cette distribution de variants est la tendance à former des bandes parallèles, les directions de cisaillement étant soit de même sens, soit de sens opposé. Dans cette dernière situation, elles s'apparentent à des macles.

Il est à noter que les "sites de germination" d'une nouvelle plaquette sont souvent situés dans le prolongement d'une plaquette déjà formée, à la frontière du grain. En effet, les contraintes internes y sont élevées et notre critère de transformation va conduire à la formation de petites plaquettes dès le début de transformation.

Nous avons analysé le développement des zones plastifiées avec l'avancement de la transformation. Les figures 12a,b,c,d montrent de façon schématique la forme des enveloppes de zones plastiques pour quatre stades de transformation : la formation des variants 7,13 et 20 correspondant à des fractions transformées de 30%, 50% et 60% respectivement et la transformation complète.

Alors que la formation du variant 1 n'avait conduit qu'à de très faibles déformations plastiques le long de ses bords (fig.9), pour 30% de transformation (fig.12a), des déformations plastiques plus étendues sont apparues le long des variants 5 et 7. Nous notons que les niveaux de contraintes internes générés le long du variant 7 sont de l'ordre de grandeur de la limite d'élasticité de l'austénite alors qu'ils peuvent atteindre deux fois celle-ci le long du variant 5. En effet, ce dernier variant induit un cisaillement incompatible avec les conditions limites imposées à la frontière.

La formation de nouvelles bandes de martensite (pas 13 et 20 fig.12b et c) conduit à étendre les enveloppes plastiques autour des variants. On conserve une concentration de contraintes élevées en bout de plaquette, alors que le long de celle-ci, les niveaux de contrainte restent d'un ordre de grandeur comparable à celui de la limite d'élasticité de l'austénite.

En fin de transformation (fig. 12d), nous avons représenté les enveloppes des zones où la contrainte de Von Mises excède la limite d'élasticité de la martensite (1 Gpa). Elles sont essentiellement situées près des joints de grain.

Dans ces zones, les niveaux de déformations plastiques cumulées tout au long de la transformation atteignent environ 10%. A l'intérieur du grain, ces niveaux sont de quelques %. Il nous a paru intéressant d'analyser aussi les variations de contraintes internes avec l'avancement de la transformation en certains noeuds du maillage. A titre d'exemple, la figure 13 donne l'évolution de la contrainte hydrostatique du noeud 100 qui est situé sur le bord commun aux variants parallèles 1 et 30. Après la formation du premier variant, ce noeud est en compression ; il passe en traction au 7ème pas et repasse en compression lors de la formation du variant 30. Une nouvelle mise en traction se produit au pas 35 et le noeud reste en traction jusqu'à la fin de la transformation. Nous avons aussi

observé que des noeuds qui se transforment dans les derniers pas restent dans un état de compression, alors que les noeuds transformés suffisamment tôt sont déjà repassés en traction.

A l'aide de ces analyses, nous pourrions nous attendre à pouvoir mettre en évidence des différences de comportement lors de la formation de variants parallèles à mêmes directions de cisaillement ou ayant des directions de cisaillement opposées.

Nous avons porté dans le tableau 2 la contrainte équivalente aux points marqués A, B, C, D sur les figures 12a,b,c,d, pour quatre pas de transformation. Les points A, B sont situés sur le bord commun aux variants 1 et 7 de direction de cisaillement de même sens et C, D appartiennent au bord commun aux variants 7 et 13 en situation de macles (directions de cisaillement opposés).

Pas de transformation	Noeud	A (variants de même sens)	B	C (variants maclés)	D
1		1,03	1,015		
7		1,06	0,53	0,65	0,48
13		0,98	0,69	0,48	0,75
20		0,23	0,23	0,53	0,35
fin de transformation		0,47	0,21	0,69	0,28

Tableau 2 : Contrainte équivalente (en Gpa) pour des noeuds situés sur les bords communs de variants de même sens (noeuds A,B) et de variants maclés (noeuds C,D).

Nous notons que la formation du variant 7 conduit à une forte diminution de la contrainte au point B ; au point A, la contrainte varie relativement peu. Lors de la formation du variant 13, le point D subit une augmentation de contraintes, alors que le point C voit son niveau de contraintes diminuer. A partir de ces résultats, nous ne pouvons pas mettre en évidence une diminution de l'énergie de déformation d'accommodation liée à la formation de variants avec des directions de cisaillement opposées, tel que LING et OWEN l'ont montré. En effet, dans notre modèle, les variants se forment successivement et la formation du variant s'accompagnant d'une mise en compression, elle conduira à une mise en traction des zones voisines. Seul un modèle pouvant décrire l'apparition simultanée de plusieurs variants nous permettrait d'avancer dans l'analyse.

Ces résultats témoignent des effets locaux d'interaction entre variants ; l'évolution de la morphologie influence par ailleurs le comportement à une échelle plus macroscopique où il est intéressant de pouvoir quantifier la plasticité de transformation.

II.2.2. Plasticité de transformation

Des résultats plus macroscopiques du calcul concernent les évolutions de la déformation totale et de transformation avec la fraction transformée.

La déformation macroscopique totale ϵ_x^t est définie de façon commode (compte tenu du type de conditions limites) par le déplacement d'un noeud de la frontière.

Nous avons défini la déformation de transformation par le cumul (sommation) des contributions de la composante du tenseur de transformation dans la direction de la contrainte appliquée (ϵ_x^{tr}) pour chaque variant, multiplié par la fraction qu'il représente. La figure 14 donne les composantes ϵ_x^{tr} pour les différentes orientations du plan d'habitat de notre modèle. Les huit cas de figures possibles peuvent être regroupés par paires, donnant lieu à des contributions respectives de -0.08, 0.03 et 0.11 dans la direction de la contrainte appliquée. On note que les variants horizontaux ou verticaux donnent la contribution positive la plus faible (nulle ou égale à 0,03) alors que dans le cas des variants obliques (orientation égale à 45 ou 135 degrés), c'est le sens du cisaillement qui conditionne le signe de cette contribution qui est alors maximale (0.11) ou minimale (-0.08).

L'interaction locale entre variants voisins (dans leur zone de contact) peut être analysée en fonction des cisaillements respectifs qui leur sont associés .

On voit qu'il est possible pour deux variants mutuellement orthogonaux et de direction de cisaillement convenablement choisie d'annuler localement l'effet de leurs cisaillements respectifs (qui sont alors de signes opposés).

On note également la dissymétrie de situation des variants par rapport au choix des conditions limites qui interdisent tout cisaillement macroscopique (le cisaillement est associé à une extension et une dilatation dans les directions x et y pour les variants obliques, alors qu'il induit un cisaillement local pour les autres variants qui est incompatible avec les conditions limites utilisées).

Cette déformation de transformation présente un caractère réversible car elle est récupérable lors d'un cycle thermomécanique. Cette définition d'une déformation de transformation macroscopique (à l'échelle du grain) permet une évaluation de l'"anisotropie" - induite par l'état de contrainte local - de la déformation associée à la distribution de plaquettes. La différence entre la déformation totale et la déformation de transformation réversible représente la déformation élastique et plastique. Des calculs purement élastiques sous contrainte faible ont par ailleurs montré des valeurs identiques pour la déformation de transformation et la déformation totale, ce qui justifie la définition. Elle présente l'avantage de séparer la contribution des deux mécanismes à l'origine de la plasticité de transformation : orientation du produit de transformation et orientation de l'écoulement plastique par l'état de contrainte local.

Les évolutions de la déformation totale et de la déformation de transformation réversible avec l'avancement sont présentées figure 15 et la différence entre les deux courbes définit la déformation élastoplastique macroscopique résultante (irréversible pour sa partie plastique). Pour corrélérer ces évolutions macroscopiques avec le développement de la morphologie, nous avons représenté sur la figure 16 l'évolution du nombre d'éléments ayant même orientation en fonction de la fraction transformée. Ces orientations sont classées suivant la valeur de la contribution de la déformation de transformation dans la direction de la sollicitation (fig.14).

Les évolutions des déformations macroscopiques (fig.15) font apparaître une forte progression à caractère linéaire jusqu'à environ 30% de fraction transformée (formation des variants 1 et 7). Un effet d'orientation maximum des variants dans la direction de la contrainte appliquée existe, comme le montre la figure 16 où apparaît le nombre élevé d'orientations conduisant à une contribution de 0,11 pour ϵ_x^{tr} . Cela est dû pour une grande part à l'effet d'orientation du premier variant formé (qui représente plus de 10% en fraction surfacique). Nous observons que la formation du variant 5 ($\epsilon_x^{tr} = 0,03$) conduit à une diminution de pente de la déformation de transformation.

Au-delà de 30% de martensite formée, il apparaît un plateau sur la courbe de déformation (fig.15) lié à la formation de variants non favorablement orientés. Par exemple, l'apparition de la plaquette 9 horizontale conduit à une contribution nulle à la déformation de transformation.

Au-delà de 70%, il se forme des variants parallèles au premier avec une même direction de cisaillement (telles que 16,32) qui conduisent à une contribution positive maximale ($\epsilon_x^{tr} = 0.11$) et des variants de direction de cisaillement opposée (mâcles) tels que 13, 20, 35 qui induisent une décroissance des déformations macroscopiques liées à l'autocompensation des cisaillements locaux. Vers la fin de la transformation, des plaquettes plus courtes avec différentes orientations se forment et conduisent à des variations de déformation de transformation plus faibles.

La déformation plastique reste faible jusqu'aux 2/3 de la transformation (faible différence entre les deux courbes de déformation) et apparaît ensuite de façon plus nette.

Les faibles niveaux de déformations plastiques développées lors du premier stade de la transformation s'expliquent par les caractéristiques de la microstructure : la formation de bandes longues et parallèles conduit à localiser la déformation plastique en bout de variant où son orientation est telle qu'elle contribue peu à la déformation plastique macroscopique dans la direction de la contrainte appliquée. Au-delà de 80%, l'avancement de la transformation s'accompagne de la formation de bandes de plus en plus courtes qui induisent des niveaux élevés de contraintes internes et davantage de déformation plastique. Ces contraintes sont essentiellement de compression et peuvent donc conduire à une déformation plastique macroscopique négative telle que nous l'observons (la déformation totale est inférieure à la déformation de transformation). Ces résultats

pour une contrainte appliquée faible montrent que la taille du premier variant formé (et son orientation qui est toujours prescrite par la sollicitation appliquée) semble avoir un effet important sur l'anisotropie de la distribution des variants obtenue. De plus, il apparaît que l'écoulement plastique est essentiellement lié aux champs de contraintes internes générés par la transformation avec un rôle faible de la contrainte appliquée.

Ceci nous amène à analyser l'effet des deux paramètres principaux sur les résultats de la simulation: la taille de la première plaquette formée et le niveau de la sollicitation uniaxiale appliquée.

II.2.3. Effet de deux paramètres du modèle sur les résultats de la simulation

II.2.3.1. Effet de la taille de la première plaquette

Nous avons effectué un calcul similaire au précédent (contrainte appliquée de 10 Mpa), mais en choisissant une première bande oblique (orientée à 45 degrés) plus courte que précédemment. Cette première bande représente une fraction transformée de 3% (par rapport à 10% pour la bande longue prescrite précédemment).

Le choix d'une première bande courte (fig.17a) conduit à une évolution morphologique radicalement différente de celle obtenue pour une bande longue (fig. 15). Les variants qui se forment immédiatement après le premier (aux 2^e et 4^e pas de transformation qui correspondent à des fractions transformées de 10 et 20% respectivement) ont des orientations différentes du premier et cela donne lieu à une plasticité dans la direction de la contrainte, à l'échelle de la cellule (fig.17c).

La disposition finale des variants est moins uniforme dans ce cas, certaines plaquettes gardant l'orientation de la première (par ex. celles formées aux pas 6, 10, 17, 29, 35) ou alternant avec des plaquettes horizontales ou verticales (par ex. aux pas 2, 4, 11, 16, 25, 28, 37). La contribution de telles plaquettes verticales a lieu dans l'intervalle de fraction transformée [50, 70%] dans lequel une légère déformation plastique est par ailleurs observée (fig. 18b). Dans cet intervalle, les deux directions de cisaillement (opposées) conduisent à une contribution positive de la déformation de transformation dans la direction de sollicitation (fig.14). Dans les derniers 30% de transformation, des variants obliques de taille décroissante se développent essentiellement. Ils conduisent à générer une plasticité macroscopique du même ordre de grandeur que celle observée en début de transformation ; la contribution de la déformation plastique à la déformation totale est négative dans les zones [0,50%] et [70,100%], les contraintes étant en compression au voisinage des plaquettes formées. En fin de transformation, nous observons sur la figure 17b une majorité d'orientations dont la contribution à la déformation de transformation suivant x est faible, égale à 0,03.

Nous comparons dans le tableau 3 ci-dessous les déformations totales et de transformation obtenues dans les directions x et y en fin de transformation pour les deux calculs à 10 Mpa utilisant les deux tailles de première bande différentes. On vérifie que la somme des déformations de transformation dans les directions x et y est égale au changement de volume, soit 0.03. Pour une contrainte appliquée de 10 Mpa, les déformations élastiques sont négligeables et nous avons évalué les déformations plastiques dans chaque direction en soustrayant la déformation de transformation de la déformation totale correspondante.

Déformations Conditions du calcul	ϵ_x	ϵ_x^r	ϵ_x^p	ϵ_y	ϵ_y^r	ϵ_y^p
10 Mpa 1ère bande longue	0,0317	0,0397	-0,008	-0,0097	0,0199	-0,0119
10 Mpa 1ère bande courte	0,0145	0,0177	-0,0032	0,0123	-0,0044	0,0076

Tableau 3 : effet de la taille de la première bande sur les déformations évaluées dans chaque direction (contrainte appliquée uniaxiale de 10 Mpa)

Une conséquence du développement morphologique pour le cas d'une première bande courte est l'évolution quasi linéaire de la déformation de transformation, ce qui traduit le caractère relativement isotrope de la morphologie tout au long de l'avancement, pour un niveau de sollicitation faible. Cette relative isotropie est mise en évidence dans le tableau 3. Dans le cas d'une première bande courte, les valeurs finales des déformations de transformation ($\epsilon_x^r = 1,77\%$ et $\epsilon_y^r = 1,23\%$) sont assez proches des valeurs que l'on obtiendrait pour une contribution équivalente de tous les variants, soit 1,5% (ce qui correspond à la moitié du changement de volume). De plus, une isotropie parfaite devrait conduire dans une situation sans contrainte externe à des déformations plastiques macroscopiques nulles et donc à des déformations totales identiques dans les directions x et y. On peut noter que les déformations plastiques calculées sont 3 à 5 fois plus faibles que les autres déformations.

Par contre, dans le cas d'une première bande longue l'anisotropie est très marquée : nous obtenons des niveaux très différents des déformations de transformation dans les directions x et y ainsi que des déformations totales ; les niveaux des déformations plastiques sont comparables à ceux de la déformation de transformation.

De cette analyse, nous concluons que le choix d'une première bande courte est celui qui conduirait à se rapprocher le plus d'une situation isotrope de la morphologie développée au cours de la transformation, pour une contrainte appliquée nulle.

Aussi dans la suite, nous choisirons une première bande courte afin de minimiser les effets d'anisotropie de la morphologie à contrainte appliquée faible.

II.2.3.2. Effet du niveau de sollicitation mécanique appliquée (cas uniaxial)

Les résultats du calcul avec un niveau de contrainte appliquée de 250 MPa sont présentés sur les figures 18a,b,c. La déformation macroscopique atteint des valeurs très élevées (jusqu'à 13%) dans ce cas, en raison des contributions cumulées de variants d'orientation favorable.

La différence de comportement avec le cas à 10 MPa se manifeste dès le début de transformation, car la deuxième plaquette est oblique pour la contrainte la plus élevée (elle est verticale pour 10 MPa), (fig.18a).

Très peu de plaquettes horizontales ou verticales se forment et la plupart des bandes obliques (le plan d'habitat est orienté de 45 ou 135 degrés) ont la même direction de cisaillement. Très peu de macles sont produites. L'effet d'orientation maximum qui est observé ici est attesté par la présence quasi exclusive de variants de contribution maximale ($\epsilon_x^{tr} = 0.11$), (fig.18b) à la déformation de transformation macroscopique qui atteint 0,084 en fin de transformation.

L'application d'un état de contrainte de niveau proche de la limite d'élasticité de l'austénite (300 MPa) conduit à une plastification quasi uniforme dès l'apparition du premier variant (nous avons vérifié que la quasi totalité des noeuds sont plastifiés après formation de la première bande, alors que dans le cas d'une contrainte appliquée de 10 Mpa, certains noeuds ne se plastifient qu'à partir de la mi-transformation). La formation des premiers variants perturbe sans doute faiblement l'anisotropie du champ de contrainte interne (due à la contrainte appliquée) dans les zones austénitiques déjà plastifiées, ce qui explique l'anisotropie de comportement fortement marquée qui prévaut tout au long de la transformation. En particulier, nous notons que la pente de la déformation de transformation est maximale (égale à 0,11) jusqu'à environ 60% de phase formée. L'accommodation de la déformation par un écoulement plastique anisotrope représente ici une contribution importante à la déformation totale (jusqu'à 50% de celle-ci, fig. 18c). Cette anisotropie est bien mise en évidence si l'on compare les déformations de transformation suivant les directions x et y (tableau 4 ci-dessous).

Déformations Conditions du calcul	ϵ_x	ϵ_x^{tr}	ϵ_x^p	ϵ_y	ϵ_y^{tr}	ϵ_y^p
250 Mpa 1ère bande courte	0,135	0,084	0,0508	0,0832	-0,054	0,1372

Tableau 4 : calcul à 250 Mpa ; première bande courte. Déformations dans les directions x et y

Un effet de saturation se manifeste au delà des 2/3 de la transformation par une stagnation de la déformation macroscopique totale ; la croissance de la déformation de transformation est moins rapide, en raison de l'apparition de variants d'orientations moins favorables (par ex., les variants 38 et 42).

Pour ce niveau de contrainte élevée, le choix de la taille de la première bande a relativement peu d'effet sur les évolutions des déformations, comme le montre la comparaison du calcul original (première bande courte fig. 18c) avec un calcul similaire débutant par une première bande longue (fig. 19). On observe cependant que la linéarité des évolutions des déformations est conservée plus longtemps dans ce dernier cas, l'effet de saturation n'apparaissant que dans les derniers 20% (il est plus marqué dans ce cas). La déformation plastique macroscopique croît linéairement avec la fraction transformée jusqu'à ce seuil de 80% au-delà duquel elle garde une valeur sensiblement constante.

Afin de mieux situer l'effet du niveau de sollicitation appliquée sur les évolutions et les amplitudes des déformations produites, nous avons effectué un calcul (jusqu'à un taux d'avancement de 60% en raison du temps de calcul) avec une contrainte de 100 MPa (fig. 20). Pour ce taux de 60%, les niveaux de déformation sont environ trois fois plus faibles que dans le cas à 250 MPa ; par contre, les évolutions de la déformation de transformation sont identiques jusqu'à environ 20% de fraction formée. La comparaison de ce calcul avec celui à 10 Mpa montre une grande similitude dans les évolutions de la déformation de transformation, et la différence entre les deux calculs réside dans les niveaux plus importants de plasticité macroscopique générée pour une contrainte de 100 Mpa. Il semble donc au vu de ces comparaisons que l'écoulement plastique local ne modifie que faiblement la distribution des orientations de variants.

