

JOURNÉES THÉMATIQUES MECAMAT

“Approches Probabilistes en Mécanique des Milieux Hétérogènes” “Traitements Thermomécaniques–Microstructure et Rhéologie”

Université de Reims, jeudi 10 et vendredi 11 mai 2012.
Campus Croix Rouge, Faculté de Droit et Sciences Economiques,
57 rue Pierre Taittinger, 51096 REIMS Cedex.

Les JOURNEES THÉMATIQUES MECAMAT des Groupes “Approches Probabilistes en Mécanique des Milieux Hétérogènes” - “Traitements Thermomécaniques–Microstructure et Rhéologie” se sont déroulées à l’université de Reims, Campus Croix Rouge, les 10 et 11 mai 2012, où nous avons été accueillis par MM. Larbi SIAD (Université de Reims) et Manuel FRANÇOIS (Université de Technologie de Troyes).

En complément des aspects classiques abordés dans les thématiques des deux groupes de travail, les journées de Reims 2012 porteront en priorité sur les thèmes “Cristallisation, traitements thermiques et nanocristallisations superficielles :” et “Endommagement et rupture ductile des matériaux hétérogènes”. Les deux JOURNEES THÉMATIQUES MECAMAT 2012 insisteront sur les avancées scientifiques récentes concernant la compréhension du comportement des matériaux basées sur des modélisations multi-échelles avec des couplages physico-chimiques forts et les simulations numériques appropriées.

- **Approches Probabilistes en Mécanique des Milieux Hétérogènes :**

- ▷ Modèles et simulations de structures aléatoires (identification de modèles à partir d’analyse d’images de la microstructure ...).
- ▷ Analyse morphologique des microstructures (en particulier en 3D, grâce aux progrès de la microtomographie) et des champs (par exemple de déplacements).
- ▷ Homogénéisation des structures aléatoires (changement d’échelle par couplage d’un calcul aux EFs et de la morphologie, à partir d’images ou de simulations).
- ▷ Modèles probabilistes de rupture et d’endommagement (modèles analytiques et simulations), effets d’échelle sur le comportement en rupture.

- **Traitements Thermomécaniques–Microstructure et Rhéologie :**

le groupe s’intéresse à toutes les recherches tant expérimentales que théoriques, des aspects les plus fondamentaux aux développements industriels, portant sur la rhéologie des matériaux pendant leurs traitements thermomécaniques, le développement des microstructures associées et des couplages qui les relient. L’objectif est de faire échanger idées et problématiques au sein d’un regroupement d’experts, d’ingénieurs, de doctorants ... travaillant sur ou autour de ces sujets dans une optique de curiosité et d’ouverture d’esprit.

Table des matières

JOURNÉES THÉMATIQUES MECAMAT

“Approches Probabilistes en Mécanique des Milieux Hétérogènes”

	“Traitements Thermomécaniques–Microstructure et Rhéologie”	1
1	A. FALL, F. MONTHEILLET, D. PIOT, S. ANDRIEU. • Centre SMS, LCG, ENSMSE Saint-Étienne. • Messier Bugatti Dowty Etablissement de Bidos, Oloron Sainte Marie. <i>Déformation à chaud et évolutions microstructurales de l’alliage Ti5553</i>	5
2	F. WILLOT, D. JEULIN. • CMM, Mines ParisTech, Fontainebleau. <i>The nonlinear mechanical response of the Boolean model of spheres with porous or rigidly-reinforced inclusions and power law matrix</i>	7
3	G. KERMOUCHE, C. LANGLADE, J.M. BERGHEAU. • LTDS, ENI, Saint-Étienne, • LERMPS, UTBM, Belfort. <i>Investigation of mechanically transformed structures induced by repeated impacts on a C45 steel.</i>	9
4	M. FRANÇOIS, S. VAN WIJK, M. FRABOLOT. • LASMIS, UTT, Troyes et DIP, RENAULT, Rueil-Malmaison. <i>Analyse expérimentale des contraintes résiduelles et de la dureté dans un acier 27MnCr5–transformation de phase par grenailage.</i>	12
5	M. THU TRAN FRÜHAUF, F. MONTHEILLET, D. PIOT, G. DAMAMME. • Centre SMS, LCG, ENSMSE Saint-Étienne, • CEA-DAM, Bruyères-le-Châtel. <i>Sélection des variants pendant le refroidissement des alliages de Zr : effet des contraintes de trempe sur une surface libre</i>	15
6	T. OTSUKA, R. BRENNER, B. BACROIX. • LSPM, Université Paris 13, • IJRA, Université Paris 6. <i>Numerical modeling of transformation plasticity in steels by considering Greenwood-Johnson effect</i>	17
7	V. DE RANCOURT, E. BUSSO, S. FOREST, B. APPOLAIRE, K. AMMAR. • CdM P.M. Fourt, Mines ParisTech, Evry. <i>Multiphysical Coupling in Heterogeneous Media using the phase field method.</i>	19
8	L. SIAD, W.K. LIU. • Université de Reims, Reims et DME, • Northwestern University, Evanston, IL. <i>Un modèle de comportement avec 3^{me} invariant des contraintes pour endommagement ductile des matériaux</i>	20

