

Transition de phase Austénite/Martensite et plasticité :

Étude micromécanique via la notion de déformation propre ("eigen strain").

Objectif: Préparation d'une modélisation du comportement d'un alliage métallique à transition de phase solide/solde type AMF (Alliage à Mémoire de Forme) ou acier TrIP (Transformed Induced Plasticity) à l'échelle de l'agrégat austénite/martensite par une démarche micromécanicienne utilisant la notion de déformation propre "eigen strain". Ce modèle devra par la suite pouvoir s'intégrer dans un code de calcul par éléments finis (Abaqus) adapté pour les phénomènes de transformations et construit selon une démarche micromécanicienne d'homogénéisation.



Ce stage s'inscrit dans le cadre du projet M3COTAM (UEB) Modélisation Multiphysique et Multiéchelle du Comportement Thermomécanique de structures en Alliages Métalliques métastables), projet transverse de l'Université Européenne de Bretagne

La transition de phase Austénite/Martensite:

La transformation de phase austénite/martensite est dite displasive (faibles déplacements globaux d'atomes, donc pas de changement même local de composition chimique) et s'opère par un changement de la géométrie cristalline, de la forme voire du volume de la maille.

Diagramme de transformation de phase de l'austénite en martensite.

Réseau CC: cubique centré

Réseau FCC: cubique faces centrées

Schéma d'une courbe de traction-déformation/contrainte d'un acier et d'un alliage à mémoire de forme (AMF) avant d'atteindre la limite élastique

La transformation de phase apporte au matériau une élasticité très particulière qui permet d'atteindre une déformation bien plus grande que des matériaux métalliques usuels, pouvant aller jusqu'à 10%.

La démarche micromécanicienne:

Les différentes échelles de modélisation d'un comportement mécanique:

Manchon d'accouplement en alliage à mémoire de forme :
Echelle de la structure

Eprouvette de caractérisation du matériau
Echelle macroscopique

Micrographie d'un AMF (E. Patoor, Aussois 2009)
Echelle de la structure

La modélisation va se porter à l'échelle du granulaire:

A travers le problème d'inclusion d'Eshelby [1] et de la micromécanique:

$$\underline{\underline{\sigma}}^I = \underline{\underline{\Sigma}} + \underline{\underline{C}} \times (\underline{\underline{S}} - \underline{\underline{I}}) : \underline{\underline{\epsilon}}^{eig}$$

Comportement de l'inclusion dans la matrice sollicitée:

matrice $\underline{\underline{\Sigma}}$

inclusion $\underline{\underline{\sigma}}$

La particularité du modèle, c'est qu'il contient la notion de déformation propre "eigen strain" qui peut regrouper plusieurs phénomènes physiques : $\epsilon_{eig} = \epsilon_{th} + \epsilon_p + \epsilon_{p+} + \dots$

La modélisation des forces motrices qui gouvernent l'évolution de l'inclusion [2] :

Force motrice liée à l'évolution des axes α (r, theta, z) de l'inclusion:

$$\frac{1}{2} \times \Delta \underline{\underline{\epsilon}}^{eig} : \underline{\underline{C}}^M : \underline{\underline{\dot{s}}}^{\alpha^I} : \Delta \underline{\underline{\epsilon}}^{eig} \times f^I$$

f^I : fraction volumique d'une phase par rapport à l'autre

Contraintes dans l'inclusion:

Abaqus (éléments finis)

Lois de la mécanique usuelle

Lois de la micromécanique

$$\underline{\underline{\sigma}}^I = \underline{\underline{\Sigma}} + \underline{\underline{C}} \times (\underline{\underline{S}} - \underline{\underline{I}}) : \underline{\underline{\epsilon}}^{eig}$$

Programmatique Mathematica

Choix d'une géométrie axisymétrique

Choix d'un maillage simple

4 nœuds (élément quadratique)

$$\underline{\underline{\sigma}}^I = \begin{pmatrix} 10.0920 & 0 & 0 \\ 0 & 10.046 & 0 \\ 0 & 0 & 210.071 \end{pmatrix}$$

$$\underline{\underline{\sigma}}^I = \begin{pmatrix} 10.2760 & 0 & 0 \\ 0 & 10.2801 & 0 \\ 0 & 0 & 209.446 \end{pmatrix}$$

Ecart en % entre les 2 méthodes:

$$\begin{pmatrix} 1.79\% & 0 & 0 \\ 0 & 2.27\% & 0 \\ 0 & 0 & 0.30\% \end{pmatrix}$$

Le modèle micromécanique est donc valable.