II.3. DISCUSSION ET DEVELOPPEMENTS FUTURS DU MODELE

Après un bref rappel des traits essentiels de la simulation, nous développerons la discussion sur la base des deux aspects principaux que sont d'une part l'effet des paramètres inhérents à la discrétisation éléments finis et d'autre part la description de la transformation que le modèle fournit.

Le modèle micromécanique que nous avons développé permet de décrire le comportement d'un polycristal d'alliage ferreux pendant une transformation qui met alors en jeu à la fois un cisaillement et un changement de volume. A ces fins, nous avons décrit la progression de la transformation dans une cellule représentative du matériau que nous avons identifiée à un grain et le choix de conditions limites de périodicité permet d'accéder au comportement à l'échelle macroscopique. Nous avons traité la transformation d'un point de vue mécanique des milieux continus en restant dans un formalisme de petites déformations, ce qui constitue une simplification

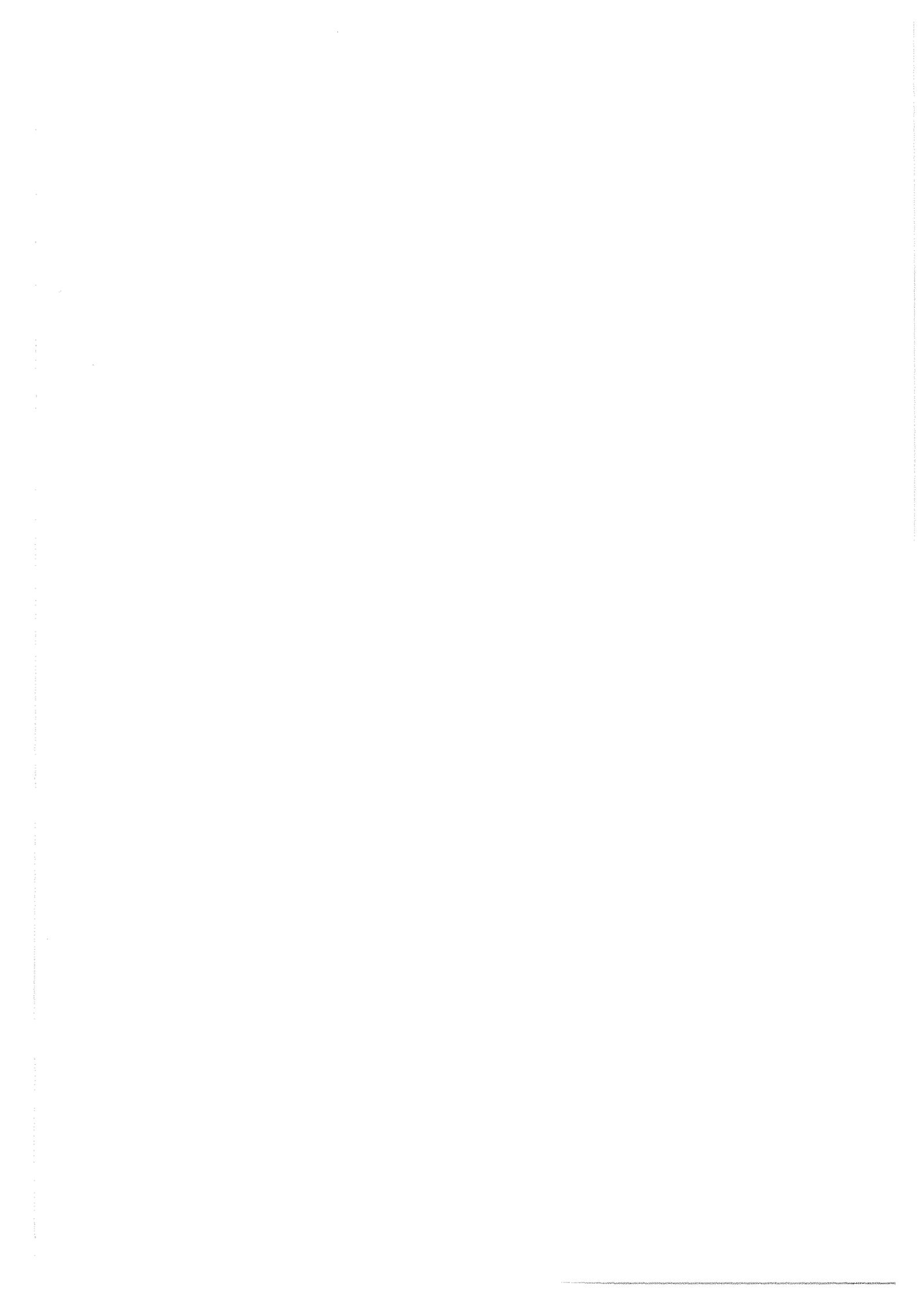
compte tenu des valeurs finies des paramètres de transformation (cisaillement de 19%) et en effectuant une analyse statique ; la loi de comportement de chaque phase est élastoplastique à écrouissage isotrope et la déformation de transformation est imposée aux éléments par incréments successifs. Nous avons considéré dans une première étape un modèle bidimensionnel, dans un état de contraintes planes.

A l'intérieur du grain, la morphologie des variants de martensite est représentée par la combinaison d'éléments triangulaires à trois noeuds qui permettent de décrire des plaquettes de forme quadrangulaire à bords plats et d'orientations discrètes, multiples de 45 degrés ; cette situation est réaliste si l'on considère l'existence de 12 orientations possibles pour le plan d'habitat dans le cas des alliages ferreux, qui est alors un plan de la famille {225}. A chaque étape du calcul, la détermination d'une nouvelle plaquette est gouvernée par la prescription d'un site de 'germination' à partir d'un critère thermodynamique de travail maximum produit à l'interface austénite / martensite et la transformation est menée jusqu'à son terme dans tous les cas de calculs (remplissage complet du maillage par des éléments de martensite) ; la croissance de la plaquette est alors instantanée.

Ce modèle permet de décrire la formation de variants de martensite et leurs interactions en fonction des états de contrainte internes générés, pour différentes conditions de sollicitations appliquées (uniaxiales). En retour, l'effet de la transformation est de générer des champs locaux de contraintes et de déformations plastiques dont il est possible de mesurer les distributions et les évolutions, en fonction de la morphologie développée ; ces résultats locaux sont difficilement accessibles à l'expérimentateur. Les phénomènes d'orientation des variants et d'orientation de l'écoulement plastique induit constituent les deux sources de plasticité de transformation et nous avons réussi à quantifier ces deux mécanismes à l'échelle de la cellule : la déformation totale est séparée en une contribution de déformation de transformation réversible et une contribution de plasticité macroscopique, dans la direction de la contrainte appliquée. Ces évolutions ont été corrélées à celles de la morphologie des variants.

II.3.1. Effet des paramètres du modèle éléments finis

La finesse de la discrétisation conditionne naturellement la quantité de fraction transformée à chaque pas (ou de manière équivalente le nombre de pas de transformation) ainsi que la morphologie des variants formés, qui à son tour détermine les niveaux et distributions de contraintes internes qui résultent de l'accommodation des déformations de transformation, ainsi que les évolutions des déformations à l'échelle de la cellule. Les variants de plus grande taille que le maillage permet d'obtenir ont un rapport épaisseur / longueur de l'ordre de 0,07 et leur formation conduit à leurs extrémités à des niveaux très importants de déformation plastique équivalente (de l'ordre de la dizaine de pour cent) ; l'état de contrainte le long des bords de tels variants est proche de la limite d'élasticité



de l'austénite. La progression de la transformation conduit à l'apparition de variants de longueur plus courte qui induisent alors une plasticité plus importante le long des bords. Expérimentalement, on observe en général la formation de plaquettes fines. Une meilleure discrétisation permettrait la formation de variants plus fins et en plus grand nombre et pourrait modifier les distributions de variants et les déformations macroscopiques. En outre, elle conduirait à atténuer les fluctuations observées pour les évolutions des déformations macroscopiques et donc à en donner une description plus régulière. Il ne faut néanmoins pas perdre de vue l'aspect temps de calcul qui conditionne le degré de raffinement autorisé dans la description des phénomènes.

Par ailleurs, nous avons pris en compte des conditions limites pour traduire les interactions entre grains. Nous avons considéré initialement deux possibilités extrêmes de conditions limites : des frontières libres (qui permettraient de représenter le comportement du monocristal) et des frontières rigides. La situation physique la plus vraisemblable est celle d'un joint de grain qui soit un obstacle à la propagation des variants et nous avons donc choisi des frontières rigides dans la simulation. Pour des conditions de frontières rigides (bord plan de déplacement normal), un calcul élastique représentant le cisaillement d'une bande horizontale ayant conduit à une concentration de contraintes très élevées près du joint de grain, nous avons imposé que le variant développé atteigne ce dernier avec une morphologie en pointe limitant les énergies de déformation et plus proche de la réalité.

La nature des conditions limites est primordiale quant aux effets d'interactions entre grains qu'elle permet de représenter et les états de contraintes obtenus en sont très dépendants. Le choix effectué ici correspond à des interactions fortes entre grains adjacents, restreintes cependant à l'échelle globale de la cellule et il paraît alors intéressant de pouvoir par la suite décrire les interactions entre grains d'une façon plus locale (en autorisant des distorsions du joint de grain). Il est alors intéressant de comparer les états de contraintes générés par le cisaillement d'une bande horizontale incomplète (forme en pointe) dans un cas élastique, pour des conditions libres d'une part et de frontières planes mais pouvant se cisailer d'autre part (fig.21,22). Dans la première situation, les niveaux de contrainte (contrainte équivalente) restent inférieurs à la limite élastique de la martensite le long du variant (225 MPa) et une concentration de contraintes élevées apparaît uniquement à ses extrémités (valeur maximale de 2,4 GPa). Par contre, la situation de bords droits conduit à des contraintes élevées tout au long du variant (de l'ordre de 1,3 GPa). La situation qui conduit à relaxer le plus les contraintes (et qui induirait le moins de déformations plastiques) est donc celle de frontières libres et il sera alors intéressant d'étudier la possibilité d'un type de conditions limites qui conduise à un tel effet de relaxation tout en étant physiquement réaliste.

Par ailleurs, les résultats de calculs ont montré que la morphologie du variant (morphologie en pointe) a des effets importants sur le développement de la microstructure, les nouveaux sites de germination se trouvant dans le prolongement de plaquettes formées auparavant. Cet effet est dû aux fortes interactions de l'extrémité des variants avec le joint de grain rigide (concentration de contraintes

et déformation plastique localisées à cet endroit). Afin d'étudier cet effet, nous avons effectué un calcul pour une première bande longue et une contrainte appliquée de 10 Mpa, dans lequel les variants continuent leur croissance jusqu'à la frontière du grain (pas de pointes). La comparaison des évolutions de déformations macroscopiques (fig.23) avec celles obtenues pour une morphologie en pointe des plaquettes (fig.15) montre que l'effet d'orientation favorable dans les 30 premiers pour cent de la transformation conduit à une déformation de transformation d'amplitude plus élevée dans le cas à bande pleine. Au delà et jusqu'en fin de transformation, on observe un effet de saturation des déformations, alors qu'elles continuent à croître dans le cas d'une morphologie en pointe (surtout dans l'intervalle de fraction transformée [70-100%]). D'autre part, la plasticité macroscopique générée est sensiblement plus faible pour une situation de bandes pleines. Nous expliquons ces différences de comportement par le fait que la formation de bandes très courtes (2 éléments) en bout de variant conduit dans le cas d'une morphologie en pointe à perturber davantage l'état de contrainte à cet endroit et il en résulte la formation de bandes d'orientations différentes.

La description des champs de contraintes internes est liée également à la nature des éléments utilisés, qui dans la formulation en déplacement utilisée ici induit des champs de contraintes constants sur un élément et discontinus d'un élément à l'autre. Une bonne description des contraintes est importante dans ce type de simulation où les critères d'évolution de la transformation sont fortement liés aux champs mécaniques existant à l'interface (bord commun à deux éléments) entre les deux phases et où il faut être capable de décrire avec suffisamment de précision les interactions entre variants (déformations et contraintes générées dans la zone de contact entre variants). D'autre part, le caractère plan du modèle nous a conduit à choisir une représentation en contraintes planes, qui conduit à une déformation additionnelle suivant la direction perpendiculaire au plan du modèle ; cela pourrait avoir un effet sur l'obtention d'un comportement isotrope du modèle à contrainte nulle, [14] (isotropie de la morphologie et plasticité macroscopique produite dans ce cas). Aussi l'hypothèse complémentaire de déformation plane permettrait de situer l'écart avec la première situation et fournirait une évaluation plus simple des résultats, compatible de plus avec le caractère plan des déformations de transformation imposées et le critère d'évolution utilisé (qui ne fait intervenir que les composantes des contraintes situées dans le plan du modèle).

II.3.2. Description de la transformation

Un aspect essentiel du modèle développé concerne la description de l'avancement de la transformation qui repose sur un critère thermodynamique de force motrice mécanique maximale associé à une propagation de la transformation par bandes successives d'éléments. La question fondamentale à ce propos est de savoir s'il est possible (et physiquement réaliste) de décrire la croissance même du variant en combinant la minimisation de l'énergie globale du modèle, inhérente aux éléments finis,

avec une approche énergétique plus locale intégrant les autres termes du bilan énergétique négligés dans la démarche actuelle.

Particulièrement, l'effet des énergies de déformation des phases induites par l'évolution de la microstructure peut être important : il peut en résulter un critère d'arrêt de la progression du variant, voire l'impossibilité de sa formation, et le choix d'un autre élément ou d'un autre plan d'habitat. Dans une première étape, il sera intéressant d'étudier l'évolution des énergies de déformation générées au fur et à mesure de la croissance du variant. Ces développements sont importants en vue notamment de l'établissement de critères de choix entre l'accommodation de la déformation de transformation par déformation (élastoplastique) ou par transformation, qui est un problème difficile de la modélisation (car il suppose que l'on puisse déterminer de nouveaux variants de martensite avant d'engendrer un calcul mécanique). D'autre part, la formulation d'un critère de croissance du variant nécessite d'introduire un seuil thermodynamique, lié aux énergies chimiques et de déformation, et variable par le dernier facteur énergie de déformation (à température constante) en fonction de l'avancement.

Nous avons montré que le critère d'évolution peut s'exprimer sous une forme locale (à l'interface austénite/martensite) quelle que soit la loi constitutive du matériau et nous avons identifié la force thermodynamique qui gouverne l'avancée du front de transformation. L'initiation (détermination de sites -éléments- de "germination") ainsi que la progression de la transformation (croissance du variant) sont contrôlées par le comportement interfacial. La situation qui est la nôtre dans laquelle le variant croît hors équilibre thermodynamique est évidemment plus complexe car les champs mécaniques ne contrôlent l'avancement de la transformation que par la détermination de nouveaux sites de "germination" et la formation du variant ainsi prescrit est instantanée. Il est néanmoins possible d'envisager la situation où la croissance du variant s'effectue par une succession d'états de quasi-équilibre, un même critère d'évolution plus élaboré étant appliqué à chaque nouvel état.

Dans le même ordre d'idée, la formulation d'un critère d'initiation et d'évolution des plaquettes de martensite joue un rôle important dans la description des interactions mutuelles entre variants. Si le modèle actuel permet de minimiser l'énergie d'accommodation mécanique des déformations de transformation, soit par déformation plastique localisée lors de la formation de variants de grande longueur ou par le développement de bandes parallèles, en revanche il permet plus difficilement de décrire les mécanismes d'accommodation par transformation, caractérisés expérimentalement par la formation de groupes de variants autoaccommodants (qui compensent mutuellement les déformations de transformation qui sont associées à chacun d'eux). Nous observons effectivement la formation de bandes parallèles dans notre simulation (dont certaines ont des directions de cisaillement opposées), mais ces bandes sont formées à des instants différents, alors que l'autocompensation des

cisaillements n'est possible que si les variants apparaissent simultanément. Il est alors nécessaire de réfléchir à un moyen d'obtenir de tels groupes de plaquettes autoaccommodantes dans notre simulation.

La situation où cet aspect est le plus déterminant est celui du matériau à comportement dit thermoélastique, pour lequel la transformation s'accompagne d'une faible hystérésis (quasi réversibilité), [13]. Une des conditions de réversibilité dans ce cas est l'absence de déformations plastiques ou une plasticité très faible localisée en bout de plaquette, et une transformation qui mette en jeu une dilatation proche de zéro. Pour situer l'effet de l'amplitude de la dilatation sur le comportement du grain dans notre modèle, nous avons effectué un calcul avec une dilatation 10 fois plus faible, soit 0,3%, pour une contrainte appliquée de 10 Mpa et une première bande longue. L'évolution des déformations (fig.24) est identique à celle du calcul original ($\epsilon_0 = 3\%$, fig.15) dans les trente premiers pour cent de transformation ; par contre, les évolutions sont différentes au-delà et conduisent à des niveaux de déformation de transformation plus faibles (soit 2,5% par rapport à 4%). En effet, la valeur plus faible de la dilatation conduit à un développement plus isotrope de la morphologie des variants. On note que la plasticité macroscopique développée est faible dans l'ensemble, alors qu'une plastification importante -mais non orientée par l'état de contrainte appliquée- se développe localement. Le calcul avec une première bande courte et une sollicitation proche de zéro permettrait de mieux situer l'aptitude de notre modèle à décrire un comportement thermoélastique.

Malgré son caractère prématuré, une première comparaison avec l'expérience peut être menée. Pour les forts niveaux de contrainte (250 MPa), notre modèle surestime (d'un facteur 4) les déformations par rapport à l'expérience [4]. Pour un niveau de contrainte plus faible (100 MPa), l'écart simulation-expérience est également très important. Néanmoins, nous pouvons souligner que la forme des courbes d'évolution de la déformation totale est voisine de celle mesurée : une pente élevée en début de transformation, qui décroît avec l'avancement.

Une première tentative d'explication de ces différences peut être amorcée. Les valeurs très élevées de déformation obtenues par notre simulation à forte contrainte appliquée (250 MPa) traduisent une forte "anisotropie" de comportement mécanique pour le grain, tant pour l'orientation des variants que pour la déformation plastique. D'un point de vue expérimental, deux points peuvent être considérés : la distribution d'orientations des différents grains d'austénite, et le comportement du matériau pendant la transformation.

En effet, d'une part l'expérimentateur mesure le comportement d'un ensemble de grains, ce qui implique un effet de moyenne, notamment des orientations du réseau cristallographique. La prise en compte de ce paramètre (orientation de la sollicitation mécanique relativement au réseau cristallographique pour chaque grain) dans la simulation pourrait conduire à un comportement plus isotrope.

D'autre part, le comportement réel du matériau pendant la transformation dépend fortement de ses caractéristiques mécaniques (limites d'élasticité des phases, amplitude de la variation volumique associée à la transformation), cinématiques (vitesse de l'interface) et des conditions de sollicitations imposées (vitesse de déformation qui conditionne la cinématique et le mode d'accommodation de la transformation ; niveau de contrainte appliquée qui influence la distribution des déformations plastiques générées). Un lien existe entre ces paramètres car les propriétés mécaniques des phases sont fortement dépendantes de la dynamique du processus. Or, la transformation a lieu pour des vitesses de l'interface qui sont en général très élevées (qui peuvent être de l'ordre de grandeur de la vitesse des ondes élastiques de réseau pour des alliages ferreux) et cela conduit alors à augmenter les propriétés de l'austénite lors de sa transformation en martensite. Afin de situer l'effet de propriétés mécaniques plus élevées sur le comportement du matériau, nous avons considéré le cas extrême où le comportement des phases est purement élastique et nous avons effectué un calcul sous une contrainte de 250 Mpa (première bande courte). Les résultats montrent une évolution quasi linéaire de la déformation totale avec l'avancement (fig.25) liée à un effet d'orientation des variants maximum (fig.26) (valeur finale obtenue égale à 10,8%). La comparaison sur la même figure de la déformation de transformation dans les cas de comportement des phases élastique et élastoplastique montre que l'orientation des variants est identique dans les premiers 60% de transformation.