9	J. ESCODA, F. WILLOT, D. JEULIN, J. SANAHUJA, C. TOULEMONDE. <ul style="list-style-type: none"> • CMM, Mines ParisTech, Fontainebleau and DMMC, • EDF R&D, Moret-sur-Loing. <i>3D random multiscale polyhedra model and elastic behaviour of concrete microstructure.</i> 23
10	Y. BEN AMMAR, M. DARRIEULAT. <ul style="list-style-type: none"> • Centre SMS, LCG, ENSMSE Saint-Étienne. <i>Modélisation du plissement des lamelles du Zircaloy-4 sous l'effet d'une contrainte uniaxiale.</i> 24
11	H. ALTENDORF, F. WILLOT, D. JEULIN. <ul style="list-style-type: none"> • CMM, Mines ParisTech, Fontainebleau. <i>Application of Virtual Material Design on a Glass Fiber Reinforced Polymer.</i> 27
12	A. FRAN CZAK, A. LEVESQUE, F. BOHR, J. DOUGLADE, J. P. CHOPART. <ul style="list-style-type: none"> • LISM, Université de Reims, Reims. <i>Influence of bath pH and applied magnetic field on the electrodeposition of cobalt coatings.</i> 28
13	D. LI, A. LEVESQUE, W. QIANG, A. FRAN CZAK, J. P. CHOPART, J. HE. <ul style="list-style-type: none"> • KLEPM, Northeastern University, Shenyang, P.R.China, • LISM, Université de Reims, Reims. <i>High magnetic field annealing dependent the morphology and microstructure of nanocrystalline Co/Ni bilayered films</i> 29
14	M. DARRIEULAT, Y. BEN AMMAR. <ul style="list-style-type: none"> • Centre SMS, LCG, ENSMSE Saint-Étienne. <i>Évolutions microstructurales du Zircaloy-4 sous l'effet du forgeage multiaxial.</i> 30
15	D. JEULIN, D. PIOT, L. SIAD, M. FRANÇOIS. <i>Discussion et conclusion des journées thématiques.</i> 33

1. A. Fall, F. Montheillet, D. Piot, S. Andrieu.

- Centre SMS, LCG, ENSMSE Saint-Étienne.
- Messier Bugatti Dowty Etablissement de Bidos, Oloron Sainte Marie.

Déformation à chaud et évolutions microstructurales de l'alliage Ti5553

✉ : {fall,montheillet,piot}@emse.fr

Les alliages de titane sont très utilisés dans le domaine de l'aéronautique et l'aérospatiale grâce à leurs excellentes propriétés spécifiques. Aujourd'hui le titane représente 6 à 9% du poids d'un avion (A380), que l'on trouve surtout sous forme de pièces forgées (exemple du train d'atterrissage en Ti10 – 2 – 3, en Ti5553 . . .), des pièces de structures, mais aussi des éléments de moteurs tels que les disques de turbine, aubes fan ; avec une température d'utilisation de ces derniers jusqu'à environ 600 °C.

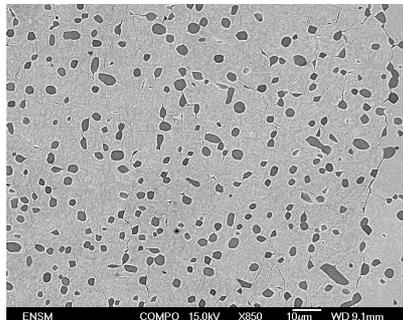
L'alliage Ti5553 est un alliage β métastable. Comme la plupart des alliages de titane bêta métastables, il est biphasé à la température ambiante et présente une proportion importante de phase β , environ 40%. Le Ti5553 a été développé à partir d'un alliage russe : le VT – 22 : Ti – 5Al – 5V – 5Mo – 1Cr – 1Fe, C'est un alliage qui est très résistant à chaud. C'est-à-dire qu'il possède d'excellentes propriétés aux températures élevées notamment une bonne tenue au fluage, une bonne stabilité métallurgique, une facilité de mise en œuvre (forgeage, matriçage), une bonne résistance à la corrosion à chaud, une bonne ténacité et une bonne tenue à la fatigue oligocyclique. La température du transus est de l'ordre de 840 °C. Sa composition chimique nominale est donnée dans le tableau suivant :

Élément d'alliages	Ti	Al	Mo	V	Cr
(%)	82	5	5	5	3

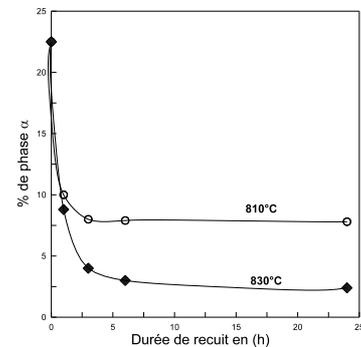
TABLE 1. Composition chimique nominale de l'alliage Ti5553.

Ces caractéristiques lui confère des atouts importants au cours de la mise en forme notamment une cinétique de transformation lente qui fait du Ti5553 un alliage assez intéressant pour les applications aéronautiques et aérospatiales et un assez bon concurrent des nuances tels que le TA6V et le Ti10 – 2 – 3.

Cette étude vise à comprendre le comportement à chaud de l'alliage Ti5553 lors du forgeage et se base sur la compression uniaxiale afin de reproduire au mieux les conditions de forgeage en α/β et en β en laboratoire, mais aussi de caractériser la microstructure (MEB, RX, EBSD) avant et après déformation.