Forces motrices d'évolution de la forme de l'inclusion

Forces motrices liées à l'évolution de la géométrie de l'inclusion

$$\frac{1}{2} \times \Delta \underline{\underline{\epsilon}}^{eig} : \underline{\underline{C}}^M : \underline{\underline{\dot{s}}}^{\alpha^I} : \Delta \underline{\underline{\epsilon}}^{eig} \times f^I$$

Nous n'avons pas le moyen de vérifier le modèle (autrement que par des essais mécaniques non prévus dans le stage), mais on peut vérifier la cohérence des résultats obtenus par une courbe (rose) en $\alpha \times (\Delta \epsilon)^{2/3}$

Relation entre déplacement plastique et force motrice d'évolution de la dimension c en faisant évoluer la contrainte Σ

Les axes d'améliorations du modèle sous Abaqus:

Écart en %	Amélioration du modèle:			Choix des éléments		Choix du maillage		
	Modèle initial (I)	I_Poids	I_diag	I_Inc	I_Cax8	I_CAX3	I++	I_free
		Prise en compte du volume des éléments	Prise en compte des composantes diagonales du tenseur des déformations plastiques	En augmentant le nombre de pas du calcul	Éléments quadratiques à 8 nœuds	Éléments triangulaires	Maillage plus fin	Maillage libre
σ_{tr}	1,79	1,79	1,79	1,75	2,25	0,16	2,28	1,47
$\sigma_{\theta\theta}$	2,27	2,27	2,28	2,10	2,56	1,2	2,48	2,34
σ_{zz}	0,3	0,3	0,3	0,3	0,26	0,07	0,18	0,17

On remarque que seul le choix des éléments a un impact significatif sur la corrélation entre les lois mécaniques de Abaqus et les lois micromécaniciennes.

Perspectives:

Nous disposons d'un premier modèle vérifié, sur le comportement de l'inclusion et d'une extension de ce modèle permettant de déterminer les forces motrices gouvernant l'évolution de la géométrie de l'inclusion sous sollicitation de la matrice. Les actions à mener pour poursuivre cette étude seraient les suivantes :

- Améliorer le premier modèle par l'étude des différents axes proposés.
- Faire évoluer le modèle pour prendre en compte des matériaux élasto-plastiques, tant pour l'inclusion que pour la matrice.
- Corréler le modèle permettant d'évaluer les forces motrices liées à l'évolution des dimensions de l'inclusion par des essais mécaniques.
- Réaliser une loi d'évolution propre, programmable sous Abaqus via des sub-routines types UMAT ou VMAT (disponibles pour des versions Abaqus Explicit et Abaqus Standard).

Conclusion:

Le but de ce stage était de préparer la mise en place d'un modèle de comportement de matériaux à transition de phase austénite/martensite à l'échelle du grain. Ceci ayant pour but d'améliorer la modélisation de ces matériaux qui représentent à l'échelle macroscopique une sommation de divers comportements microscopiques.

Nous avons donc mis en place et vérifié une première modélisation du comportement d'une inclusion élasto-plastique parfaite dans une matrice élastique pure sollicitée en traction de manière à obtenir la plasticité de l'inclusion et ce grâce à la formule de micromécanique liée au problème d'inclusion d'Eshelby. Ceci a permis de mettre en avant les connaissances apprises lors du master.

Ensuite nous avons étudié une extension du premier modèle qui prend en compte l'évolution de la géométrie de l'inclusion lors de la sollicitation. Ceci nous amène à calculer les forces motrices selon les directions des différents axes de l'inclusion.

Ce qui fait la particularité de ces modèles est que nous avons associé modèles, programmation et logiciels de calcul scientifique, ce qui est bien l'objectif du master. Dans un premier temps, nous avons utilisé le logiciel de calcul par éléments finis Abaqus pour de l'étude à l'échelle granulaire. Il est habituellement utilisé pour faire de l'étude à l'échelle de la structure. Dans un second temps, la notion de déformation propre "eigen strain" nous a permis d'utiliser la plasticité (loi de comportement utilisable sous abaqus) de façon analogue à ce qui se passerait pour étudier en moyenne un phénomène de transition de phase solide/solide (loi de comportement non disponible en usage courant sous Abaqus).

Nous avons aussi mené l'analyse critique de la démarche et proposé des pistes de développement aussi bien en modélisation micromécanique et numérique tout en incitant au contrôle expérimental (appel à des notions de mesures physiques et métallurgiques avancées).