L'introduction d'une loi de comportement élastique conduit à une diminution de la déformation totale, quel que soit l'avancement de la transformation. Néanmoins, pour ce cas élastique, l'orientation maximum est toujours conservée, ce qui n'est pas observé expérimentalement.

L'ensemble de nos résultats montre que notre modèle surestime certainement la déformation liée à l'orientation des variants ; pour mieux décrire le comportement réel du matériau, il nous semble nécessaire de mieux représenter la formation de variants autoaccommodants en prenant en compte un critère d'avancement de la transformation qui conduise à une minimisation de l'énergie mécanique d'accommodation.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] S.DENIS. Thèse de Doctorat Doctorat ès Sciences Physiques, INPL, 1987.
- [2] M.S. WECHSLER, D.S. LIEBERMAN, T.A. READ. Trans. AIME, 1953, 197, 1503.
- [3] E. PATOOR. Thèse de Docteur Ingénieur, Université de Metz, 1986.
- [4] E. GAUTIER. Thèse de Doctorat ès Sciences Physiques, INPL, 1985.
- [5] ASKA. Manuel d'utilisation, IKOSS, Stuttgart.
- [6] J.W. CHRISTIAN. Met. Trans., 1982, vol. 13A, 509.
- [7] Physical Metallurgy ; third edition, 1983. R.W. Cahn and P. Haasen eds.
- [8] G. KRAUSS, A.R. MARDER. Met. Trans., Vol. 2, 1971, 2343.
- [9] H.C.LING , W.S.OWEN. Acta Met., Vol. 29, 1981, 1721.
- [10] J. BENARD, A. MICHEL, J. PHILIBERT, J. TALBOT. Métallurgie générale, 2^{nde} édition, 1984. Masson.
- [11] E. GAUTIER, X.M. ZHANG, A. SIMON. Proceedings Int. Conf. on Residual Stresses (ICRS2), Ed. G. Beck, S. Denis, A. Simon, Elsevier Applied Science, 1989, 393.
- [12] M.O.BENSALAH. Thèse de troisième cycle. Université de Metz. 1986.
- [13] J.W. CHRISTIAN. Met. Trans. A, Vol. 13 A, 1982, 509.
- [14] J.B.LEBLOND. J. Mech. Phys. Sol., Vol. 34, N°4, 1986, 411.

CONCLUSION

CONCLUSION

Nous avons développé une modélisation micromécanique du comportement thermomécanique d'un matériau biphasé en cours d'évolution structurale. Cette modélisation se situe à l'échelle des phases et utilise la méthode des éléments finis. Nous avons simulé par le calcul le développement de la plasticité de transformation pour un matériau se transformant sous une contrainte appliquée, pour une transformation par diffusion et une transformation martensitique.

Le principe général de la simulation consiste à étudier le développement de la transformation à l'intérieur d'une cellule de base, représentative du matériau à l'échelle microscopique. La cellule est un carré ou un cube, soumis à un champ de contrainte extérieur pendant l'avancement. Chaque élément du maillage représente un élément de volume d'une des phases et la transformation est caractérisée par la déformation qui lui est associée ainsi que le changement de propriétés mécaniques qui sont imposées à chaque élément de nouvelle phase formée.

En considérant le concept d'analyse micromécanique de la transformation ainsi décrit, il est possible d'analyser le comportement (local, i.e. dans chaque phase et global, i.e. à l'échelle de la cellule) du matériau qui se transforme tout en étant sollicité mécaniquement (contrainte externe appliquée sur les faces de la cellule). On obtient alors la déformation de plasticité de transformation en soustrayant de la déformation totale de la cellule, la déformation élastique et plastique due à la contrainte appliquée et la déformation de transformation.

Dans une première partie, nous avons traité le cas des transformations par diffusion pour lesquelles la déformation de transformation est isotrope (changement de volume des éléments de phase formée) ; il en résulte que l'avancement de la transformation est indépendant de l'état de contrainte et peut donc être prescrit par avance. Le comportement mécanique de chaque phase est élastoplastique.

Nous avons décrit l'avancement de la transformation suivant deux modèles différents :

- un modèle de progression sphérique comportant une hypothèse de périodicité ; nous simulons ici la croissance simultanée de nodules de perlite régulièrement espacés. Un pas de transformation correspond à la transformation d'une nouvelle couche d'éléments ;

- un modèle de progression aléatoire dans lequel nous représentons l'apparition successive de nodules de perlite disposés au hasard. Chaque pas de transformation correspond à la transformation d'un seul élément.

Nous avons tout d'abord étudié l'influence de différents paramètres sur l'évolution de la plasticité de transformation, pour une contrainte appliquée uniaxiale :

- influence du pas de transformation (défini par le maillage). Des maillages de 4.4.4, 6.6.6 et 10.10.10 éléments ont été utilisés (le plus fin grâce à l'accès à un CRAY à Linköping) ;

- influence de la manière d'imposer les propriétés mécaniques de la nouvelle phase : en début ou en fin de pas ou encore de manière progressive entre le début et la fin ;

- influence des conditions limites du modèle : conditions de périodicité ou frontières libres.

Dans le cas du modèle sphérique, nous avons montré qu'il est nécessaire d'utiliser un pas de transformation très fin pour minimiser l'effet des deux premiers paramètres. Un maillage de 10.10.10 éléments est encore insuffisant pour décrire le comportement global.

Pour le modèle aléatoire, l'influence du pas de transformation et de la manière d'imposer les nouvelles propriétés mécaniques sont plus faibles. Nous avons également testé la bonne représentativité du caractère aléatoire du modèle en montrant le peu d'effet du type de conditions limites utilisées.

Une bonne concordance a été observée entre les deux modèles et la plasticité de transformation qui en résulte est une fonction fortement non linéaire de la fraction de phase formée. Ces évolutions calculées diffèrent cependant du comportement expérimental qui est linéaire.

L'application du modèle à des états de contraintes complexes (multiaxiaux et uniaxiaux variables avec l'avancement) a permis de formuler une loi de comportement pour la déformation de plasticité de transformation, qui a été trouvée proportionnelle au déviateur de l'état de contrainte. Elle peut ensuite être traitée comme une déformation supplémentaire dans la loi de comportement du matériau, à l'échelle macroscopique.

L'analyse des champs de contraintes internes et de déformations plastiques générés au cours de l'avancement a permis de comprendre les évolutions de la plasticité de transformation, avec l'avancement de la transformation et avec la contrainte appliquée. En particulier, nous avons montré

que l'essentiel de la déformation se produit dans et au voisinage de la couche qui se transforme. Afin d'expliquer les divergences entre la simulation et l'expérience, nous avons également affiné les lois de comportement mécaniques des phases. Si l'introduction d'une déformation supplémentaire de fluage pour chaque phase ne modifie que faiblement l'évolution de la plasticité de transformation, en revanche un effet très sensible des propriétés plastiques relatives des phases se manifeste. A cet égard, le modèle aléatoire semble plus prometteur pour la comparaison calcul-expérience, un calcul à mêmes propriétés mécaniques se rapprochant sensiblement de la linéarité dans ce cas.

Dans la deuxième partie de ce travail, nous avons traité le cas plus complexe d'une transformation martensitique. La déformation de transformation se compose en effet d'un changement de volume et d'un cisaillement, qui sont orientés par l'état de contrainte interne. Les deux mécanismes de plasticité de transformation sont ici opérants.

Nous avons effectué une analyse thermodynamique du comportement d'un volume biphasé austénite-martensite en cours d'évolution structurale. Les conditions d'évolution et les bilans d'équilibre obtenus relient entre elles les variations d'énergie mécaniques et chimiques produites au cours de l'avancement. Elles mettent également en évidence le rôle de l'état de contrainte interne comme paramètre contrôlant la progression de la transformation, par l'intermédiaire de l'énergie mécanique produite au passage du front de transformation. Cette énergie joue un rôle essentiel dans la formulation de critères qui gouvernent l'avancement de la transformation et son "anisotropie".

Les différents concepts nécessaires à la description micromécanique de la transformation ont ensuite été introduits dans un modèle de calcul aux éléments finis (déformation de transformation définie dans un repère local, critère d'avancement de la transformation basé sur un concept de travail maximum produit).

Dans une première étape, ce modèle a permis de décrire de façon schématique le comportement d'un matériau multigrain, dans une situation bidimensionnelle de contraintes planes. Nous avons considéré un comportement élastique des phases et une transformation ne mettant en jeu qu'un cisaillement, afin de décrire le comportement d'un matériau thermoélastique. Les résultats de ce modèle (ordre de transformation des éléments et orientation du repère local associé à chaque élément) mettent en exergue l'influence de l'état de contrainte local généré sur l'anisotropie de comportement. Ils donnent une première illustration des possibilités d'une telle approche.

La nécessité d'effectuer une description prenant en compte les caractéristiques plus fines de la transformation nous a ensuite conduit à l'analyse du comportement d'un grain, intégrant des aspects morphologiques spécifiques de cette échelle : avancement de la transformation par bandes successives d'éléments représentant les variants de martensite, nombre discret d'orientations du plan d'habitat (le

choix d'éléments triangulaires permet d'obtenir quatre orientations possibles dans le plan du modèle), morphologie des plaquettes liée aux interactions des variants avec le joint de grain (le variant a des extrémités affinées en raison des niveaux de contraintes élevés générés lorsqu'il termine sa croissance et interagit avec le joint de grain), mécanismes d'accommodation du cisaillement fini associé à la transformation (par déformation élastique et plastique). Le choix de conditions limites de périodicité permet de représenter d'emblée le comportement d'un ensemble de grains en interaction.

Les résultats obtenus décrivent l'influence de l'état de contrainte interne généré sur la sélection de l'orientation des variants et l'avancement de la transformation. Inversement, l'évolution morphologique donne lieu à des interactions mécaniques de diverse nature : entre variants, entre variants et matrice austénitique, entre variants et joint de grain, que nous avons quantifiées en terme de distribution de contraintes internes ou de déformations plastiques, auxquelles par ailleurs l'expérimentateur n'a pas accès.

Nous avons pu séparer la déformation macroscopique du grain en deux contributions : une déformation réversible due à l'orientation des variants de martensite et une déformation liée à l'accommodation plastique locale. Ce modèle rend ainsi compte des deux mécanismes de plasticité de transformation et en permet une évaluation directe.

Des développements sont nécessaires afin d'affiner la description de la transformation. D'une part, il est nécessaire d'étudier l'effet des paramètres inhérents à la discrétisation éléments finis : finesse du maillage qui conditionne la morphologie des variants de martensite, choix des conditions limites qui détermine les contraintes internes générées ainsi que les interactions des variants avec le joint de grain, caractère plan du modèle. D'autre part, une première comparaison à l'expérience a montré que notre modèle surestime largement la déformation totale par rapport à celle mesurée sur un échantillon en cours de transformation.

Nous pensons que ces écarts sont à rattacher d'une part à la non prise en compte dans le modèle de l'orientation propre à chaque grain et d'autre part à une description insuffisante des phénomènes d'autoaccommodation.

Ceci pourra nous amener à l'établissement d'un nouveau critère de transformation qui conduise à une minimisation de l'énergie mécanique d'accommodation des déformations de transformation.

ANNEXES

ANNEXE SUPERALLIAGES

ANNEXES TROISIEME PARTIE (CHAPITRE I)

ANNEXE 1 : Potentiel d'un mélange biphasé évolutif

ANNEXE 2 : Dérivée particulière d'une intégrale de volume

ANNEXE 3 : Relations cinématiques de compatibilité

ANNEXE 4 : Principe des puissances virtuelles pour un champ de vitesse
virtuel continu et différentiable par morceaux

ANNEXE 5 : Choix du potentiel thermodynamique et principes variationnels

ANNEXE 6 : Equation de l'énergie en présence d'une surface de discontinuité

ANNEXE SUPERALLIAGES

CALCUL PAR ELEMENTS FINIS DES CONTRAINTES INTERNES DANS UN SUPERALLIAGE MONOCRISTALLIN A BASE DE NICKEL

PRESENTATION

Les "superalliages" à base de Nickel constituent un sujet d'étude intéressant d'un point de vue scientifique car ils sont monocristallins et biphasés. Ils sont, en effet, constitués de deux phases (précipités γ' dans une matrice γ) qui restent en cohérence malgré l'existence d'un désaccord réticulaire, certes relativement faible ("misfit" de l'ordre de quelques ‰). D'un point de vue industriel, par ailleurs, ils présentent un grand intérêt du fait de leurs bonnes propriétés mécaniques à haute température qui en font de bons candidats pour la fabrication des parties tournantes des turboréacteurs en aéronautique.

Le sujet d'étude développé au Laboratoire concerne plus spécifiquement l'évolution structurale sans ou sous contrainte de ces alliages pour un domaine de hautes températures (1100-1300°C) dans lequel les traitements sous sollicitations thermiques ou thermomécaniques conduisent à des variations importantes et rapides de la microstructure. La partie expérimentale développée a permis de se faire une idée beaucoup plus précise des mécanismes d'évolution structurale dans ces matériaux et de leurs interactions avec un champ de contrainte extérieur, [39,40]. Les principaux résultats concernent d'une part la caractérisation des cinétiques et des morphologies de précipitation lors d'une évolution isotherme et anisotherme et, d'autre part, la caractérisation du comportement mécanique de ces alliages en cours de transformation. Il en ressort notamment que l'adjonction d'un champ de contrainte appliquée a un effet sur les évolutions morphologiques des précipités qui par ailleurs interagissent par l'intermédiaire de leurs champs de diffusion respectifs et des contraintes internes résultant du désaccord réticulaire entre les deux phases.

Il nous a donc paru intéressant d'utiliser nos acquis en matière de simulation micromécanique, dans le cas de ces alliages, le calcul aux éléments finis permettant d'obtenir des renseignements à une échelle locale (champs de déformations et de

contraintes internes aux différentes températures) auxquels l'expérimentateur n'a pas accès.

Nous nous plaçons dans une situation où la morphologie est figée (fraction volumique de précipités constante). Pour des raisons de temps de calcul essentiellement, nous nous sommes limités ici à une approche bidimensionnelle, en hypothèse de contraintes planes. Nous avons considéré des comportements mécaniques des phases de complexité croissante, i.e. isotrope élastique, anisotrope élastique et élastoplastique. Les calculs effectués lors d'une montée en température (de 25°C à 1050°C) prennent en compte les variations des données mécaniques ainsi que celles du "misfit" avec la température.

Les résultats obtenus par cette première approche sont présentés et discutés dans la publication qui suit. Ils semblent prometteurs, à la fois pour la prévision du comportement mécanique du biphasé et pour décrire l'influence des états de contrainte sur les évolutions morphologiques, même si la complexité des mécanismes présents, la difficulté d'obtenir des données mécaniques précises et le formalisme utilisé (mécanique des milieux continus) délimitent naturellement le type d'informations obtenues par cette démarche.

De plus, une première application de ces calculs a pu être menée. Nous avons estimé à partir des résultats du calcul, la contribution des distorsions élastiques à l'élargissement des pics de diffraction gamma, qui a été observé par P.BASTIE et D.BELLET pour les plans {022} du CMSX-2 entre 700°C et 1050°C. Ce phénomène a été attribué initialement à une distorsion tétragonale à haute température de la phase γ , sans que la nature de cette distorsion soit clairement établie. Nous avons évalué les distorsions locales des plans {022}, ainsi que {002}, en nous basant sur les états de déformations élastiques calculés sur chacun des éléments du maillage. A partir de cette distribution des distorsions angulaires, il a été possible de calculer les pics de diffraction de ces deux familles de plans. Les valeurs calculées des largeurs à mi-hauteur de ces pics sont en bon accord avec les valeurs mesurées. Ils permettent de conclure que les fortes contraintes internes résultant du désaccord réticulaire entre le précipité et la matrice sont à même d'expliquer à elles seules l'élargissement des profils de diffraction observés. Ces résultats font l'objet d'un article soumis pour publication dans Phil. Mag. Letters, [41].

FINITE ELEMENT CALCULATION OF INTERNAL MISMATCH STRESSES IN A SINGLE CRYSTAL NICKEL BASE SUPERALLOY

J.F. Ganghoffer, A. Hazotte, S. Denis and A. Simon
Laboratoire de Science et Génie des Matériaux Métalliques
Ecole des Mines, Parc de Saurupt 54042 NANCY Cedex - FRANCE

Introduction

As the volume fraction of γ coherent precipitates in single crystal nickel base superalloys continuously increased, the internal stresses resulting from the lattice mismatch between γ and γ' phases became of a major importance. Thus a good knowledge of the strain and stress distributions at the scale of the γ' precipitate seems to be necessary if one is interested in understanding the deformation mechanisms as well as the high temperature microstructure evolution in these alloys. Moreover it is likely that the high level of elastic energy stored by these materials is also partly responsible of some unusual phenomena such as negative creep or high temperature crystallographic changes (1-4).

The first attempts to take internal stresses into account have consisted in analytical calculations based on Eshelby type approaches. These works have proved to be powerful in describing -at least qualitatively- the microstructure changes occurring during high temperature thermal or thermomechanical treatments. However such an approach appears to be limited to the case of elastic strains and of simple precipitate shapes. Although numerical modelling is potentially able to overcome these limitations at this time only a few works have been initiated in order to simulate the γ - γ' structure behaviour using either pure finite element (F.E.) or coupled Monte Carlo-finite element (MCEF) methods (5-9). In this paper we present some preliminary remarks and first results concerning a finite element analysis of the internal stress distributions in a commercial single crystal nickel base superalloy.

Micromechanical Model and Input Data

FIG.1a shows the typical service microstructure of a high γ' volume fraction superalloy single crystal observed along one of the {001} crystallographic planes. If limiting to a 2D model such material structure can be roughly described as square precipitates periodically distributed in the matrix, as schematized in FIG.1b. In fact for symmetry reasons only one quarter of a precipitate with one half of the surrounding matrix channels needs to be considered. This unit cell has been discretized using the different finite element meshes illustrated in FIG.2 the periodicity being introduced by constraining the top and right boundaries of the mesh to remain plane while the two others can only deform along the axis (symmetry condition). The different mesh configurations of FIG.2 were tested in order to study the influence of the discretization size and of the shape of the precipitate corner. Most part of the calculations was performed under the plane stress assumption. It can be found in the literature that the use of a plane strain rather than plane stress model leads to about 1/3 higher stress levels (5-7) which will be effectively verified in one case in the present paper. It is usually considered that the actual stress values range inbetween these two limits. The mechanical behaviour of both γ and γ' phases was successively assumed to be isotropic & elastic, anisotropic & elastic and isotropic & elastoplastic. The different mechanical calculations presented were performed using the finite element code M.E.F. (10).