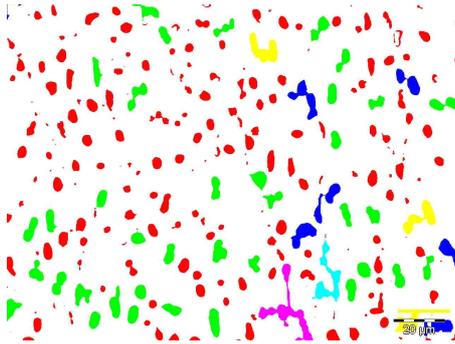
(a) Microstructure brute du matériau livré.



(b) Mesure de la phase α

À partir d'une billette fournie par l'entreprise Messier Bugatti Dowty, des échantillons cylindriques de diamètre 10 mm et de hauteur 15 mm ont été prélevés suivant l'axe de la billette. Ainsi plusieurs niveaux de déformations et de vitesse de déformation ont été réalisés dans le domaine α/β et β pour étudier la rhéologie de l'alliage et d'en déduire les paramètres rhéologiques à chaud tels que l'énergie d'activation Q et la sensibilité à la vitesse de déformation m .

Des études microstructurales en optique et en microscopie électronique à balayage ont été faites sur les échantillons post et pré traitement à différentes températures dans le domaine α/β et dans le domaine β pour évaluer l'évolution de la taille de grain mais aussi le pourcentage de la phase α qui a un impact important sur la contrainte d'écoulement du matériau.



(a) Microstructure avant déformation
recuit 6 h, 810 °C.



(b) Microstructure après déformation
recuit 6 h, 810 °C + $\epsilon = 1$.

La connaissance de ces paramètres expérimentaux nous permet d'entrevoir des simulations par éléments finis du comportement thermomécanique de l'alliage Ti 5553 afin d'optimiser les gammes de forgeage déjà existantes en Ti 5553.

Keywords :

Bibliographie

- [1] Y. COMBRES. *Propriétés du titane et de ses alliages*.
- [2] N. JONES, R.J. DASHWOOD, M. JACKSON, D. DYE. *Phase decomposition in Ti-5Al-5Mo-5V-3Cr*.
- [3] P. TARIN, ALONSO, J.M. BADIA, N.M. PIRIS. *Characterization of the $\alpha\beta$ transformation in a Ti-6Al-2Sn-6Mo (Wt %) alloy*. Décembre 2006.
- [4] G. LÜTJERING, J.C. WILLIAMS. *Engineering Materials and Processes Titanium*. Second Edition.

2. F. Willot, D. Jeulin.

- CMM, Mines ParisTech, Fontainebleau.

The nonlinear mechanical response of the Boolean model of spheres with porous or rigidly-reinforced inclusions and power law matrix

✉: {francois.willot,dominique.jeulin}@ensmp.fr

The effective and local response of an ideal random composite, the Boolean model of spheres, with a nonlinear powerlaw matrix, is investigated. Nonlinearity is parametrized by the law exponent $0 \leq n \leq 1$, with the extreme values $n = 0$ and $n = 1$ corresponding to a rigid perfectly-plastic and linear elastic matrix, respectively. Inclusions are either quasi-rigid or porous, whereas the matrix is either compressible or incompressible. Full-fields solutions are computed numerically using the FFT method, at any spheres volume fractions and nonlinearity exponent. The effect of nonlinearity on the effective behavior near the percolation thresholds, and on the representative volume element, are computed numerically.

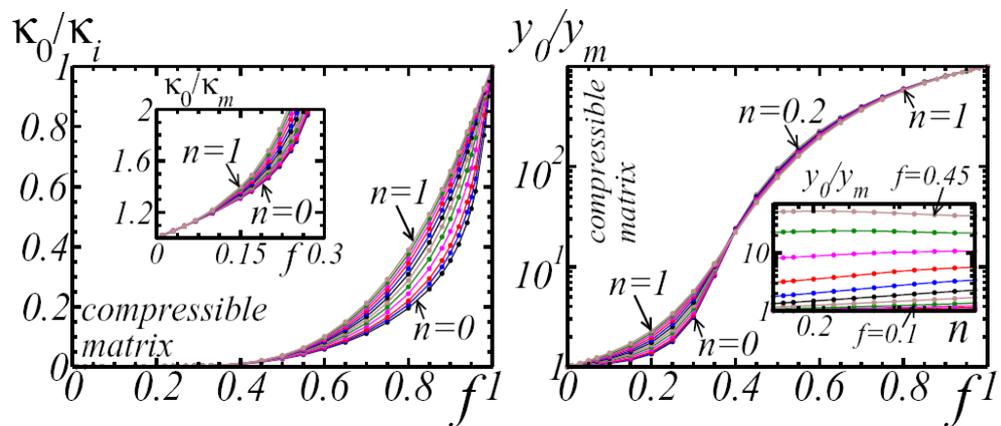


FIGURE 1. Effective bulk modulus κ_o and plastic yield stress σ_o in the rigidly-reinforced Boolean model (left and right resp.), as a function of the sphere volume fraction f , in linear and semi-log scale, at varying powerlaw exponent $n = 0, \dots, 1$ in the matrix. The matrix is compressible with bulk modulus $\kappa_m = 1$ whereas the spheres are quasi-rigid with bulk modulus $\kappa_i = 10^3$.