The physical and mechanical parameters required as input data were chosen to represent as well as possible those of a commercial single crystal nickel base superalloy called CMSX-2 (11), taken at 25°C or 1050°C. The γ' volume fraction was assumed to remain constant in this temperature range with an amount of 68% (12), which leads to a linear ratio of 88% in the mesh configurations of FIG.2. The lattice discrepancy between γ and γ' phases is generally quantified by the misfit parameter defined as $\delta = 2(a'-a)/(a'+a)$ where a and a' are the lattice parameters of γ and γ' respectively. In the case of CMSX-2, δ was measured to be equal to +0.14% at 25°C (12) and to -0.3% at 1050°C (13). The high temperature value can be considered as a "true" misfit measurement since the experimental method used involves a loss of coherency -at least partial- at the γ/γ' interface (14). On the contrary the technic used for the room temperature measurement gives the value of the in-situ "constrained" misfit which had to be corrected. We used the correction factor of 1.25 experimentally determined by

Grose and Ansell in the case of rather similar alloys (15) which results in $\delta(25^\circ\text{C})=+0.175\%$. The lattice mismatch was incorporated in the finite element model by arbitrary starting from a stress free state at 0°C , then applying a thermal variation up to 25°C or 1050°C while assigning an appropriate difference between the coefficients of thermal expansion of the two phases.

The elastic constants used for γ and γ' phases were also chosen from the experimental data of the literature. In the case of the isotropic assumption we chose to use the values of Young modulus and Poisson's ratio measured along the $\langle 001 \rangle$ direction since a large part of the published results are concerned with this orientation. FIG.3 collects the values of Young modulus in the $\langle 001 \rangle$ directions which were measured at different temperatures up to 1100°C in the case of pure Ni, pure Ni_3Al and single crystals of γ and γ' "model" alloys (7,9,16-21). It can be noted that the recent measurements of Gayda and McKay (8) seem to confirm that the relative stiffness of γ and γ' phases are inverted at very high temperature, as it was expected from the tendency detected at lower temperatures and from some theoretical approaches of the microstructure evolution (13,22). The 25°C and 1050°C Young modulus values for γ and γ' phases used in our calculations were obtained from least square linear extrapolations of the data of FIG.3. The choice was not so clear when concerned with the Poisson's ratios ν since the experimental results appeared to be very scattered (7,16-21). Thus ν was taken to be independent of the temperature and equal to 0.35 for both phases, which corresponds to an intermediate value in the range of measurements. When taking into account the elastic anisotropy of the single crystal a third parameter was required to describe the orientation dependence of the elastic behaviour of both phases. Unfortunately we found very few and scattered data concerning the pure γ and γ' phases. In the case of γ - γ' superalloys the anisotropy ratio E_{111}/E_{001} , where E_{111} and E_{001} are the Young modulus in $\langle 111 \rangle$ and $\langle 001 \rangle$ directions respectively, appears to be roughly independent on temperature at least to about 1000°C as illustrated in FIG. 4 (9,23-28). Thus we assumed that the anisotropy ratio was the same for the two phases and that it was equal to 2.4 at both 25°C and 1050°C . Converting these different assumptions in term of C_{ij} elastic constants leads to the input data given in TAB.1 which were used for the different types of calculations described in the following.

TABLE 1. Input Data Used for the Different Finite Element Calculations

Temperature	25°C		1050°C	
phase	γ	γ'	γ	γ'
C_{11} (GPa)	218.5	166.9	109.3	124.8
C_{12} (GPa)	117.4	89.7	58.7	67.1
C_{44} isotropic case (GPa)	50.5	38.6	25.3	28.85
- anisotropic case	143.4	109.5	71.7	81.9
misfit (%)	0.175		-0.3	

Results and discussion

Internal Stress Distribution at Room Temperature:

FIG.5 is a graphic representation of the stress distribution calculated in the case of the F.E. mesh of FIG.2a, assuming an isotropic elastic mechanical behaviour and using the room temperature material characteristics as input data. One usual way to estimate the magnitude of local stresses is to calculate the equivalent Von Mises stress σ_e which, under the plane stress assumption, is given by

$$\sigma_e = [\sigma_{xx}^2 + \sigma_{yy}^2 - \sigma_{xx}\sigma_{yy} + 3\sigma_{xy}^2]^{1/2}$$

where σ_{xx} , σ_{yy} and σ_{xy} are the non null elements of the stress tensor. Such an approach have been used in FIG.5 where lines of constant Von Mises stresses have been reported on the unit cell. As σ_e relates the 2-D stress state to an "equivalent" uniaxial tensile stress it does not give any information about neither the sign nor the direction of the actual stresses. Therefore we also reported in FIG.5 the variation of the two principal stresses of the tensor along three interesting axes of the cell : the mesh boundaries DA (or DC) and CB (or AB) and the diagonal of the square DB. As for symmetry reasons the principal directions of the stress tensor along these axis are parallel and perpendicular, the principal stresses have been noted $\sigma_{//}$ and σ_{\perp} respectively.

Three different zones can be roughly distinguished in the unit cell of FIG.5 : i) the matrix channels appear to be highly and rather homogeneously loaded in tension parallelly to the γ/γ' interface while the stresses perpendicular to the interface are almost null ; ii) the inner precipitate is mostly in compression but with relatively low stress levels ; iii) the

region around the precipitate corner presents a more complex stress state characterized by very high stress gradients, the precipitate tip being highly loaded while the center of the γ channel cross encounters only very low stresses. In term of equivalent Von Mises stresses this results in the presence of several localized maxima, noted σ_{emc} and σ_{emm} , and respectively situated around the γ/γ' interface at the precipitate corner and in the middle of the γ matrix channels. In the case described here σ_{emc} and σ_{emm} have been calculated to be equal to 289 MPa and 207 MPa respectively. As already indicated, a calculation in the same conditions apart assuming plane strain rather than plane stress led to similar shape of the iso- σ_e maps but to higher stress levels ($\sigma_{emc}=402$ MPa and $\sigma_{emm}=310$ MPa). When taking the difference of input data into account, these results are in agreement with those obtained by Glatzel and Feller-Kniepmeier with a similar approach, except that σ_{emm} maximum was found slightly higher than σ_{emc} in ref.(6,7). It can be noted that A. Ati also found an absolute maximum at the precipitate tip using an analytical approach (29). Nevertheless in this case the local stresses were at least one order of magnitude higher than ours.

Effect of Finite Element Mesh Geometry :

In order to determine the influence of the discretization on the calculated stresses the different mesh configurations of FIG.2a to d have been tested using the same input data as previously. As the highest stresses have been found in the matrix, variations in the element size were especially applied in the matrix channels. It appeared that increasing the mesh fineness (mesh geometries b->a->c) results in stress maps with very similar shapes and levels except in the vicinity of the γ/γ' interface where the thinning of the elements obviously leads to higher stress gradients. As a major consequence the sharp maximum σ_{emc} increases from 237 MPa (mesh b) to 314 MPa (mesh c) while σ_{emm} remains constant. With regard to these variations the effect of truncating the precipitate corner appeared to be much smaller since σ_{emc} changes from 289 MPa to 280 MPa when using the mesh of FIG.2d rather than the one of FIG.2a. Anyway it can be pointed out that the difference between internal stresses calculated with the various mesh configurations is smaller than those resulting from the choice between plane stress and plane strain assumption.

In the rest of this paper we will always work with the same mesh configuration -that of FIG.2a- since we are especially interested in determining the consequences of changing some material features on the relative distribution of internal stresses. However it is clear that such a dependence between the F.E. discretization used and the stress gradients calculated around the structural discontinuity -which is inherent to this type of approach- has to be taken into account as far as one is interested by "true" values of local stresses. For instance this can be the case when using such a finite element modelling to simulate microstructural changes under the action of internal stresses eventually assisted by an external applied load. In this type of applications it is obviously necessary to be very careful if using an evolution criterium based on the reduction of local internal stresses rather than on the minimization of the global energy.

High Temperature Stress Distribution :

FIG.6 presents the results of an other calculation when still assuming an isotropic elastic behaviour but using the 1050°C CMSX-2 properties as input data. It can be seen that the calculated iso- σ_e map is very similar in shape and level than those of FIG.5 ($\sigma_{emm}=185$ MPa ; $\sigma_{emc}=283$ MPa), the increase of misfit magnitude being counterbalanced by the decrease of the stiffness of both phases . However the change of the sign of the misfit leads to a 2-D stress state inverted with regard to those obtained at room temperature. At 1050°C the matrix channels are highly compressed parallelly to the γ/γ' interface while the precipitate mostly encounters low levels of tension.

At this stage it can be pointed out that the stress anisotropies which are locally observed -particularly in the matrix channels but also at lower levels in the precipitate- must correspond to elastic distortions at the scale of the crystal. These local distortions are likely to be partly responsible of the peak broadening which is observed when using high temperature neutron or γ ray diffraction technics (4). At this time works are in progress in order to quantify the part of this phenomena which could be attribute to the elastic strains due to the coherency accommodation.

Influence of the Elastic Anisotropy of the Material:

FIG.7 shows the changes in internal stresses obtained when taking into account the strong elastic anisotropy of these materials. The input data used for this last calculation can be considered as fitting as close as possible the physical and mechanical properties of CMSX-2 alloy at 1050°C. It is not allowed to directly compare FIG.6 and FIG.7 in term of absolute values since the "mean" Young modulus value in the anisotropic case is higher than those in the isotropic one (30). However it is possible to note that one consequence of the anisotropy assumption is to reinforce the stress levels especially along the square diagonal, which still leads to increase the $\sigma_{emc}/\sigma_{emm}$ ratio ($\sigma_{emm}=295$ MPa ; $\sigma_{emc}=376$ MPa). Moreover in the anisotropy case a region of minimum equivalent stresses is detected in the γ phase in the middle of each precipitate edge. It is interesting to point out that these areas of minimum elastic energy also correspond to those involved in the first times of the γ precipitate splitting, which is a well-known high temperature evolution mechanism of these materials (see for instance ref.(31) for a bibliographic and experimental study of this phenomenon). This observation suggests that the mechanical anisotropy of both γ and γ' phases can be a factor promoting the growing precipitate partition. This once more emphasizes the importance of taking as realistic material characteristics as possible when using this type of approach to simulate a structural evolution.

Plastic Relaxation of Internal Stresses

It can be noted that the level of the internal stresses calculated at 1050°C is of the same order of magnitude than the macroscopical flow stress of the material. Indeed the yield stress of CMSX-2 at this temperature was measured to be about 400MPa when using a strain rate $\dot{\epsilon}$ of about 10^{-2} s^{-1} (32) while the applied stress required to obtain a measurable strain rate during a creep test ($10^{-9} < \dot{\epsilon} < 10^{-7} \text{ s}^{-1}$) is about 100 MPa (12,13). Thus it can be reasonably considered that the γ matrix - which is the softer phase- is liable to locally relax the internal stresses resulting from the lattice mismatch. From the modelling point of view this can be easily simulated in our case by assuming an elasto-plastic mechanical behaviour for the γ phase. FIG. 8 gives some results of such a calculation when considering an arbitrary yield stress of 150 MPa for the matrix. In this figure we reported some lines of constant equivalent stress in the regions which were only elastically deformed while in the regions which encountered a plastic deformation we used lines of constant cumulated equivalent plastic strain ϵ_p which parameter is defined as

$$\epsilon_p = \int d\epsilon_p = \int [2/3 \cdot d\epsilon_{ij}^p \cdot d\epsilon_{ij}^p]^{1/2} \quad \text{where the } d\epsilon_{ij}^p \text{ are the components of the plastic strain increment tensor.}$$

As expected from the previous results the higher plastic strains are found in the center of the matrix channels and at the tip of the precipitate where they reach about $5 \cdot 10^{-3}$. As an effect of the matrix relaxation the regions in the precipitate near the plastic zones show a slight decrease of the elastic stresses. However although this last type of simulation can provide useful insight to the consequences of a plastic relaxation on the level of residual stresses, its application in determining the deformation kinetics still remains limited for at least two reasons. Firstly there is a tremendous lack of input data concerning the high temperature plastic behaviour of the individual γ and γ' phases. Secondly since the finite element analysis provides a continuum solution to the two phase deformation problem it does not take into account the fact that the plastic flow requires the activation of specific slip systems.

References

1. H. Rouault-Rogez, I.N.P.G. Thesis, Grenoble (France), 21 dec. 1990.
2. R. Timmins, G.W. Greenwood and B.F. Dyson, *Scripta Metall.* 20, 67 (1986).
3. R. Bonnet and A. Ati, *J. Microsc. Spectrosc. Electron.* 14, 169 (1989).
4. D. Bellet and P. Bastie, *Phil. Mag.*, to be published
5. T.M. Pollock and A.S. Argon, *proc. of the Int. Conf. "Superalloys 88"*, Seven-Springs (U.S.A.), sept. 1988, p.285.
6. U. Glatzel and M. Feller-Kniepmeier, *Scripta Metall.* 23, 1839 (1989).
7. U. Glatzel and M. Feller-Kniepmeier, *proc. of the 1st European Conf. on Advanced Materials and Processes "EUROMAT'89"*, Aachen (F.R.G.), nov. 22-24, 475 (1989).
8. J. Gayda and D.J. Srolovitz, *Acta Metall.* 37, 641 (1989).
9. J. Gayda and R. A. McKay, *Scripta Metall.* 23, 1835 (1989).
10. Computer code MEF/MOSAIC from FRAMASOFT+CSI Co, Compiègne (France)
11. K. Harris, G.L. Erickson and R.E. Schwer, *Proc. of the "TMS Fall Meeting"*, St Louis (U.S.A.), 27th oct. 1982.
12. P. Caron and T. Khan, *Mat. Sc. Eng.* 61, 173 (1983).
13. A. Fredholm, E.N.S.M.P. Thesis, Paris (France), 6 jan. 1987.
14. M.V. Nathal, R.A. McKay and R.G. Garlick, *Scripta Metall.* 22, 1421 (1988).
15. D.A. Grose and G.S. Ansell, *Met. Trans. A.* 12A, 1631 (1981).
16. J.F. Nye, *Physical properties of crystals*, p.145, Oxford Univ. Press, London (1957).
17. G.A. Alers, J.R. Neighbours and H. Sato, *J. Phys. Chem. Solids* 13, 40 (1960).
18. H. Pottebohm, G. Neite and E. Nembach, *Mat. Sc. Eng.* 60, 189 (1983).
19. K. Ono and R. Stern, *Trans. Met. Soc. AIME* 245, 171 (1969).
20. R. W. Dickson, J.B. Wachtman Jr and S.M. Copley, *J. Appl. Phys.* 40, 2276 (1969).
21. F.X. Kayser and C. Stassis, *Phys. Status Solidi A* 64, 335 (1981).
22. A. Pineau, *Acta Metall.* 24, 559 (1976).
23. S.W. Yang, *Met. Trans. A* 16A, 661 (1985).
24. T.P. Gabb, J. Gayda and R.V. Miner, *Met. Trans.* 175, 497 (1986).
25. E. Bachelet and G. Lamanthe, *Solidification des Alliages*, Les Editions de Physique, Paris (1986).
26. H.A. Kuhn, U. Bayerlein and H.G. Sockel, *proc. of the 1st European Conf. on Advanced Materials and Processes "EUROMAT'89"*, Aachen (F.R.G.), nov. 22-24, 483 (1989).
27. D.P. Dandekar and A.G. Martin, *J. Mat. Sc. Letters* 8, 1172 (1989)
28. D.P. Dandekar and A.G. Martin, *J. Mat. Sc.* 25, 3321 (1990)
29. A. Ati, I.N.P.G. Thesis, Grenoble (France), 30 mai 1984.
30. N. Fribourg-Blanc, M. Dupeux, G. Guenin and R. Bonnet, *J. Appli. Cryst.* 12,151 (1979)
31. T. Grosdidier, I.N.P.L. Thesis, Nancy (France), to be published (1991)
32. A. Hazotte and A. Simon, *Proc. of the 1st ASM Europe Technical Conference "Advanced Techniques and Processing for Structural Applications"*, Paris (France), sept. 7-9, 83 (1987)

FIG.1 : a) Typical microstructure of a single crystal Nickel base superalloy observed along a $\{100\}$ crystallographic plane
 b) Schematic representation of such a 2-D structure with the unit cell involved in the finite element modelling (shaded square)

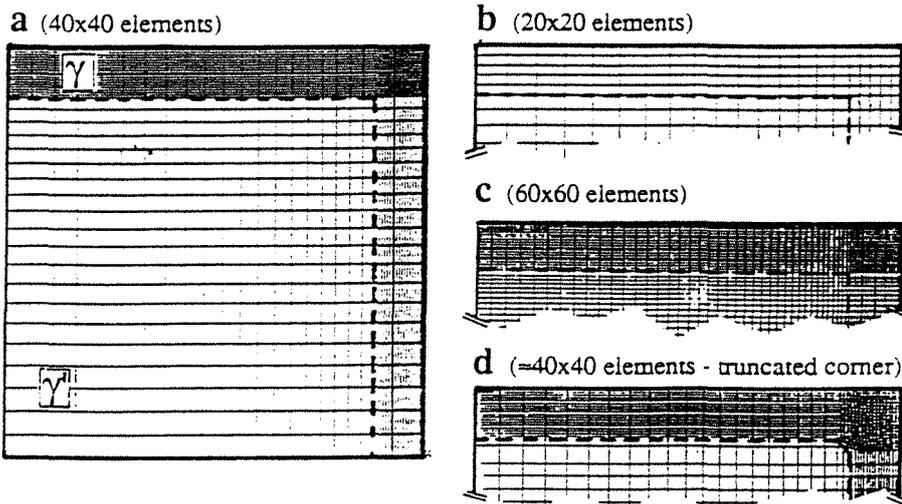
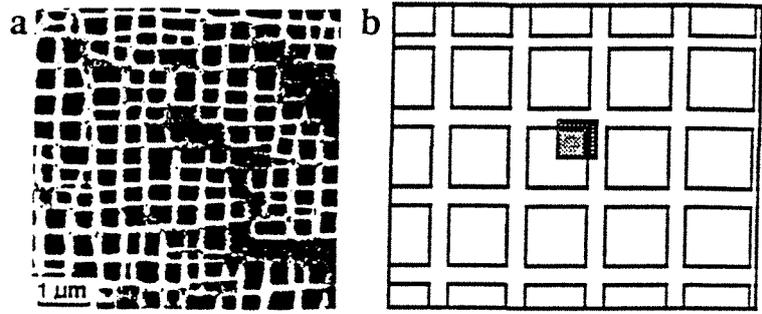


FIG.2 : The four different mesh configurations tested in the present study

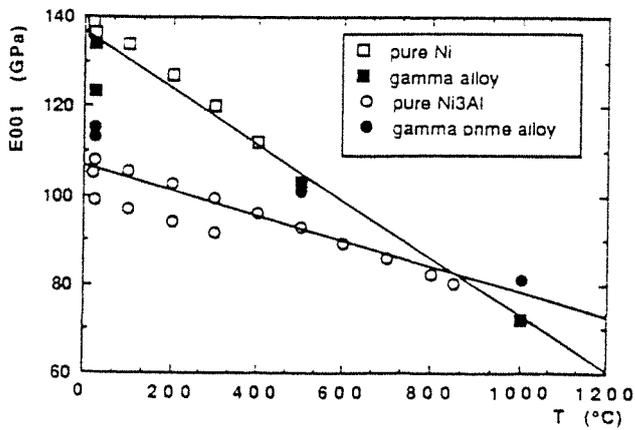


FIG.3 : Temperature dependence of $\langle 001 \rangle$ Young modulus E_{001} of pure Ni, pure Ni_3Al , γ and $\gamma-\gamma$ model alloy single crystals (from ref. 7,9,16-21)