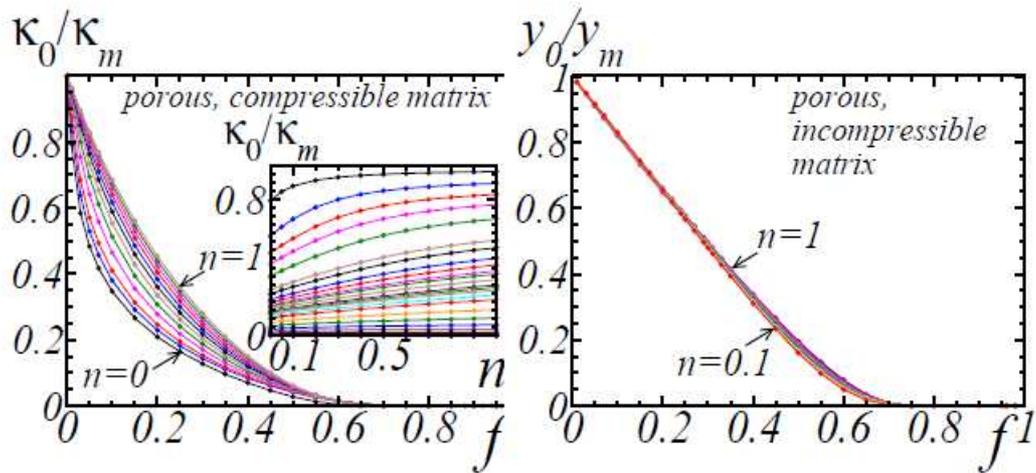


FIGURE 2. Effective bulk modulus κ_o and plastic yield stress σ_o in the porous Boolean model (left and right resp.), as a function of the sphere volume fraction f , in linear and semi-log scale, at varying powerlaw exponent $n = 0, \dots, 1$ in the matrix.

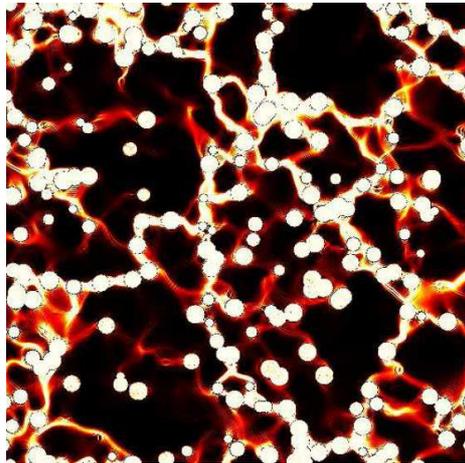


FIGURE 3. A 2D cut of the Von Mises equivalent deviatoric strain in a rigid-perfectly plastic, porous composite (high intensity values in yellow and white). Hydrostatic strain loading is applied.

Keywords :

Bibliographie

- [1] F. WILLOT, D. JEULIN. *Elastic behavior of composites containing Boolean random sets of inhomogeneities*, Int. J. Engineering Science 47 :313-824, 2010.

3. G. Kermouche, C. Langlade, J.M. Bergheau.

- LTDS, ENI, Saint-Étienne,
- LERMPS, UTBM, Belfort.

Investigation of mechanically transformed structures induced by repeated impacts on a C45 steel.

✉ : guillaume.kermouche@enise.fr

1. Introduction

Resistance to wear, fatigue or corrosion of materials is strongly linked to the microstructure and properties of material surfaces. Hence, the control and the optimisation of the surface microstructure and properties may improve in a significant way the service lifetime of materials. For example, It has been evidenced during the past ten years that nano-crystalline surface layers exhibit properties that are fundamentally different from their conventional polycrystalline counterparts, such as high hardness and better tribological properties. One way to obtain is to transform the original coarse-grained surface layer of a given bulk material into nano-sized grains. Indeed, The key point for realizing such superficial structures is to introduce in the bulk material a large amount of defects so that that its microstructures is transformed into nano-sized crystallites. Hence, processes creating severe plastic deformation near the material surface may lead to the generation of a nanostructured surface layer [1, 2, 3, 4, 5].

The aim of this present work is to investigate the mechanical phenomena that may lead to the initiation and growth of Mechanically Transformed Structures under localized repeated normal impact loadings. For that purpose a finite element analysis, specially developed to model high number repeated normal experiments, has been used. The input parameters of the FEA are based on a experimental study on a C45 steel. It is shown that a close cycle of plastic strain is induced locally in the zone where material transformation should happen during the stabilized impact regime (elastic-plastic shakedown). Similarly to the SMAT, the severe plastic deformation achieved after a given number of cycles may thus explain such material transformation. We also present a mechanism aiming to describe the growth of the Mechanically Attrited Zone (MAZ). The obtained MAZ size and shape appear to be in good agreement with the previous experimental results.

2. Experimental results

Micro impact tests with energy control have been performed using the impact tester developed in the LERMPS laboratory [6]. A rigid conical indenter, ended by a hemispherical tip electromagnetically accelerated is pushed onto the sample surface under normal incidence. The impacting tip is a Tungsten carbide cone with a semi-angle of 30° and a round apex of radius 450 μ m. The impact energy is about 4 mJ and the impact frequency is 20Hz. The impacts have been performed on a pearlitic AISI1045 steel. The grain size is about 20 μ m and the hardness is about 20Hv. After etching, surface observation of the indent reveals the presence of a new microstructure, easily distinguishable from the matrix (Fig 1). This zone that reacts differently under etching corresponds to a Mechanically Attrited Structure (MAS). The presence of a MAS is first noticed after 500 impacts. The Attrited zone is located under the surface in the center of the contact area. Scanning Electron Microscopy of the impact affected zone has also been performed after 5000 repeated impacts. The samples have been examined using the backscattering mode that makes possible to distinguish the various affected area. One may observe a good agreement between the results of Sekkal *et al.* [2] and the present result.