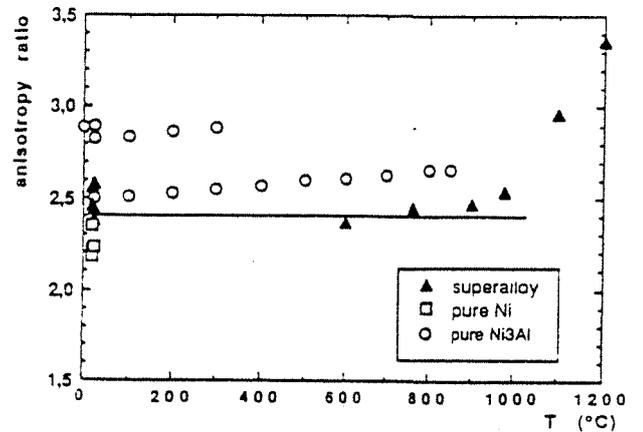


FIG.4 : Temperature dependence of the anisotropy ratio E_{111}/E_{001} in the case of pure Ni, pure Ni_3Al and $\gamma-\gamma$ alloy single crystals (from ref.9, 23-28)

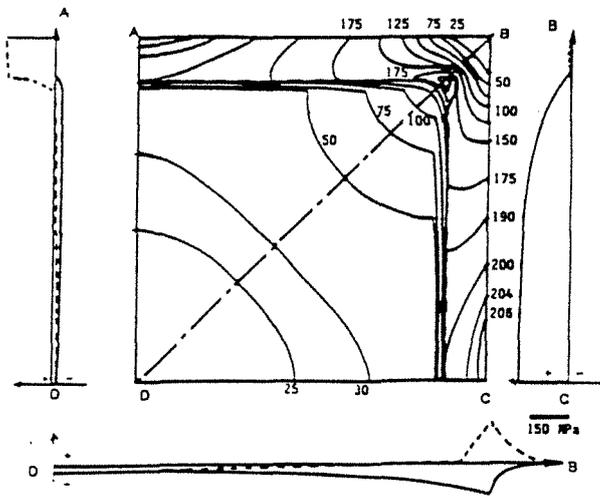


FIG. 5 : Stress distribution calculated with the FIG.2a mesh configuration, using an isotropic elastic behaviour for both γ and γ' phases and taking the room temperature properties of CMSX-2 as input data. Lines of constant equivalent Von Mises stress are indicated in MPa (central scheme) together with the evolution of the principal stresses $\sigma_{//}$ (full line) and σ_{\perp} (dashed line) along the DA, CB and DB axes (the directions of $\sigma_{//}$ and σ_{\perp} are respectively parallel and perpendicular to these axes)

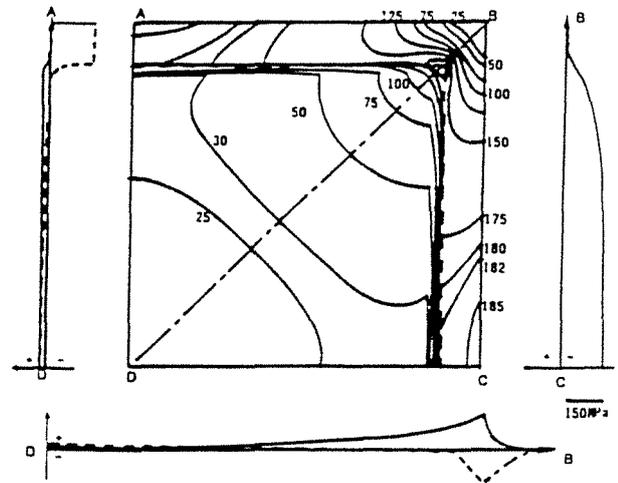


FIG. 6 : Same representation as in FIG.5 but in the case of a calculation using the 1050°C material properties

FIG. 7 : Equivalent Von Mises stress distribution at 1050°C when assuming an anisotropic elastic behaviour for both γ and γ' phases

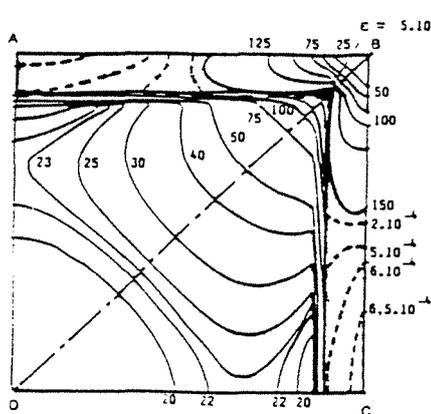
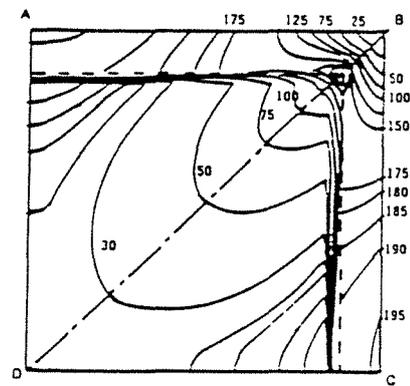


FIG. 8 : Case of an elasto-plastic behaviour of the matrix at 1050°C (yield stress = 150 MPa) ; lines of constant cumulated equivalent strain are indicated in the plastically deformed regions (shaded zone) while lines of constant equivalent Von Mises stress are reported elsewhere

ANNEXE 1

POTENTIEL D'UN MELANGE BIPHASE EVOLUTIF

On cherchera à exprimer le potentiel thermodynamique (différents choix seront effectués) d'un mélange biphasé en cours d'évolution structurale, et l'on mettra en évidence un potentiel d'interaction interphases. Le comportement des phases reste élastique. Des conditions de stabilité imposées par le deuxième principe (inégalité de Clausius-Duhem), on déduira des lois d'état où apparaissent des variables supplémentaires spécifiques du comportement à l'interface, s'exprimant naturellement dans le cadre des lois de normalité à partir du potentiel d'interaction.

I. POTENTIEL D'INTERACTION INTERPHASE

On désigne par G le potentiel du mélange et par G_A, G_M les potentiels des volumes de phase austénitique et martensitique respectivement (la particularisation à un potentiel approprié - Gibbs ou Helmholtz - sera effectuée plus loin).

On réécrit la dérivée particulière de la quantité $G = \int_{\Omega_A} U_{\Omega_M} g \, d\Omega$:

$$\frac{dG}{dt} = \int_{\Omega_A} \frac{dg^A}{dt} \, d\Omega + \int_{\Omega_M} \frac{dg^M}{dt} \, d\Omega + \int_{\Sigma} \Delta g \, V_n \, dA \quad (\Sigma \text{ désigne le front de transformation}).$$

On désigne par $x(t)$ la cinétique (taux de martensite formée), que l'on fait apparaître

$$\frac{dG}{dt} = \frac{dG}{dx} \frac{dx}{dt} = \int_{\Omega_A} \frac{dg^A}{dx} \frac{dx}{dt} \, d\Omega + \int_{\Omega_M} \frac{dg^M}{dx} \frac{dx}{dt} \, d\Omega + \int_{\Sigma} \Delta g \, V_n \, dA.$$

x est une variable "globale" (indépendante du point considéré), et on peut donc écrire

$$\frac{dG}{dx} = \int_{\Omega_A} \frac{dg^A}{dx} \, d\Omega + \int_{\Omega_M} \frac{dg^M}{dx} \, d\Omega + \int_{\Sigma} \Delta g \, \frac{V_n}{x} \, dA \text{ que l'on intègre de } x = 0 \text{ à } x_0 :$$

$$\int_0^{x_0} \frac{dG}{dx} \, dx = G(x_0) - G(x=0) = G(x_0) - G_A^0 \text{ où } G_A^0 \text{ désigne le potentiel du volume}$$

initial d'austénite, soit

$$G(x_0) - G_A^0 = \int_0^{x_0} \int_{\Omega_A} \frac{dg^A}{dx} \, d\Omega + \int_0^{x_0} \int_{\Omega_M} \frac{dg^M}{dx} \, d\Omega + \int_0^{x_0} dx \int_{\Sigma_x} \Delta g \, \frac{V_n}{x} \, dA$$

où Σ_x désigne le front de transformation associé au taux x .

On peut permuter les intégrations et faire apparaître G_A^0 dans le membre de droite :

$$G(x_0) - G_A^0 = \int_{\Omega_A} \int_0^{x_0} \frac{dg^A}{dx} \, d\Omega + \int_{\Omega_M} \int_0^{x_0} \frac{dg^M}{dx} \, d\Omega + \int_0^{x_0} dx \int_{\Sigma_x} \Delta g \, \frac{V_n}{x} \, dA, \text{ soit}$$

$$G(x_0) - G_A^0 = \int_{\Omega_A} [g^A(x_0) - g^A(0)] \, d\Omega + \int_{\Omega_M} g^M(x_0) \, d\Omega + \int_0^{x_0} \int_{\Sigma_x} \Delta g \, \frac{V_n}{x} \, dA dx, \text{ d'où}$$

$$G(x_0) = G_A + G_M + \int_0^{x_0} dx \int_{\Sigma_x} \Delta g \frac{V_n}{\dot{x}} dA$$

On décompose ainsi le potentiel du mélange en la somme des potentiels de chacune des phases, additionné d'un terme qui représente le potentiel d'interaction entre les deux phases et qui trouve son origine à l'interface. Notons ψ l'expression obtenue pour le potentiel d'interaction.

On notera que, même dans le cas de comportement élastique des phases et où la transformation est supposée réversible, un effet d'histoire se manifeste par le biais de la cinétique $x(t)$.

II. CAS DE DEUX PHASES EN INTERACTION ISOTHERME - APPROCHE THERMO-DYNAMIQUE MACROSCOPIQUE

D'après les considérations précédentes sur le choix des potentiels, on considère l'énergie libre de Helmholtz de densité f égale à la densité d'énergie élastique stockée.

La discontinuité de f à l'interface est $\Delta f = \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\varepsilon}}^{tr,1} + \Delta\mu = \sigma_n \varepsilon_o + \tau \gamma_o + \Delta\mu$, où le terme $\Delta\mu = \mu_m - \mu_a$ représente la différence de potentiel chimique entre les deux phases, d'où

$$\psi = \int_0^{x_0} dx \int_{\Sigma_x} (\sigma_{ij} \varepsilon_{ij}^{tr,1}) \frac{V_n}{\dot{x}} dA + \Delta\mu \Omega_M, \text{ compte tenu de la relation}$$

$$\dot{x} = 1/\Omega \int_{\Sigma_x} V_n dA. \text{ On note que } \psi(x=0) = 0.$$

On peut écrire, de façon approchée, $dx = \frac{dV_M}{\Omega} = \frac{S_x}{\Omega} dr_n$, où S_x est la mesure de l'aire

interfaciale, d'où $\psi(x_0) = \Omega \int_0^{x_0} dx \int_{\Sigma_x} \sigma_{ij} \varepsilon_{ij}^{tr,1} \frac{dA_x}{S_x} + \Delta\mu \Omega$ soit $\varphi = \frac{\psi}{\Omega} = \int_0^{x_0} \frac{dx}{S_x}$

$\int_{\Sigma_x} \sigma_{ij} \varepsilon_{ij}^{tr,1} dA_x + \Delta\mu$ et le premier terme du second membre apparaît comme une

double intégration, la première sur le front de transformation associé à un taux x donné et qui définit le travail moyen produit à l'interface, soit $\overline{\sigma_{ij} \varepsilon_{ij}^{tr,1}} = \frac{1}{S_x} \int_{\Sigma_x} \sigma_{ij} \varepsilon_{ij}^{tr,1} dA_x$,

la deuxième intégrale sur la cinétique faisant apparaître l'effet d'histoire de la transformation. ψ est fonction de la déformation de transformation $\underline{\underline{\varepsilon}}^{tr}$ du mélange et de la température T .

Par souci de simplification, nous allons considérer une géométrie sphérique des phases : soit un coeur de phase fille en croissance dans une gaine d'austénite (fig. 1). Entre les instants t et $t + dt$, la région comprise entre les rayons r et $r + dr$ se transforme et

$dx = 3r^2 \frac{dr}{R^3}$ (on néglige les variations de R dues à la déformation de transformation d'une part, et aux mécanismes d'accommodation d'autre part).

Le terme $\frac{V_n}{\dot{x}}$ se laisse facilement exprimer :

$\frac{V_n}{\dot{x}} = \frac{dr/dt}{dx/dt} = \frac{dr}{dx} = \frac{R^3}{3r^2}$ et l'on note que r est fonction univoque de x compte tenu de la géométrie de la croissance.

On exprime alors $\frac{d\Psi}{dx} = \frac{4}{3} \pi R^3 \sigma_{ij} \varepsilon_{ij}^{tr,1} \Delta\mu \Omega$, soit en introduisant le potentiel

d'interaction volumique

$$\varphi = \frac{\Psi}{\frac{4}{3} \pi R^3} \quad : \quad \frac{d\varphi}{dx} = \sigma_{ij} \varepsilon_{ij}^{tr,1} \Delta\mu \Omega, \text{ qui représente donc le travail mécanique effectué}$$

à l'interface (plus exactement sa densité surfacique) ainsi que le changement de structure produit.

Une approche plus macroscopique consiste alors à considérer le potentiel spécifique du mélange f dans lequel la déformation de transformation $\underline{\underline{\varepsilon}}^{tr}$ joue le rôle d'une variable interne :

$f = f(\underline{\underline{\varepsilon}}^e, T, \underline{\underline{\varepsilon}}^{tr})$ que l'on peut décomposer suivant le développement du paragraphe I en

$f(\underline{\underline{\varepsilon}}^e, T, \underline{\underline{\varepsilon}}^{tr}) = f^A(\underline{\underline{\varepsilon}}^e, T) + f^M(\underline{\underline{\varepsilon}}^e, T) + \varphi(\underline{\underline{\varepsilon}}^{tr}, T)$, où la variable interne $\underline{\underline{\varepsilon}}^{tr}$ n'intervient que dans le potentiel φ . On peut alors reformuler l'inégalité de Clausius-Duhem suivant :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial \underline{\underline{\varepsilon}}^e} - \underline{\underline{\sigma}} \right) : \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}^e} - \left(\frac{\partial f}{\partial T} - s \right) \dot{T} + \frac{\partial f}{\partial \underline{\underline{\varepsilon}}^{tr}} : \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}^{tr}} - \frac{q}{T} \nabla T \geq 0.$$

On en déduit la loi de comportement élastique $\underline{\underline{\sigma}} = \frac{\partial f}{\partial \underline{\underline{\varepsilon}}^e}$, ainsi que la condition d'évolution

$$\frac{\partial f}{\partial \underline{\underline{\varepsilon}}^{tr}} : \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}^{tr}} \geq 0, \text{ soit encore}$$

$$\boxed{\frac{\partial \varphi}{\partial \underline{\underline{\varepsilon}}^{tr}} : \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}^{tr}} \geq 0}$$

qui exprime le caractère positif du travail produit à l'interface.

On peut alors, de la même manière qu'en plasticité, définir un potentiel $\varphi^*(\underline{\underline{\sigma}}, T)$ dual de $\varphi(\underline{\underline{\varepsilon}}^{tr}, T)$, qui est sa transformée de Legendre, [31]. La loi d'évolution complémentaire s'écrit alors

$$\boxed{\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}^{tr}} = \frac{\partial \varphi^*}{\partial \underline{\underline{\sigma}}}}$$

avec $\varphi^*(\underline{\underline{\sigma}}) = \sup_{\underline{\underline{\varepsilon}}^{tr}} (\underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\varepsilon}}^{tr} - \varphi(\underline{\underline{\varepsilon}}^{tr}))$ dans le cas isotherme considéré.

Si l'on est capable d'exprimer le potentiel φ^* (pour cela, il faut connaître la géométrie du front de transformation ainsi que les variables thermodynamiques qui s'y attachent), on peut alors en déduire l'évolution de la déformation de transformation dans un modèle macroscopique. Cela suppose donc que l'on soit capable d'ouvrir la boîte noire que représente le point matériel et de connaître l'évolution locale de la microstructure. La loi de comportement ainsi obtenue peut être utilisée ensuite dans un modèle macroscopique. Dans le cas de la représentation en variables température-contrainte, on considère le potentiel énergie libre de Gibbs dont la densité est l'opposée du potentiel complémentaire $W_c(\underline{\underline{\sigma}})$. Dans l'hypothèse retenue jusqu'à présent où aucune variation de contraintes n'a lieu lors du chemin de transformation imaginé au passage du front en un point donné,

$$\Delta (W_c) = 0.$$

Par conséquent, le potentiel d'interaction interphase est nul, d'où l'on déduit l'additivité du potentiel de Gibbs du mélange par rapport à chacune des phases considérées isolément, ce qu'énonce également Giusti dans le cas des aciers et qui le justifie par l'absence de diffusion du carbone [39].

ANNEXE 2

DERIVEE PARTICULAIRE D'UNE INTEGRALE DE VOLUME

Soit $I = \int_{\Omega_t} b(\underline{x}, t) d\Omega_t$ où la grandeur b est définie en fonction des positions géométriques dans la configuration actuelle, et du temps. Il faut donc dériver par rapport au temps en suivant la particule. Une méthode possible consiste à se ramener en représentation Lagrangienne, puis à repasser en représentation Eulérienne pour l'obtention du résultat.

On ramène l'intégration I sur le volume Ω_0 occupé par les particules dans la configuration de référence : si $\underline{x} = \phi(\underline{X}, t)$, et $J(\underline{X}, t) = \text{jacobien de la transformation } \phi$

$$I = \int_{\Omega_0} b(\cdot, t) \circ \phi(\underline{X}, t) J(\underline{X}, t) d\Omega_0 = \int_{\Omega_0} B_0(\underline{X}, t) d\Omega_0$$

qui est maintenant une intégrale d'une grandeur $B_0(\underline{X}, t)$ définie sur la configuration de référence. On peut alors dériver sous le signe d'intégration, d'où en posant $B_0(\underline{X}, t) = B(\underline{X}, t) J(\underline{X}, t)$:

$$\frac{dI}{dt} = \int_{\Omega_0} \frac{\partial B}{\partial t} J d\Omega_0 + \int_{\Omega_0} B \frac{\partial J}{\partial t} d\Omega_0$$

Or, $JJ^{-1} = \text{div } \underline{U}(\underline{x}, t)$ où $\underline{U}(\underline{x}, t)$ est le champ de vitesses de la matière dans la configuration actuelle.

De plus, $\frac{db}{dt} = \frac{\partial b}{\partial t} + \text{grad } b \underline{U}(\underline{x}, t)$

On peut alors transcrire l'expression précédente de I en représentation Eulérienne, soit :

$$\frac{dI}{dt} = \int_{\Omega_t} \left(\frac{db}{dt} + b \text{div } \underline{U} \right) d\Omega_t$$

On note que cette relation est vraie quel que soit l'ordre de la grandeur b (scalaire, vectoriel ou ten-soriel). En particulier, si b est une grandeur scalaire, $\text{div}(b \underline{U}) = \text{grad } b$

$\underline{U} + b \text{div } \underline{U}$, ce qui permet d'écrire : $\frac{dI}{dt} = \int_{\Omega_t} \left(\frac{\partial b}{\partial t} + \text{div } b \underline{U} \right) d\Omega_t$, qu'on peut encore transformer en

$$\frac{dI}{dt} = \int_{\Omega_t} \frac{\partial b}{\partial t} d\Omega_t + \int_{\partial\Omega_t} b \underline{U} d\Delta$$

par utilisation du théorème de la divergence.