FIGURE 4. Left : sketch of the micro-impact tester. Right : cross-section of the indent zone after 5000 impacts on a titanium alloy (Sekkal *et al.* [2]) and on an AISI1045 steel.

3. Modelling the creation and the growth of the mas

The mechanically transformed structure obtained in the present study on the C45 steel has the same features than the TTS of Sekkal *et al.* [2], thus it should be also composed of nanograins. A FE analysis, note presented here, has also revealed that the zone where severe plastic deformations occur is inside the zone where the MAS has been experimentally observed. In this zone, the cumulated plastic strain increases at each impact and can reach very important values. This cumulative plastic deformation during the stabilized impact regime can be viewed as a local mechanical mixing of the material. When plastic deformation is high enough (high density of dislocations), nanocrystalline structures may be created by the recrystallisation mechanism suggested by Sauger *et al* [5] in the case of fretting tests. The MAS is very hard, thus, it will act as a new indenter on the region below, which will also be transformed into a MAS following the same mechanism. Consequently MAS grows progressively, starting from the surface. This mechanism has been implemented in the FE model developed previously : When the cumulated plastic strain p inside a finite element exceeds a critical value p_{MAS} , the element is transformed into a MAS. The MAS is assumed as a perfectly linear elastic solid with the same properties than those of the initial AISI1045 steel. The plastic strain threshold before the transformation of a point into a MAS being unknown, an arbitrary value of $p_{MAS} = 1.5$ has been chosen. The growth of the MAS is represented in Fig. 5. During the transient impact regime (impact number < 150), the contact area increases at each impact. When the stabilized impact regime is reached, the geometry of the contact remains constant, but the plastic deformation just under the indenter still increases until it reaches the critical value of 150 %. Then the created MAS acts as a new indenter on the material below. After a given number of cycle, the material below is transformed into a new MAS and acts as a new indenter. The shape of the MAS created is very close to the observed experimental shape (Fig. 5). According to this mechanism, the MAS grows during the transient impact regime and also during the stabilized impact regime. The kinetics of the MAS growth (MAS thickness vs number of impacts) is plotted on Fig 11 for different values of the plastic strain threshold : $p_{MAS} = 100\%$, $p_{MAS} = 150\%$ and $p_{MAS} = 200\%$. From a qualitative point of view, the kinetics of the MAS growth is well reproduced. The best agreement is obtained with $p_{MAS} = 200\%$. During the first 500 impacts, the MAS grows rapidly until it reaches a thickness of 100 m. As shown in Fig 10, the MAS grows both in the radial direction (length) and in the impact direction (thickness). After 500 impacts, the MAS length is stabilized. Only its thickness increases until it reaches a maximum value about 300 m (after 3000 or 5000 impacts depending the value of p_{crit}) which is in good agreement with the experimental results.

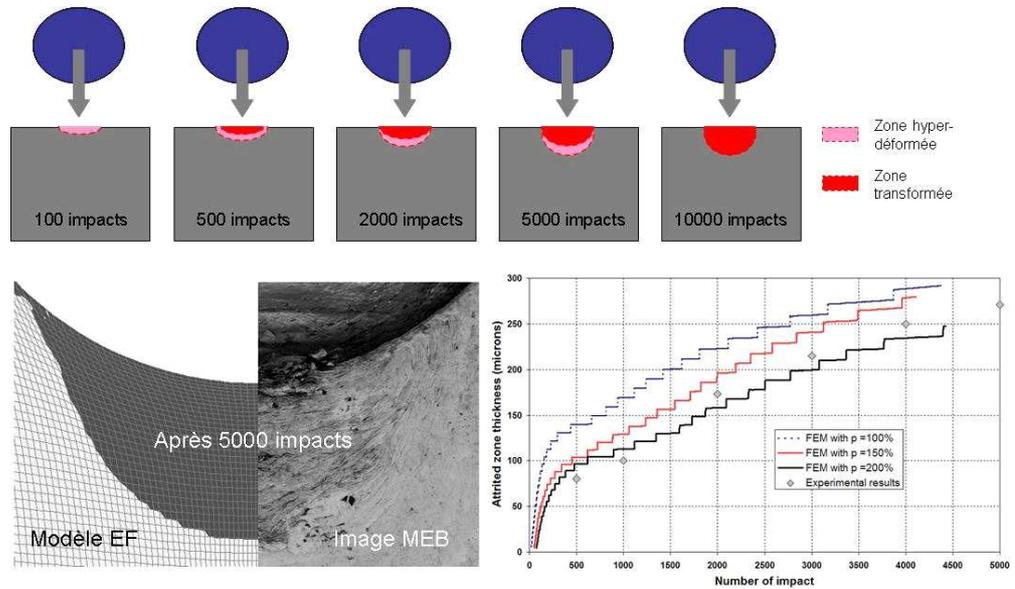


FIGURE 5. Left : sketch of the micro-impact tester. Right : cross-section of the indent zone after 5000 impacts on a titanium alloy (Sekkal *et al.* [2]) and on a AISI1045 steel.