ANNEXE 3

RELATIONS CINEMATIQUES DE COMPATIBILITE

Soit $I = \int_{\Omega_{ot}} B(\underline{X}, t) d\Omega_{ot}$ l'intégrale sur un volume Ω_{ot} de la grandeur B définie dans la configuration de référence.

L'intégrale I s'écrit en représentation Lagrangienne sous la forme

$I = \int_{\Omega_{ot}^1} B(\underline{X}, t) d\Omega_{ot}^1 + \int_{\Omega_{ot}^2} B(\underline{X}, t) d\Omega_{ot}^2$, où le volume total Ω_0 est la réunion des deux sous volumes Ω_{ot}^1 et Ω_{ot}^2 , séparés par la surface de discontinuité Σ_{ot} (figure I.3).

La dérivée de I par rapport au temps s'exprime alors suivant :

$$\frac{dI}{dt} = \int_{\Omega_{ot}^1} \frac{\partial B}{\partial t} d\Omega_0 + \int_{\Omega_{ot}^2} \frac{\partial B}{\partial t} d\Omega_0 + \int_{\Sigma_{ot}} \Delta B \underline{v}_0 d\Sigma_{ot}, \text{ où } \Delta B \text{ est le saut de } B, \text{ soit } \Delta B = B_1 - B_2.$$

Soit Σ_0 la position de la surface de discontinuité à l'instant de référence $t = 0$, dans la configuration de référence et δ l'homéomorphisme qui exprime le transport géométrique de Σ_0 sur Σ_t : $\underline{x} = \delta(\underline{X}_0, t)$.

La vitesse de l'interface s'exprime par $\underline{W}(\underline{x}, t) = \frac{\partial \delta}{\partial t}(\underline{X}_0, t)$, $\forall M_0$ sur Σ_0 .

Soit ϕ l'homéomorphisme qui fait correspondre \underline{X}_{ot} et \underline{x} : $\underline{x} = \phi(\underline{X}_{ot}, t) = \delta(\underline{X}_0, t)$.

La surface Σ_{ot} évolue dans la configuration de référence avec la vitesse $\underline{V}(\underline{X}_{ot}, t) = \frac{\partial \underline{X}_{ot}}{\partial t}(\underline{X}_0, t)$ et $\underline{V}(\underline{X}_{ot}, t) = V_n(\underline{X}_{ot}, t) \underline{N}_{ot}$.

La vitesse de la surface de discontinuité par rapport à la matière dans l'état actuel est

$$\begin{aligned} \underline{V}(\underline{X}, t) &= \underline{W}(\underline{x}, t) - \underline{U}(\underline{x}, t), \text{ avec} \\ \underline{U}(\underline{x}, t) &= \frac{\partial \phi}{\partial t}(\underline{X}_{ot}, t) \quad \text{et} \\ \underline{W}(\underline{x}, t) &= \underline{\nabla} \phi(\underline{X}_{ot}, t) \frac{\partial \underline{X}_{ot}}{\partial t}(\underline{X}_0, t). \end{aligned}$$

Par la formule de transport d'une surface, on obtient par ailleurs :

$J(\underline{X}_{ot}, t) \underline{V}(\underline{X}_{ot}, t) dA_t = \underline{V}(\underline{x}, t) dA_t$, où dA_t est l'élément d'aire sur Σ_{ot} .

On écrit cette relation de part et d'autre de Σ_{ot} (J et \underline{V} sont discontinus au passage de Σ_{ot})

$$\begin{aligned} J_1 \underline{V} dA_t &= (\underline{W} - \underline{U}_1) dA \\ J_2 \underline{V} dA_t &= (\underline{W} - \underline{U}_2) dA \end{aligned}$$

ϕ étant continue, les discontinuités de ses dérivées sur Σ_{ot} ne sont pas indépendantes : lorsqu'on suit Σ_{ot} dans son mouvement dans la configuration de référence, pour $\underline{N}_{ot} d\underline{X}$

$= V_n dt, \left[\frac{d\phi}{dt} \right] = 0$ assurant que le point géométrique de vecteur position ($\underline{X}_{ot} + d\underline{X}$) se trouve sur $\Sigma_{o,t+dt}$.

soit $\underline{\nabla}\phi(\underline{X}_{ot},t) \frac{d\underline{X}}{dt} + \left[\frac{\partial\phi}{\partial t}(\underline{X}_{ot},t) \right] = 0$, d'où la relation :

- $V \underline{\nabla}\phi(\underline{X}_{ot},t) \underline{N}_{ot} = \Delta U$ soit, si $\underline{F} = \underline{\nabla}\phi$ est le gradient de ϕ :

$$\Delta \dot{\underline{X}} = - V_n \Delta(\underline{F} \underline{N}_{ot})$$

Cette relation cinématique de compatibilité porte encore le nom de relation d'Hadamard (Truesdell et Toupin, 1960, [7]).

PRINCIPE DES PUISSANCES VIRTUELLES POUR UN CHAMP DE VITESSE
VIRTUEL CONTINU ET DIFFERENTIABLE PAR MORCEAUX

Nous allons utiliser le principe des puissances virtuelles pour obtenir une condition de conservation de la quantité de mouvement à l'interface.

Le principe des puissances virtuelles correspond à une approche variationnelle en mécanique où le champ des vitesses virtuelles peut être choisi de manière très générale (il peut ne pas satisfaire les conditions cinématiques auxquelles est soumis le champ réel (cf. Germain, [8], Tome II). Malgré son caractère abstrait, ce mode de représentation fonctionnel des vitesses et des efforts a une signification physique profonde, le choix des espaces virtuels permettant d'appréhender la réalité avec une description plus ou moins fine des phénomènes.

Il s'énonce : la puissance virtuelle des quantités d'accélération est la somme des puissances virtuelles des efforts extérieurs et des efforts intérieurs (ce qui traduit encore l'axiome d'équilibre dynamique), soit avec des notations évidentes :

$$P_{(a)} = P_{(e)} + P_{(i)}$$

La densité volumique de la puissance virtuelle des efforts intérieurs s'écrit :

$P_i(\hat{\underline{u}}) = - \underline{\underline{T}} : \underline{\underline{F}}$, où $\hat{\underline{u}}$ est le champ de vitesses virtuel discontinu au passage de Σ et

$\underline{\underline{F}}(\underline{x}) = \underline{\underline{1}} + \underline{\underline{\text{grad}}} \hat{\underline{u}}(\underline{x})$ est le tenseur gradient de la déformation. $\underline{\underline{T}}$ est le tenseur des contraintes, variable intensive associée à $\underline{\underline{F}}$.

On considère le volume Ω , incluant la surface de discontinuité Σ que l'on suit dans son mouvement. Les notations sont celles de la figure 3.

La densité surfacique de puissance des efforts sur la surface de discontinuité s'écrit

$$\underline{\underline{T}}(\underline{x}) \underline{\underline{N}}(\underline{x}) \hat{\underline{u}}(\underline{x}), \text{ d'où } P_{(i)} = \int_{\Omega_1 \cup \Omega_2} - (\underline{\underline{T}} : \underline{\underline{F}}) d\Omega + \int_{\Sigma} (\underline{\underline{T}}_1 \underline{\underline{N}}_1 \hat{\underline{u}}_1 + \underline{\underline{T}}_2 \underline{\underline{N}}_2 \hat{\underline{u}}_2) dA.$$

La puissance virtuelle des quantités d'accélération qui s'écrit dans le cas général

$P_{(a)} = \int_{\Omega} \rho \underline{\underline{\gamma}}(\underline{x}) \hat{\underline{u}}(\underline{x}) d\Omega$ apparaît comme la dérivée particulière d'une intégrale de

volume définie par une densité massique $\underline{\underline{U}}(\underline{x}) \hat{\underline{u}}(\underline{x})$, où le champ virtuel $\hat{\underline{u}}$ n'a pas à être

dérivé $\left(\frac{d}{dt} \hat{\underline{u}}(\underline{x}) = 0 \right)$ et $P_{(a)} = \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho(\underline{x}, t) \underline{\underline{U}}(\underline{x}, t) \hat{\underline{u}}(\underline{x}, t) d\Omega$

En utilisant le théorème du transport de Reynolds (méthode du bilan) démontré précédemment dans le cas d'un volume contenant une surface de discontinuité, on obtient

$$P_{(a)} = \int_{\Omega} \rho \underline{\underline{\gamma}} \hat{\underline{u}} d\Omega + \int_{\Sigma} \Delta \rho (\underline{\underline{U}} - \underline{\underline{w}}) \underline{\underline{N}} \underline{\underline{U}} \hat{\underline{u}} dA$$

où la dépendance en \underline{x} et t des variables qui figurent sous les signes d'intégration n'a pas été spécifiée.

On utilise ensuite la condition de continuité de la masse à travers l'interface : $\Delta m = 0$ où m désigne le débit massique :

$m = \rho (\underline{\underline{U}} - \underline{\underline{w}}) \underline{\underline{N}}$, ce qui donne l'expression de $P_{(a)}$ suivante :

$$P_{(a)} = \int_{\Omega} \rho \underline{\underline{\gamma}} \hat{\underline{u}} d\Omega + \int_{\Sigma} m \Delta \underline{\underline{U}} \hat{\underline{u}} dA$$

Notons $\underline{\underline{t}}(\underline{x}, \underline{\underline{N}}(\underline{x})) = \underline{\underline{T}} \underline{\underline{N}}$ le vecteur contrainte; la puissance des efforts extérieurs

$P_{(e)} = \int_{\partial\Omega} \underline{t}(\underline{x}, \underline{N}(\underline{x})) \hat{\underline{U}}(\underline{x}) dA$ ne subit aucun changement par rapport au cas continu, ce

qui permet d'expliciter la relation $P_{(a)} = P_{(e)} + P_{(i)}$:

$\int_{\Omega} \rho \gamma \hat{\underline{U}} d\Omega + \int_{\Sigma} m \Delta \underline{U} \hat{\underline{U}} dA = \int_{\partial\Omega} \underline{t} \hat{\underline{U}} dA + \int_{\Omega} (\underline{T} : \underline{F}) d\Omega + \int_{\Sigma} (\underline{T}_1 \underline{N}_1 \hat{\underline{U}}_1 + \underline{T}_2 \underline{N}_2 \hat{\underline{U}}_2) dA$, d'où en regroupant les termes de volume et ceux de surface séparément, et par application du théorème de la divergence : $-\underline{T} : \underline{F} = -\underline{T} : \underline{\text{grad}} \underline{U} = (\text{div } \underline{T}) \underline{U} - \text{div} (\underline{T} \underline{U})$, on obtient

$\int_{\Omega} (\underline{T} : \underline{F}) d\Omega = \int_{\Omega} -\text{div } \underline{T} \hat{\underline{U}} d\Omega - \int_{\partial\Omega} \underline{T} \underline{N} \hat{\underline{U}} dA$, d'où en reportant dans le bilan précédant :

$\int_{\Omega} (-\rho\gamma + \text{div } \underline{T}) \hat{\underline{U}} d\Omega + \int_{\partial\Omega} (\underline{t} - \underline{T} \underline{N}) \hat{\underline{U}} dA + \int_{\Sigma} (-m \Delta \underline{U} \hat{\underline{U}} + \underline{T}_1 \underline{N}_1 \hat{\underline{U}}_1 + \underline{T}_2 \underline{N}_2 \hat{\underline{U}}_2) dA = 0$

En supposant le champ de vitesses virtuel continu sur Σ et nul sur Ω et $\partial\Omega$, la dernière

contribution s'écrit : $\int_{\Sigma} (-m \Delta \underline{U} + \underline{T}_1 \underline{N}_1 + \underline{T}_2 \underline{N}_2) \hat{\underline{U}} dA = 0$.

Le volume Ω étant arbitraire, on peut alors appliquer le théorème de l'intégrale nulle, d'où il résulte :

$$-m \Delta \underline{U} + (\underline{T}_1 \underline{N}_1 + \underline{T}_2 \underline{N}_2) = 0$$

Or, $\underline{N}_1 + \underline{N}_2 = 0$ et on définit la normale \underline{N} dans la direction de propagation de Σ par $\underline{N} = \underline{N}_1 = -\underline{N}_2$ d'où (cf. figure 3) $m \Delta \underline{U} = \Delta \underline{T} \underline{N} = \Delta \underline{t}(\underline{N})$.

On décompose le champ de vitesses \underline{U} en la somme des vitesses \underline{w} de l'interface et \underline{v} vitesse relative de la matière par rapport à l'interface, $\underline{U} = \underline{v} + \underline{w}$, et on réécrit l'équation obtenue sous la forme :

$m \Delta(\underline{v} + \underline{w}) = \Delta \underline{t} \underline{N}$, soit, puisque \underline{w} est continu (par définition)

$$m \Delta \underline{v} = \Delta \underline{t} \underline{N}$$

qui exprime la conservation de la quantité de mouvement à l'interface.

On remarque à nouveau que cette loi locale ne fait intervenir que la vitesse relative de la matière par rapport à Σ (de même que pour l'équation de conservation de la masse).

Classification en ondes de choc ou surface de contact et situation de la transformation martensitique

On classifie généralement les phénomènes de propagation de surfaces de discontinuité suivant la valeur du débit massique $m = \rho \cdot V_n$, où V_n est la vitesse normale de la matière par rapport à la surface de discontinuité.

a) $m = 0$: la vitesse normale V_n est nulle sur les deux faces de Σ et il n'y a pas de flux de matière à travers l'interface. On parle alors généralement de surface de contact entre deux milieux (cf. [8,9]).

b) $\underline{m} \neq 0$: la matière en mouvement traverse effectivement Σ et l'on parle alors d'onde de choc. On note qu'en général, une telle situation implique une discontinuité de V_n qui implique une évolution adiabatique des deux milieux en contact (cf. [8]).

Dans le cas d'une transformation martensitique, l'interface a été définie comme la surface géométrique qui, à chaque instant, définit un lieu de séparation du milieu matériel en une région non transformée (phase mère) et une région transformée. Il n'y a donc pas à proprement parler de flux de matière à travers l'interface (de par sa définition). En revanche, un flux de matière peut se produire si l'on considère que la partie qui se transforme au voisinage de Σ subit simultanément une déformation dans la direction de la normale à l'interface.

ANNEXE 5

CHOIX DU POTENTIEL THERMODYNAMIQUE ET PRINCIPES VARIATIONNELS

Définition des potentiels thermodynamiques

La méthode des potentiels encore appelée méthode des fonctions caractéristiques a été développée par Gibbs. Elle permet, pour un système se trouvant dans certaines conditions, de définir des fonctions d'état appelées potentiels thermodynamiques, en fonction d'un choix de variables dites normales (postulat de Helmholtz). La variation de ces fonctions est une différentielle totale (exemple énergie interne U , entropie S) et le choix d'un potentiel et des variables normales dont il dépend se justifie par la possibilité de déterminer toutes les propriétés thermodynamiques du système par dérivation du potentiel (Bazarov, [14]). Cela posé, les deux principes s'énoncent :

i) existence d'une fonction U , l'énergie interne, telle que $dU = \delta W + \delta Q$ soit une différentielle totale et ii) existence d'une fonction d'état S , l'entropie, telle que $\delta Q = T dS$, le facteur intégrant T étant la température absolue (approche de Carathéodory, [12,13]). De plus, S présente un maximum à l'équilibre.

Les variables normales pour U sont l'entropie S et le volume V , toutes les autres variables se déduisant de U par dérivation (U contient toute l'information du système). D'un point de vue pratique, l'entropie ne pouvant être mesurée, on ne peut déduire directement les lois constitutives de l'expression de U et l'on introduit d'autres potentiels (énergie libre de Helmholtz ou de Gibbs), associés au choix d'autres variables normales (cf. références 14, 15, 17, 18, 19, 21).

Les méthodes d'obtention des potentiels et les principes extrémaux qu'ils engendrent sont fondés sur la transformation de Legendre, que nous allons présenter succinctement.

Dans les représentations en énergie interne et entropiques, les paramètres extensifs jouent le rôle de variables indépendantes, alors que les paramètres intensifs sont en fait des grandeurs dérivées (ainsi $T = \frac{\partial U}{\partial S}$). Comme nous l'avons mentionné auparavant, cette situation contraste avec l'impossibilité de mesurer les paramètres extensifs (au contraire, les paramètres intensifs tels que température ou pression sont accessibles à l'expérimentateur) : on cherche alors à modifier le formalisme mathématique de façon à remplacer les paramètres extensifs par des paramètres intensifs choisis comme variables indépendantes.

Le problème mathématique s'appréhende de la manière suivante : soit $Y = Y(X)$ une relation entre la grandeur Y et la variable indépendante X . En chaque point de coordonnées (X, Y) , on définit la tangente à la courbe de pente P .

On souhaite exprimer d'une manière équivalente la relation $Y(X)$ où la variable indépendante soit P . Le concept essentiel dans la résolution de ce problème est la dualité* existante entre la géométrie affine et la représentation de la géométrie par des lignes, encore appelée géométrie de Plücker (Callen, [16]) : une courbe peut être représentée soit par l'ensemble de points satisfaisant une relation donnée ($Y = f(X)$), soit par l'enveloppe d'une famille de lignes tangentes à la courbe.

* **N.B.** : On observe qu'une telle dualité (équivalente en mécanique classique à la dualité entre les formalismes Lagrangien et Hamiltonien) n'est possible que si la fonction $Y(X)$ est convexe (cas de l'énergie interne) sur l'ensemble du domaine où l'on effectue la transformation.

des ordonnées (fig. 7). La relation $\psi(P)$ s'obtient à partir de la représentation $Y(X)$ par la transformation de Legendre de $Y : P \frac{Y - \psi}{X - O}$, soit $\psi = Y - PX = Y - \frac{\partial Y}{\partial X} X$.

D'un point de vue thermodynamique, une telle dualité permet la construction de potentiels vérifiant des conditions d'extremum. Montrons cette dualité dans le cas d'un système ouvert.

À l'équilibre, l'entropie de l'"univers" (système + thermostat) présente un maximum sous la contrainte $U + U_{th} = \text{constante}$. L'équilibre est ainsi caractérisé par les trois conditions:

$$\begin{cases} d(U+U_{th}) = 0 \\ d(S+S_{th}) = 0 \\ d^2(S+S_{th}) < 0 \quad (\text{entropie maximale}). \end{cases}$$

De plus, $T = \frac{\partial U}{\partial S}$ implique $dS_{th} = -\frac{dU}{T}$ et $d^2S_{th} = -\frac{d^2U}{T} + \frac{dTdU}{T^2}$ soit $d^2S_{th} = -\frac{d^2U}{T}$.

On peut alors réécrire les conditions d'équilibre sous la forme :

$$d\left(S - \frac{U}{T}\right) = 0 \text{ et } d^2\left(S - \frac{U}{T}\right) < 0.$$

Le principe physique de la transformation de Legendre consiste à éliminer le thermostat, à partir de la relation $\frac{\partial S}{\partial U} = \frac{1}{T}$: on définit alors $F(T) = U - S \frac{\partial U}{\partial S} = U - TS$, la transformée de Legendre de U par rapport à T appelée énergie libre de Helmholtz. Les développements précédents montrent alors que F présente un extremum à l'équilibre, qui est un minimum (principe de minimum du potentiel de Helmholtz).