Keywords : *Mechanical Attrition ; Impact ; Nano-sized grains ; Finite element analysis.*

Bibliographie

- [1] G. KERMOUCHE, G. PACQUAUT, C. LANGLADE, J.M. BERGHEAU. *Investigation of Mechanically Attrited Structures induced by repeated impacts on a AISI1045 steel*, Comptes Rendus Mécanique, 339 :1165-1189, 2011.
- [2] A.C. SEKKAL, C. LANGLADE, A.B. VANNES. *Tribologically transformed structure of titanium alloy (Ti6Al4V) in surface fatigue induced by repeated impacts*, Materials Science and Engineering A, 393(1-2) :140-146, 2005.
- [3] G. KERMOUCHE, A.L. KAISER, P. GILLES, J.M. BERGHEAU. *Combined numerical and experimental approach of the impact-sliding wear of a stainless steel in a nuclear reactor*, Wear, 263 : 1551-1555, 2007.
- [4] K. LU, J. LU. *Nanostructured surface layer on metallic materials induced by surface mechanical attrition treatment*, Materials Science and Engineering A, 375-377 :38-45, 2004.
- [5] E. SAUGER, L. PONSONNET, J.M. MARTIN, L. VINCENT. *Study of the tribologically transformed structure created during fretting tests*, Tribology. Int. 33(11) : 743-750, 2000..
- [6] S. LAMRI, C. LANGLADE, G. KERMOUCHE, V. MARTINEZ. *Estimation of the stress relief induced in CrN thin films by buckling*, Materials Science and Engineering A, 527 :7912-7919, 2010.

4. M. François, S. Van Wijk, M. Frabolot.

- LASMIS, UTT, Troyes et DIP, RENAULT, Reuil-Malmaison.

Analyse expérimentale des contraintes résiduelles et de la dureté dans un acier 27MnCr5–transformation de phase par grenailage.

✉ : manuel.francois@utt.fr

1. Contexte

Pour améliorer la durée de vie en fatigue des pignons de boîtes de vitesse automobile en acier 27MnCr5, on utilise une série de traitements successifs : carbonituration, trempe, grenailage de précontrainte. Le grenailage est donc effectué sur une microstructure constituée de martensite et d'austénite résiduelle et provoque une transformation partielle de cette dernière. L'étude présentée, essentiellement expérimentale, s'intéresse aux rôles respectifs de la transformation de phase et de la plasticité liée aux impacts de billes en fonction de la dureté des billes. Les réponses étudiées sont les gradients de dureté, d'austénite résiduelle et de contraintes résiduelles [1]. La dureté des billes a été choisie suivant deux modalités : d'une part des billes de dureté 640 HV, moins dures que le matériau issu de carbonituration et trempe (750 HV) et d'autre part des billes de dureté 800 HV, plus dures. Contraintes résiduelles et taux d'austénite résiduelle ont été évalués par diffraction des rayons X.

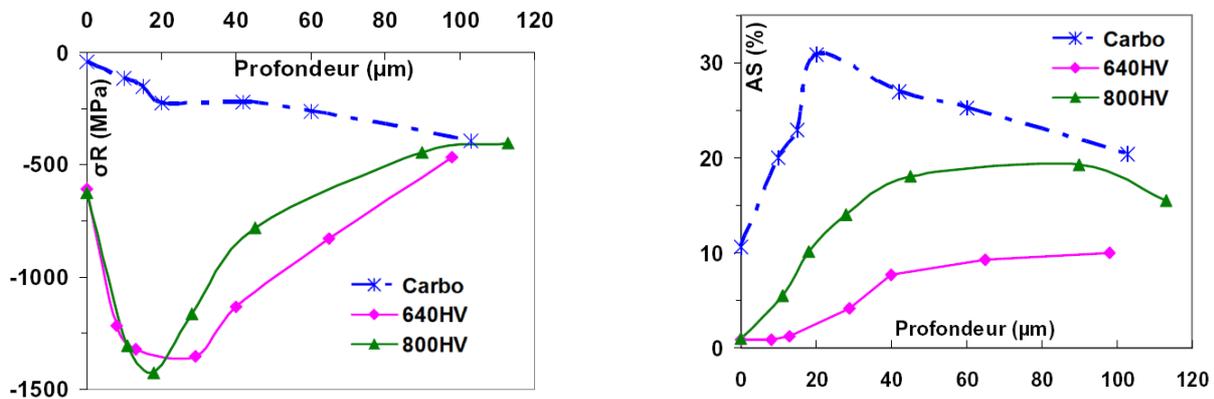


FIGURE 6. Évolution des contraintes résiduelles (gauche) et de la fraction volumique d'austénite résiduelle (droite), avant grenailage (étoiles); après grenailage avec des billes de dureté 640 HV (losanges) et de dureté 800 HV (triangles).

2. Contraintes résiduelles et austénite résiduelle

L'évolution des contraintes résiduelles est interprétée à l'aide d'un modèle basé sur les eigenstrains (déformations libres de contraintes) dont une première composante permet de décrire la variation de volume liée à la transformation de l'austénite [2] et une deuxième décrit les phénomènes de plastification (impact des billes et plasticité de transformation). Les résultats obtenus permettent de mettre en évidence que pour des billes moins dures que le matériau avant grenailage, la contribution de la transformation d'austénite est prépondérante. Par ailleurs, pour les billes moins dures, la profondeur mise en compression est légèrement supérieure. Cela peut être expliqué par le fait que ces billes se déforment davantage lors de l'impact et donc que la zone de déformation élastique (provoquant la transformation d'austénite) est plus profonde (effet de Hertz).

3. Dureté après grenailage et largeur des pics de diffraction

L'évolution de la dureté est décomposée en trois contributions :

- l'effet des contraintes résiduelles,

- l'effet du biphasage austénite-martensite et
- l'effet des modifications microstructurales de la martensite.