Lorsqu'un travail extérieur W est effectué, la condition d'évolution plus générale obtenue s'écrit $\delta F \leq \delta W$, l'égalité ayant lieu si le travail est effectué dans des conditions réversibles [15]. La définition d'un potentiel thermodynamique s'obtient alors en écrivant cette condition sous la forme $\delta(F-W) \leq 0$ et on voit alors que $F-W$ est un potentiel pour les variables normales température et volume, qui est minimum à l'équilibre. Sa généralisation pour des états de contrainte et de déformation non hydrostatiques s'obtient en introduisant l'ensemble des composantes des tenseurs gradient de la déformation $\underline{\underline{F}}$ comme variables extensives et de contraintes $\underline{\underline{T}}$ comme variables extensives associées.

Dans un formalisme Lagrangien, on exprime alors $F-W = \int_{\Omega} f(\underline{\underline{F}}) d\Omega - \int_{\partial\Omega} \underline{\underline{t}} \cdot \underline{\underline{u}}^T$

dA , où f est la densité de F et $\underline{\underline{t}}$ et $\underline{\underline{u}}$ les vecteurs traction et déplacement sur la frontière S du volume Ω respectivement. Le principe variationnel s'écrit alors

$$\delta \int_{\Omega} f(\underline{\underline{F}}) d\Omega = \int_{\partial\Omega} \underline{\underline{t}} \cdot \delta \underline{\underline{u}}^T dA \text{ à l'équilibre. On voit que l'expression du terme de surface}$$

se simplifie si le système est soumis à des déplacements imposés sur une portion S_u de sa frontière ; en particulier, il disparaît si le volume du système est maintenu constant (car $\delta \underline{\underline{u}} = \underline{\underline{\text{div}}} \underline{\underline{u}} \underline{\underline{dX}} = 0$)

Pour un système monophasé isotherme, f s'identifie à la densité d'énergie élastique [24] et le principe variationnel n'est autre que le principe de minimum de l'énergie potentielle. Pour un volume biphasé, il faut considérer en plus la constitution atomique différente de chaque phase, ce qui implique de rajouter à W une énergie chimique μ (par unité de volume). On obtient alors la différentielle $df = T_{ij} dF_{ij} + \mu d\Omega$.

On obtient un principe variationnel dual du précédent en effectuant la transformation de Legendre de f , ce qui définit la densité g du potentiel de Gibbs selon $g = -T_{ij} F_{ij} + f$, fonction des variables température et contrainte. Sa différentielle s'exprime selon $dg = d(-F_{ij} T_{ij} + f) = -dT_{ij} F_{ij} - T_{ij} dF_{ij} + df$, soit $dg = -dT_{ij} F_{ij} + \mu d\Omega$ et on note que le premier terme du membre de droite représente la différentielle de la densité d'énergie élastique complémentaire. On vérifie alors que l'expression

$$\int_{\Omega} g(\underline{\mathbf{F}}) d\Omega - \int_{\partial\Omega} \underline{\mathbf{t}} \underline{\mathbf{u}}^T dA$$

présente un minimum à l'équilibre (en effectuant une variation virtuelle de $\underline{\mathbf{T}}$ dans Ω et de $\underline{\mathbf{t}}$ sur $\partial\Omega$). Ici aussi, le principe prend une forme plus simple si des efforts sont imposés sur une portion de $\partial\Omega$; en particulier, le terme de surface s'annule si les efforts sont imposés sur toute la frontière du solide.

Bilan thermodynamique : représentation en variables température-contrainte

D'après les développements précédents, l'état d'équilibre est caractérisé par le minimum du potentiel de Gibbs G , duquel on soustrait le travail des efforts de surface. On reste dans le cadre d'un formalisme Lagrangien et on suppose le comportement des phases élastique, défini par une densité d'énergie élastique $W(\underline{\mathbf{F}})$.

$$\text{L'énergie à minimiser s'écrit : } \int_{\Omega} g d\Omega - \int_{\partial\Omega} \underline{\mathbf{t}} \underline{\mathbf{u}} dA .$$

La différentielle de g s'exprime dans le cas général selon $dg = +s dT + F_{ij} dT_{ij} - \mu d\Omega$ sommes de contributions thermiques, mécaniques et chimiques respectivement. Le processus est isotherme (l'équilibre thermique est supposé réalisé à chaque instant), il résulte donc $dg = +F_{ij} dT_{ij} - \mu d\Omega$.

La dérivée particulière de l'énergie à minimiser donne alors la condition :

$$\int_{\Omega_A} U_{\Omega_M} \frac{dg}{dt} d\Omega + \int_{\Sigma} \Delta g V_n dA - \int_{\partial\Omega} \frac{d\underline{\mathbf{t}}}{dt} \underline{\mathbf{u}} dA = 0,$$

où Δg est la discontinuité de g au passage de l'interface Σ .

La discontinuité de g s'écrit : $\Delta g = \Delta u - T\Delta s - \Delta(\underline{\mathbf{T}} : \underline{\mathbf{F}})$ et sa partie mécanique est $\Delta W^c(\underline{\mathbf{T}})$, le potentiel d'énergie élastique complémentaire, transformée de Legendre de $W(\underline{\mathbf{F}})$ (Le terme $T\Delta s$ s'identifie à la chaleur latente de transformation : $q = T\Delta s$, mais on l'intègre dans le saut de l'énergie libre de Helmholtz).

Le terme chimique $\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \mu \, d\Omega$ s'écrit $\int_{\Sigma} \Delta\mu \, V_n \, dA$ en supposant les potentiels chimiques uniformes et constants dans chaque phase, soit encore $\Delta\mu \int_{\Sigma} V_n \, dA = \Delta\mu \, \Omega \frac{dx}{dt}$, que l'on note $\frac{d\Delta G^c}{dt}$

$\Delta\mu = \mu_m - \mu_a$ représente la différence de potentiel chimique entre les deux phases ; c'est un terme d'interface. La différentielle de W^c (T) intervient alors dans l'intégrale de volume, qui représente la variation d'énergie complémentaire dans chaque phase.

On substitue alors à la dépendance par rapport à la variable temps une dépendance par rapport au taux de martensite formée x . De $V_n = \frac{dr_n}{dt}$, on déduit le bilan

$$\frac{dE^c}{dx}(A) \, dx + \frac{dE^c}{dx}(M) \, dx - \frac{d\Delta G^c}{dx} \, dx + \int_{\Sigma} \Delta W^c \, dx \frac{dr_n}{dx} \, dA - \int_{\partial\Omega} \frac{dt}{dx} \, \underline{u} \, dA = 0,$$

où E^c est l'énergie de déformation complémentaire.

L'intégrale sur l'interface peut encore s'écrire $\int_{\Sigma} dx \, \Sigma \, \Delta W^c \frac{dr_n \Omega}{\Omega \Sigma dx} \, dA$

or, $\frac{\Sigma dr_n}{\Omega}$ est égal à l'incrément de taux de phase formée dx (pour un volume suffisamment petit) ; on obtient alors l'expression $\frac{\Omega dx}{\Sigma} \int_{\Sigma} \Delta W^c \, dA$ qui s'exprime en

fonction de la moyenne de ΔW^c sur l'interface $\overline{\Delta W^c} = \frac{1}{\Sigma} \int_{\Sigma} \Delta W^c \, dA$, d'où la condition d'équilibre

$$(1-x) \, dE^c(A) + x \, dE^c(M) + \overline{\Delta W^c} = d(\Delta G^c) - \frac{1}{\Omega} \int_{\partial\Omega} dt \, \underline{u} \, dA \quad (\text{II.1})$$

avec $\overline{\Delta W^c} = \frac{1}{\Sigma} \int_{\Sigma} \Delta W^c \, dA$; $\overline{dE^c(A)} = \frac{1}{\Omega_A} dE^c(A)$; $\overline{dE^c(M)} = \frac{1}{\Omega_M} dE^c(M)$; $\overline{d\Delta G^c} =$

$$\frac{1}{\Omega} d\Delta G^c$$

Dans ce bilan, la discontinuité d'énergie complémentaire $\overline{\Delta W^c}$ est nulle, si l'on suppose que la transformation d'un point matériel ne produit pas de contraintes lors du chemin fictif imaginé pendant la transformation (fig. 8).

ANNEXE 6

EQUATION DE L'ENERGIE EN PRESENCE D'UNE SURFACE DE DISCONTINUITÉ

L'énergie de déformation élastique d'un volume Ω d'un matériau hyperélastique caractérisé par une densité d'énergie élastique $W(\underline{F})$ par unité de volume de la configuration non déformée est

$$E = \int_{\Omega} W(\underline{F}) d\Omega$$

Par application de la méthode du bilan à E , on obtient la dérivée particulière

$$\frac{dE}{dt} = \int_{\Omega_A \cup \Omega_M} \frac{\partial W}{\partial F_{ij}} F_{ij} d\Omega + \int_{\Sigma} \Delta(W) \underline{V} \cdot \underline{N} d\Sigma, \text{ où } \underline{V} \text{ est la vitesse d'un point}$$

géométrique sur Σ et $\Delta(W) = W_M - W_A$ le saut de W .

$$\int_{\Omega_A \cup \Omega_M} \frac{\partial W}{\partial F_{ij}} F_{ij} d\Omega = \int_{\Omega_A \cup \Omega_M} T_{ij} U_{i,j} d\Omega = \int_{\partial\Omega_A \cup \partial\Omega_M} T_{ij} U_i N_j dA$$

par le théorème de la divergence et l'équilibre, ce qui permet de ramener les termes de volume sur les surfaces externes et l'interface. La contribution de cette intégrale sur Σ est égale à :

$$\int_{\Sigma_M} (T_{ij} U_i N_j)^M dA + \int_{\Sigma_A} (T_{ij} U_i N_j)^A dA$$

or, $N^M = N$ et $N^A = -N$, soit une contribution totale sur Σ

$$\int_{\Sigma} (T_{ij} N_j U_i)^M - (T_{ij} U_i N_j)^A dA + \int_{\Sigma} (W^M - W^A) N_i V_i dA$$

$$\begin{aligned} \text{D'où, } E = & \int_{\partial\Omega} T_{ij} U_i N_j dA + \int_{\Sigma} (T_{ij}^M U_i^M N_j + W^M N_i V_i) dA \\ & - \int_{\Sigma} (T_{ij}^A U_i^A N_j + W^A N_i V_i) dA \end{aligned}$$

Or, la relation d'Hadamard (cf. I.2.2.) s'écrit $\Delta(v_i) = -\Delta(F_{ik})V_k$, d'où en posant

$t_i = T_{ij} N_j$ vecteur traction nominale, continu sur Σ :

$$E = \int_{\partial\Omega} t_i U_i dA + \int_{\Sigma} \Delta(W\delta_{ij} - F_{ki} T_{kj}) N_j V_i dA$$

On fait ainsi apparaître un tenseur $P_{ij} = W\delta_{ij} - F_{ki} T_{kj}$, soit $\underline{P} = W \underline{1} - \underline{F}^T \underline{T}$ qui est le tenseur de moment-énergie d'Eshelby (qui joue un rôle important dans la théorie des défauts dans les solides, [37]) et dont les propriétés ont été étudiées par de nombreux auteurs ([37],[38]). On peut donc réécrire sous une forme plus compacte

$$\frac{dE}{dt} = \int_{\partial\Omega} t_i U_i dA + \int_{\Sigma} \Delta(P_{ij}) N_j V_i dA$$

Le terme d'interface peut être écrit sous une forme plus explicite, en multipliant l'intégrand par $\underline{N}^t \underline{N}$ et on obtient pour celui-ci l'expression $\int_{\partial\Omega} \Delta(P_{ij} N_i N_j) (V_i N_j) dA$, où $P_{nn} =$

$P_{ij} N_i N_j$ est la composante de $\underline{\underline{P}}$ suivant la normale \underline{N} . Le produit $V_i N_i$ représente le même la vitesse interfaciale normale V_n .

On obtient alors
$$\frac{dE}{dt} = \int_{\partial\Omega} t_i U_i dA + \int_S \Delta (P_{ij}) N_j V_i dA .$$

PREMIERE PARTIE

TABLE DES ILLUSTRATIONS

Figure 1 : le modèle de G.CAILLETAUD et ses différentes étapes (d'après [13])

Figure 2 : modèle de JARRY, TOITOT, JANIN [18]. Définition de la cellule de base et de sa discrétisation.

Figure 3 : évolutions de la déformation plastique cumulée durant le refroidissement pour des noeuds situés le long des fibres (noeud 5) et à ses extrémités (noeud 139). (modèle de JARRY, TOITOT, JANIN [18])

Figure 4: contraintes résiduelles de trempe (Cas de fibres longues). (modèle de JARRY, TOITOT, JANIN [18])

Figure 5 : modèle de BÖHM et RAMMERSTORFER [19].
configuration de la cellule unité et sa discrétisation E.F.

Figure 6 : effet Bauschinger pour trois séquences de chargement.
(modèle de BÖHM et RAMMERSTORFER [19])

Figure 7 : iso Von Mises pour les trois cas de chargement de la figure 7.
(modèle de BÖHM et RAMMERSTORFER [19])

Figure 8 : modèle E.F. pour une fraction volumique de phase α égale à 16,3% (en noir). (d'après ANKEM et MARGOLIN [23])

Figure 9 : comparaison de la simulation avec l'expérience pour différentes fractions de phase α (d'après ANKEM et MARGOLIN [23]).

Figure 10 : contraintes longitudinales et transversales le long de la coupe GG de la figure 9 (d'après ANKEM et MARGOLIN [23]).

Figure 11 a,b: modèle d'alliages Fe-Ag de composition équivolumique (selon C.T. DE MONTPREVILLE [24]) a) Phases discontinues b) Phases continues

Figure 12 : courbes contrainte-déformation du biphasé Fe-Ag de composition équivolumique, d'après C.T. DE MONTPREVILLE [24]. 0, courbe expérimentale ; 1, courbe obtenue par simulation à partir d'un modèle formé d'un empilement de cubes ; 2, courbe obtenue par simulation à partir d'un empilement d'octaèdres tronqués.

Figure 13 : courbes d'iso-déformations plastiques dans le plan contenant l'axe de compression et les centres des domaines de fer et d'argent, d'après C.T. DE MONTPREVILLE [24]. a) Phases discontinues b) Phases continues

Figure 14 a,b : courbes de traction à température ambiante pour
a) Cu et Ag b) Cd et Zn (d'après L.DURAND [25])

Figure 15 a,b,c,d : courbes contrainte-déformation pour un alliage biphasé austénite- martensite, pour quatre fractions volumiques de martensite x (d'après LEBLOND [17]) a) $x=12,5\%$ b) $x=25\%$ c) $x=50\%$ d) $x=100\%$

Figure 16 : Accommodation anisotrope de l'écoulement plastique local

Figure 17 : Détermination de la déformation liée à la transformation de phase dans la direction de la contrainte appliquée

Figure 18 : Sélection de l'orientation des variants par l'état de contrainte local

Figure 19 : Description géométrique et cinématique d'une transformation martensitique dans un repère fixe, d'après FISCHER et MITTER [32].

Figure 20 : a) Déformation de plasticité de transformation pour une transformation complète en fonction de divers chargements (contraintes appliquées uniaxiales) obtenue par simulation numérique (d'après DESALOS, [34]).
b) Ordre de transformation dans un grain austénitique isotherme se refroidissant par incréments de température successifs (1/4 de grain représenté), (d'après DESALOS, [34]).

Figure 21 : simulation par E.F. développée par LEBLOND [30]. Déformation de plasticité de transformation dans un cube de 125 éléments, pour une contrainte appliquée de 50 Mpa. 1 Théorie 2 Transformation dirigée 3 Transformation aléatoire.

Figure 22 : simulation par E.F. développée par LEBLOND [30]. Déformation de plasticité de transformation "normalisée" pour un cube de 1000 éléments et des contraintes uniaxiales appliquées faibles. 1 Théorie 2 Transformation dirigée, $\Sigma_{xx}=50$ Mpa 3 Transformation dirigée, $\Sigma_{xx}=100$ Mpa 4 Même que 2, avec $\Delta\varepsilon_{1 \rightarrow 2}^{th}$ divisé par 2 5 Transformation aléatoire, $\Sigma_{xx}=100$ Mpa

Figure 23 : Modèle numérique de LEBLOND. Quantification de la plastification dans chacune des phases (cube de 1000 éléments, transformation aléatoire, $\Sigma_{xx} = 100$ Mpa).

Figure 24 : déformation d'un élément de volume d'austénite par la transformation martensitique (d'après PATOOR [36])
n : normale au plan d'habitat
m : direction de transformation
m' : projection sur le plan d'habitat de la direction m
 α : angle formé par les directions m et m'.

Figure 25 : Transformation d'un volume V d'austénite en plusieurs bandes de martensite de volume V_i constituées chacune d'un variant différent (d'après PATOOR, [36]).

DEUXIEME PARTIE**TABLE DES ILLUSTRATIONS CHAPITRE I**

- Figure 1a,b : Modèles sphériques (a) et aléatoires (b). Evolutions de la plasticité de transformation en fonction du niveau de sollicitation externe (0,10,20 et 30 Mpa), pour différents taux de phase formée.
- Figure 2 : Effet de l'état de contrainte uniaxial appliqué sur la plasticité de transformation, pour trois taux de transformation x . Comparaison des deux modèles. a) $x=12,5\%$ b) $x=50\%$ c) $x=100\%$
- Figure 3 : Modèle de progression aléatoire. Evolutions de la plasticité de transformation pour une transformation élément par élément (propriétés affectées en début de pas ; propriétés affectées en fin de pas) ou par groupes de 6 éléments. Maillage de 6.6.6 éléments ; contrainte uniaxiale appliquée de 20 Mpa.
- Figure 4 : Lois d'évolution de la contrainte uniaxiale appliquée en fonction de l'avancement de la transformation. Modèle de progression aléatoire par groupe de 6 éléments. Propriétés mécaniques imposées en fin de pas.
- a) Contrainte appliquée constante de 10 Mpa.
 - b) Contrainte appliquée linéairement croissante de 0 à 20 Mpa.
 - c) Contrainte appliquée linéairement décroissante de 20 à 0 Mpa.
 - d) Contrainte appliquée constante de 20 Mpa.
- Figure 5 : Evolutions de la plasticité de transformation en fonction de l'avancement pour différentes lois de variation de la contrainte uniaxiale appliquée en fonction de la fraction transformée (cas a),b),c) et d) du tableau 3). Modèle de progression aléatoire par groupe de 6 éléments ; propriétés imposées en fin de pas.