Le premier effet est estimé à partir des contraintes mesurées par DRX et d'équations proposées dans la bibliographie [3]. Le deuxième est évalué à l'aide d'une loi des mélanges en supposant que l'austénite ne s'écroute pas car elle se transforme en martensite sous l'effet des sollicitations. Ce qui reste est la dureté intrinsèque de la martensite modifiée par réarrangement (adoucissement) ou multiplication (durcissement) des dislocations.

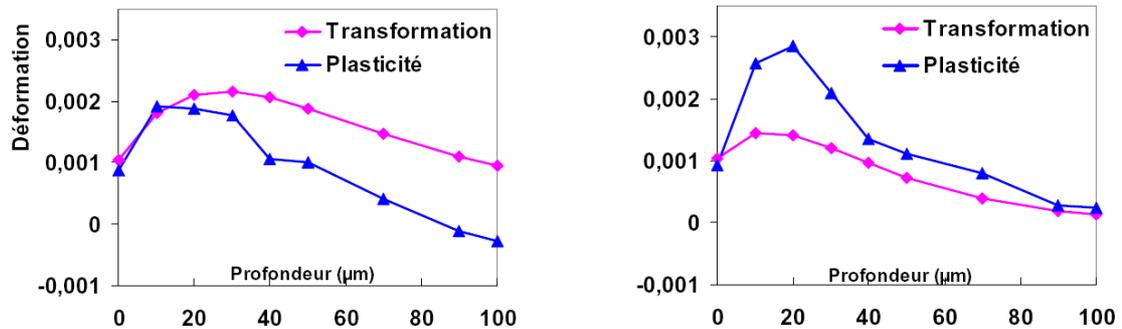


FIGURE 7. Évolution des eigenstrains en fonction de la profondeur pour des billes de dureté 640 HV (gauche) et de dureté 800 HV (droite) ; eigenstrain due à la plasticité totale (triangles) et due aux changements de volume liés à la transformation de l'austénite (losanges).

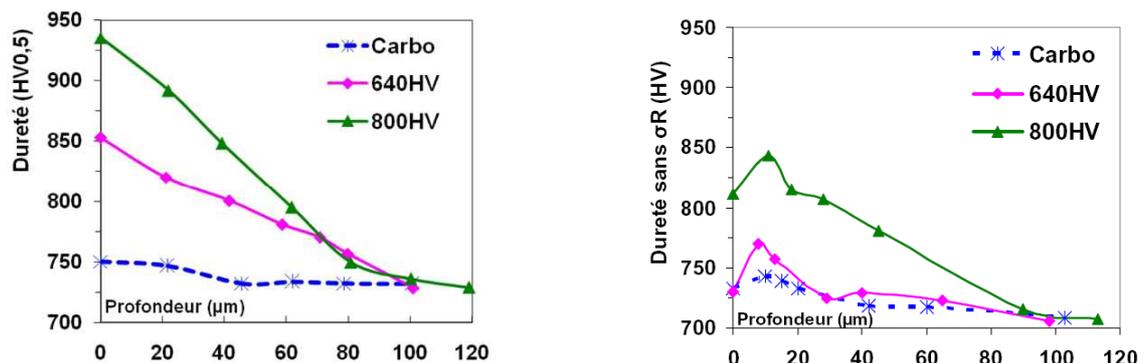


FIGURE 8. Évolution de la dureté en fonction de la profondeur avant grenailage (étoiles), après grenailage avec des billes de 640 HV (losanges) et avec des billes de 800 HV (triangles). À gauche, valeurs brutes mesurées et à droite, valeurs corrigées de l'effet des contraintes résiduelles.

On constate que l'effet des contraintes résiduelles sur la dureté finale est tout à fait significatif. Par ailleurs, la prise en compte du biphasage modifie fortement l'allure des courbes et montre que la dureté de la martensite est plus faible après grenailage qu'avant. L'évolution observée de la dureté de la martensite est cohérente avec l'évolution des largeurs de pics de diffraction obtenus pour la martensite et qui sont des indicateurs de la densité de défauts cristallins [4]. Le grenailage provoque simultanément un réarrangement des défauts occasionnés par la trempe et un écrouissage lors de la plastification due aux impacts.

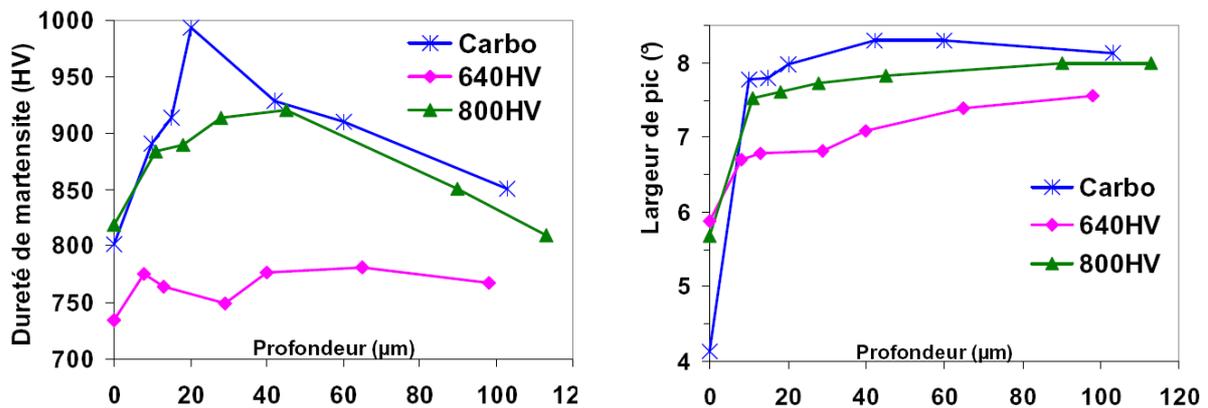


FIGURE 9. À gauche, évolutions de la dureté de la phase martensitique en fonction de la profondeur. À droite, évolutions des largeurs intégrales du pic de diffraction 211+112 de la martensite. Valeurs avant grenailage (étoiles), après grenailage avec des billes de 640 HV (losanges) et avec des billes de 800 HV (triangles).