TABLE DES ILLUSTRATIONS CHAPITRE II

- Figure 1 : Modèle de croissance sphérique ; maillage de 10.10.10 éléments : cellule de base analysée.
- Figure 2 : Modèle de croissance aléatoire ; maillage de 4.4.4 éléments : cellule de base analysée.
- Figure 3 : Modèle de croissance sphérique. Calcul à contrainte nulle. Evolutions en fonction de l'avancement de la déformation plastique cumulée pour les noeuds diagonaux.
- Figure 4 : Modèle de croissance sphérique. Calcul à contrainte nulle. Evolution en fonction de l'avancement de la contrainte hydrostatique pour les noeuds diagonaux.
- Figure 5 : Modèle de croissance sphérique. Contrainte uniaxiale de 20 MPa. Propriétés imposées en fin de pas. Evolution en fonction de l'avancement de la déformation plastique cumulée pour les noeuds diagonaux.
- Figure 6 : Evolution de la déformation plastique cumulée le long de la diagonale principale du cube (noeuds 111 à 11.11.11) pour le modèle de croissance sphérique pour des propriétés imposées en fin de pas, pour deux niveaux de sollicitation : a) 10 MPa b) 20 MPa.
- Figure 7 : Modèle de croissance sphérique. Contrainte uniaxiale de 20 MPa. Propriétés imposées en début de pas. Evolution en fonction de l'avancement de la déformation plastique cumulée pour les noeuds diagonaux.
- Figure 8 : Modèle de croissance sphérique. Contrainte uniaxiale de 20 MPa. Propriétés imposées en début de pas. Evolution avec l'avancement de la contrainte hydrostatique pour les noeuds diagonaux.
- Figure 9 : Modèle de croissance sphérique. Contrainte uniaxiale de 20 MPa. Propriétés imposées en début de pas. Evolution avec l'avancement de la contrainte équivalente pour les noeuds diagonaux.
- Figure 10 : Modèle de croissance sphérique. Contrainte uniaxiale de 20 Mpa. Effet de la manière d'imposer les propriétés mécaniques (en début de pas et en fin de pas) sur les évolutions de la plasticité de transformation avec l'avancement.
- Figure 11 : Modèle de croissance sphérique. Contrainte uniaxiale de 20 MPa. Propriétés imposées en début de pas. Evolution avec l'avancement du facteur d'anisotropie pour les noeuds diagonaux.
- Figure 12 : Modèle de progression aléatoire. Visualisation des zones transformées entre les pas 25 et 32 (éléments hachurés) dans les plans de coupe perpendiculaires à l'axe Oz. Élément transformé au pas 32.
- Figure 13 : Modèle de progression aléatoire. Evolutions avec l'avancement de la déformation plastique cumulée pour des noeuds externes (noeuds 555 et 553, fig.13a) et un noeud interne (noeud 333, fig.13b). Propriétés mécaniques imposées en début et en fin de pas. Contrainte uniaxiale appliquée de 20 MPa.

- Figure 14** : Comparaison des deux modèles : croissance sphérique et au hasard : modèle sphérique avec propriétés imposées en début de pas (sp10l200b) et en fin de pas (sp10l200e). Modèle aléatoire avec propriétés imposées en fin de pas (rs6l200e). Comparaison simulation / expérience.
- Figure 15** : Effet de mémoire de l'écroissage développé dans l'austénite avant transformation sur l'évolution de la plasticité de transformation pour les deux modèles. Propriétés mécaniques imposées en fin de pas ; contrainte uniaxiale de 20 MPa.
- Figure 16** : Comparaison des évolutions de la plasticité de transformation dans les cas avec et sans fluage. Propriétés imposées en fin de pas ; contrainte uniaxiale appliquée de 20 Mpa.
- Figure 17** : Evolutions avec l'avancement de transformation des déformations plastiques et de fluage cumulées pour les calculs élastoplastiques avec et sans fluage. Cas de noeuds internes (333) et externes (999).
- Figure 18** : Modèle de croissance sphérique. Contrainte uniaxiale de 20 MPa. Comparaison des évolutions de la plasticité de transformation pour un calcul à mêmes propriétés mécaniques et un calcul avec des propriétés imposées en fin de pas.
- Figure 19** : Modèle de croissance sphérique. Contrainte uniaxiale de 20 MPa. Comparaison des évolutions de la déformation plastique cumulée pour un calcul à mêmes propriétés mécaniques et un calcul à propriétés imposées en fin de pas. Cas des noeuds 333, 777 et 111111.
- Figure 20** : Comparaison des évolutions de la plasticité de transformation pour les deux modèles dans les cas de propriétés mécaniques des phases identiques et différentes (propriétés affectées en fin de pas). Contrainte uniaxiale appliquée de 20 MPa.
- Figure 21** : Modèle de progression aléatoire. Comparaison des évolutions de la déformation plastique cumulée pour un calcul à mêmes propriétés mécaniques et à propriétés différentes imposées en début de pas. Noeuds externe (555) et interne (333).
- Figure 22** : Modèle de progression sphérique. Effet des conditions limites (frontières rigides ou libres) sur les évolutions de la plasticité de transformation avec l'avancement. Contrainte uniaxiale de 20 MPa. Propriétés imposées en fin de pas.
- Figure 23** : Evolution de la déformation plastique cumulée le long de la diagonale principale du cube (noeuds 111 à 11.11.11) pour le modèle de croissance sphérique en conditions de frontières libres pour une contrainte appliquée de 20 MPa.
- Figure 24** : Evolutions de la plasticité de transformation pour les deux modèles d'avancement, pour des propriétés des phases identiques. Conditions limites rigides et libres pour le modèle sphérique.

TROISIEME PARTIE**TABLE DES ILLUSTRATIONS CHAPITRE I**

- Figure 1 : Géométrie sphérique des phases (coeur de phase formée en croissance dans une gaine d'austénite), (Annexe I).
- Figure 2 : Configuration de référence (a) et actuelle (b) d'un domaine matériel contenant une frontière interphase.
- Figure 3 : Volume présentant une surface de discontinuité.
- Figure 4 : Propagation d'une surface de discontinuité (Annexe 3).
- Figure 5 : Description cinématique de la transformation martensitique (définition des paramètres ϵ_0 et γ_0).
- Figure 6 : Représentation mécanique associée à la transformation dans un diagramme contrainte-déformation.
- Figure 7 : Dualité entre la géométrie affine et la géométrie Plückerienne (Annexe 5).
- Figure 8 : Chemin de transformation dans un diagramme contrainte-déformation (Annexe 5).
- Figure 9 : Utilisation d'une partie de la déformation élastique comme déformation de transformation.

TABLE DES ILLUSTRATIONS CHAPITRE II

- Figure 1 : Description micromécanique de la transformation martensitique.
 a) Eléments cinématiques et statiques ; repère local.
 b) Réduction de l'état de contrainte local sur le plan d'habitat.
- Figure 2 : Modèle micromécanique multigrain
- Figure 3 : Paramétrisation du vecteur normal.
- Figure 4 : Modèle multigrain. Algorithme de la simulation.
- Figure 5 : Ordre de transformation des éléments.
- Figure 6 : Orientation des variants de martensite (après transformation complète).
- Figure 7 : Modèle micromécanique d'un grain. Maillage E.F. et variants de martensite associés.
- Figure 8 : Effet des conditions limites sur les contraintes internes (contrainte de Von Mises).
 a) Situation de frontières libres.
 b) Frontières rigides.
- Figure 9 : Déformations plastiques cumulées générées par la formation d'une bande oblique
- Figure 10 : Algorithme de la simulation.
- Figure 11 : Distribution des variants de martensite formés (ordre d'apparition et direction de cisaillement).
- Figure 12 : Zones plastifiées à différents stades de la transformation :
 a) 7 variants formés
 b) 13 variants formés
 c) 20 variants formés
 d) transformation complète.
- Figure 13 : Evolution de la contrainte hydrostatique du noeud 100 en fonction de l'avancement de la transformation.
- Figure 14 : Classification de l'orientation des variants.
 n : normale au plan d'habitat ; d : direction de cisaillement.
 ϵ_x^r : contribution de la déformation de transformation dans la direction de la contrainte appliquée (cas uniaxial).
 γ : contribution du cisaillement associé à la transformation.
- Figure 15 : Evolution avec la fraction de martensite formée des déformations totales et de transformation réversible associées à la morphologie de variants de la figure 11.
- Figure 16 : Evolution avec la fraction de martensite formée du nombre d'orientations.

- Figure 17a : Développement des variants de martensite.
Première bande courte / Morphologie en pointe / 10 MPa.
- Figure 17b : Evolution du nombre d'éléments associés aux différentes orientations classées en fonction de leurs contributions à la déformation de transformation dans la direction de sollicitation.
Première bande courte / Morphologie en pointe / 10 MPa.
- Figure 17c : Evolutions de la déformation totale et de transformation avec la fraction transformée pour un calcul effectué dans les conditions : Première bande courte / Morphologie en pointe / 10 MPa.
- Figure 18a : Développement des variants de martensite.
Première bande courte / Morphologie en pointe / 250 MPa.
- Figure 18b: Evolution du nombre d'éléments de mêmes orientations classées en fonction de leurs contributions à la déformation de transformation dans la direction de sollicitation. Première bande courte / Morphologie en pointe / 10 MPa.
- Figure 18c: Evolutions de la déformation totale et de transformation avec la fraction transformée pour un calcul effectué dans les conditions : Première bande courte / Morphologie en pointe / 250 MPa.
- Figure 19 : Evolutions de la déformation totale et de transformation avec la fraction transformée pour un calcul effectué dans les conditions : Première bande longue / Morphologie en pointe / 250 MPa.
- Figure 20 : Evolutions de la déformation totale et de transformation avec la fraction transformée pour un calcul effectué dans les conditions : Première bande courte / Morphologie en pointe / 100 MPa.
- Figure 21: Distribution des contraintes internes (de Von Mises) générées par la transformation d'une bande horizontale incomplète. Comportement élastique des phases. Conditions de frontières libres.
- Figure 22: Distribution des contraintes internes (de Von Mises) générées par la transformation d'une bande horizontale incomplète. Comportement élastique des phases. Conditions de frontières planes avec cisaillement.
- Figure 23 : Evolutions de la déformation totale et de transformation avec la fraction transformée pour un calcul effectué dans les conditions : Première bande courte / bandes pleines / 10 MPa.
- Figure 24 : Evolutions de la déformation totale et de transformation avec la fraction transformée pour un calcul effectué avec une dilatation de 0,3% et un cisaillement de 19% dans les conditions : Première bande longue / Morphologie en pointe / 10 MPa.
- Figure 25 : Comparaison des évolutions de la déformation de transformation avec la fraction de martensite formée pour deux calculs effectués sous une contrainte de 250 Mpa avec une loi de comportement des phases élastique et élastoplastique.
- Figure 26 : Calculs élastiques et élastoplastiques sous une contrainte uniaxiale appliquée de 250 Mpa. Comparaison des morphologies des variants de martensite.

TABLE DES MATIERES

AVANT-PROPOS

INTRODUCTION

1

PREMIERE PARTIE : ANALYSE GENERALE DE LA DEMARCHE MICROMECHANIQUE POUR UN MATERIAU BIPHASE

5

I - APPROCHE MACROSCOPIQUE

8

- I.1. Structure générale des modèles à variables internes et loi constitutive 9
- I.2. Matériaux monophasés 10
 - I.2.1. Illustration de la démarche : cas de la plasticité couplée à l'endommagement
 - I.2.2. Approches par les théories de jauge
- I.3. Matériaux multiphasés 12

II - APPROCHE MICROMECHANIQUE

14

- II.1. Méthodologie de la transition d'échelle 14
 - II.1.1. Modélisation micromécanique du comportement du polycristal 15
 - II.1.2. Une alternative : l'approche 'macro-micro' 17
- II.2. Modèle micromécanique du biphasé stable 18
 - II.2.1. Matériaux composites et homogénéisation 18
 - II.2.2. Simulations par éléments finis 20

III - PLASTICITE DE TRANSFORMATION

26

- III.1. Phénomènes et mécanismes 26
 - III.1.1. Phénomènes
 - III.1.2. Mécanismes
 - III.1.2.1. Mécanisme d'accommodation anisotrope de l'écoulement plastique 27
 - III.1.2.2. Mécanisme d'orientation du produit de transformation 28
- III.2. Revue bibliographique des modèles de plasticité de transformation 29
 - III.2.1. Modèles basés sur le mécanisme d'accommodation anisotrope de l'écoulement plastique
 - III.2.1.1. Modèles analytiques
 - III.2.1.2. Simulations par éléments finis
 - III.2.2. Modèles basés sur le mécanisme d'orientation du produit de transformation

IV - CONCLUSION

37

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

41

**DEUXIEME PARTIE : SIMULATION PAR ELEMENTS FINIS DU
COMORTEMENT MECANIQUE D'UN MATERIAU QUI SUBIT UNE
TRANSFORMATION PAR DIFFUSION** 43

CHAPITRE I

**MODELISATION ET CALCUL DES EVOLUTIONS DE PLASTICITE DE
TRANSFORMATION AVEC L'AVANCEMENT DE LA TRANSFORMATION ET L'ETAT
DE CONTRAINTE APPLIQUEE**

- I Publication : "Finite elements calculations of the micromechanics of a
diffusional transformation" 45
J.F. GANGHOFFER, S. DENIS, E. GAUTIER, A. SIMON, S.SJÖSTRÖM.
- II Etablissement d'une loi de comportement pour la plasticité de transformation 61
II.1. Etats de contrainte constants au cours de l'avancement
II.2. Conditions de sollicitations uniaxiales variables avec l'avancement de
la transformation

CHAPITRE II

**ANALYSE DES ETATS MECANQUES LOCAUX ET CORRELATION AVEC LES
EVOLUTIONS DE LA PLASTICITE DE TRANSFORMATION** 66

- I - CHOIX DES PARAMETRES ET DES LIEUX D'ANALYSE 68
I.1. Paramètres mécaniques
I.2. Selection des lieux d'analyse
- II - ANALYSE DES EVOLUTIONS DES PARAMETRES LOCAUX 70
II.1. Modèle de croissance sphérique 70
II.1.1. Effet du niveau de contrainte appliquée
a) Contrainte appliquée nulle
b) Contrainte appliquée non nulle
II.1.2. Effet de la manière d'imposer les propriétés mécaniques 73
II.2. Modèle de progression aléatoire 76
II.3. Synthèse 77
- III - DISCUSSION 78
III.1. Influence de la loi de comportement des phases 79
III.1.1. Effet du comportement à l'écroutissage
III.1.2. Introduction d'un comportement visqueux des phases
III.1.3. Cas de propriétés des phases identiques 83
III.2. Effet d'interactions entre cellules voisines 84
- REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES 87

**TROISIEME PARTIE : SIMULATION PAR ELEMENTS FINIS DU
COMPORTEMENT MECANIQUE D'UN MATERIAU QUI SUBIT UNE
TRANSFORMATION MARTENSITIQUE** 88

CHAPITRE I

**ETUDE MECANIQUE ET THERMODYNAMIQUE D'UN MATERIAU QUI
SUBIT UNE TRANSITION DE PHASE COHERENTE. APPLICATION A LA
TRANSFORMATION MARTENSITIQUE**

I - Analyse mécanique d'une transition de phase cohérente	89
I.1. Le concept de cohérence	91
I.2. Dérivée particulière d'une intégrale sur un volume présentant une surface de discontinuité	
I.2.1. Approche Eulérienne	
I.2.2. Approche Lagrangienne - relations cinématiques de compatibilité	
I.3. Bilan mécanique d'une transition de phase cohérente	94
I.3.1. Formulation Eulérienne	
I.3.2. Approche Lagrangienne	
I.3.3. Cas de la transformation martensitique	95
II - Etude thermodynamique d'une transition de phase cohérente : bilans d'équilibre	98
III - Etude thermodynamique hors équilibre	100
III.1. Condition générale d'évolution et production interne d'entropie	100
III.1.1. Cas élastique	101
III.1.2. Approche élastoplastique	102
III.2. Généralisation du concept de potentiel chimique	104
III.3. Conditions de validité de l'étude thermodynamique	104
III.4. Formulation d'un critère de sélection des variants de martensite	105
III.5. Introduction du critère dans un modèle	106
III.5.1. Analyse du potentiel mécanique de transformation	107
III.5.2. Choix de la loi de comportement des phases	107
NOMENCLATURE DES PRINCIPAUX SYMBOLES UTILISES	109
REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES	111

CHAPITRE II

SIMULATION PAR ELEMENTS FINIS DE LA TRANSFORMATION MARTENSITIQUE 113

I - CONCEPTS MICROMECHANIQUES ET MODELE MULTIGRAIN	116
I.1. Caractérisation cinématique et statique de la transformation	116

I.2.	Modèle micromécanique multigrain	117
I.2.1.	Critères d'évolution et description du fonctionnement de la simulation	117
I.2.2.	Résultats de la simulation	119
 II - MODELE MICROMECHANIQUE DU COMPORTEMENT DU GRAIN		120
II.1.	Hypothèses et traits généraux du modèle	121
II.1.1.	Choix des conditions limites	121
II.1.2.	Modèle d'avancement de la transformation	123
II.1.3.	Modes d'accommodation de la déformation de transformation et morphologie des variants	124
II.1.4.	Fonctionnement et nature des résultats de la simulation	125
II.2.	Résultats de la simulation	126
II.2.1.	Distribution des variants et des contraintes internes	126
II.2.2.	Plasticité de transformation	128
II.2.3.	Effet des principaux paramètres du modèle sur les résultats de la simulation	131
II.2.3.1.	Effet de la taille de la première plaquette	131
II.2.3.2.	Effet du niveau de sollicitation mécanique appliquée (cas uniaxial)	133
II.3.	Discussion et développements futurs du modèle	134
II.3.1.	Effet des paramètres du modèle éléments finis	135
II.3.2.	Description de la transformation	137
 REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES		141
 CONCLUSION		142
 ANNEXES		147
ANNEXE SUPERALLIAGES		149
ANNEXE 1 : Potentiel d'un mélange biphasé évolutif		158
ANNEXE 2 : Dérivée particulière d'une intégrale de volume		163
ANNEXE 3 : Relations cinématiques de compatibilité		165
ANNEXE 4 : Principe des puissances virtuelles pour un champ de vitesse virtuel continu et différentiable par morceaux		168
ANNEXE 5 : Choix du potentiel thermodynamique et principes variationnels		172
ANNEXE 6 : Equation de l'énergie en présence d'une surface de discontinuité		177
 TABLE DES ILLUSTRATIONS		180
 TABLE DES MATIERES		188



RESUME

Nous avons développé une modélisation micromécanique par éléments finis du comportement d'un matériau biphasé en cours d'évolution structurale. Nous étudions le développement de la transformation à l'intérieur d'une cellule représentative du matériau à l'échelle microscopique, sous sollicitation mécanique. Chaque élément du maillage représente un élément de volume d'une des phases ; sa transformation est caractérisée par une déformation qui lui est associée et un changement de ses propriétés mécaniques. Nous avons tout d'abord modélisé une transformation par diffusion, pour laquelle la déformation de transformation est un changement de volume ; la plasticité de transformation résulte ici de l'orientation de l'écoulement plastique par l'état de contrainte local. L'avancement de la transformation a été décrit suivant deux modèles distincts (croissance sphérique, progression aléatoire). Les principaux résultats obtenus concernent l'évolution de la plasticité de transformation avec l'avancement de la transformation et avec la contrainte appliquée, que nous avons reliée aux états mécaniques locaux. Nous avons traité ensuite le cas plus complexe d'une transformation martensitique, pour laquelle l'avancement et l'orientation du produit formé dépendent des contraintes internes générées via un critère thermodynamique. La déformation de transformation se compose dans ce cas d'un cisaillement et d'un changement de volume. Les concepts micromécaniques ont été introduits dans un modèle à l'échelle du grain, intégrant des aspects morphologiques et cristallographiques propres à la transformation. Les résultats obtenus décrivent les effets d'interaction entre les champs mécaniques locaux et la formation des variants de martensite ; corrélativement, la simulation fournit la contribution respective de chacun des deux mécanismes de plasticité de transformation.

MOTS CLES : modélisation micromécanique - éléments finis - transformation par diffusion - transformation martensitique - plasticité de transformation - interactions contraintes-transformation de phase - thermodynamique