Keywords : *Grenailage de précontrainte ; engrenages.*

Remerciements : *les auteurs remercient l'ANRT pour le financement de la thèse CIFRE de Mme Song Van Wijk.*

Bibliographie

- [1] S. VAN WIJK. *Grenailage de précontrainte d'un acier 27MnCr5 carbonitruré pour engrenages*, thèse de doctorat, Université de Technologie de Troyes, 2011.
- [2] M. VEAUX. *Étude expérimentale et prévisions par le calcul des cinétiques de transformation de phases, des contraintes résiduelles et des déformations lors de la transformation bainitique*, thèse de doctorat, INP Lorraine, 2003.
- [3] Y.H. LEE and D. KWON. *Measurement of residual stress effect by nanoindentation on elastically strained (100) W*, Scripta Materialia, 49 :459-465, 2003.
- [4] N. JI, J.-L. LEBRUN and J.M. SPRAUEL. *Analysis of broadened X-ray diffraction profiles : application to the characterization of carbon steels*, Materials science and engineering, A127 :71-77, 1990.

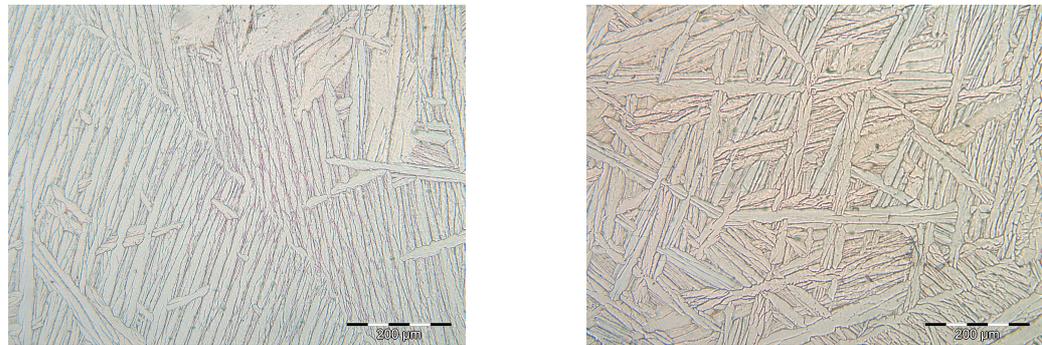
5. M. Thu Tran Frühauf, F. Montheillet, D. Piot, G. Damamme.

- Centre SMS, LCG, ENSMSE Saint-Étienne,
- CEA-DAM, Bruyères-le-Châtel.

Sélection des variants pendant le refroidissement des alliages de Zr : effet des contraintes de trempe sur une surface libre

✉ : {tran,montheillet,piot}@emse.fr

Les alliages de zirconium sont principalement utilisés dans l'industrie nucléaire, notamment pour les assemblages de combustibles dans les Réacteurs à Eau Pressurisée (REP). Ils sont choisis pour leur transparence aux neutrons ainsi que pour leurs bonnes propriétés mécaniques et leur bonne résistance à la corrosion. Ces alliages sont obtenus par le procédé fusion à l'arc (VAR), ils subissent ensuite une série de forgeages puis sont portés à haute température (vers 1050°C) pour une trempe. Cette trempe est répétée à plusieurs reprises lors du processus de fabrication des différents éléments de l'assemblage. Au cours de ces trempes, une transformation allotropique s'effectue et engendre une structure de type lamellaire, dite de Widmanstätten. Ces lamelles peuvent présenter deux morphologies : soit elles sont disposées parallèlement les unes aux autres, ce sont des " platelets parallèles " (voir Figure 1), soit elles sont enchevêtrées entre elles, elles constituent alors une structure en " vannerie " (voir figure 2).



(a) Platelets parallèles

(b) Structure en vannerie

FIGURE 10. Structures de type lamellaire dite de Widmanstätten.

Les platelets parallèles sont responsables de la mauvaise fragmentation des lamelles au cours de la mise en forme à chaud subséquente, ce qui est néfaste pour le produit final. Il est donc important de pouvoir quantifier les caractères en vannerie et platelets parallèles à certaines étapes de la fabrication. Outre l'aspect morphologique, le zirconium présente deux structures cristallographiques. Une structure hexagonale compacte (phase β) à température ambiante, et une structure cubique centrée (phase α) au-dessus de la température de transition qui est de 865 °C. La transformation $\beta \rightarrow \alpha$ s'effectue selon les relations d'orientation de Burgers. Le plan 110 β de la phase β et le plan 0001 α de la phase α doivent être parallèles en maintenant les directions de la phase β et α de la phase β parallèles. Un variant est une orientation spécifique de la phase α . Etant donné qu'il y existe 6 plans 110 β , il existe donc 6 variants engendrés par chacun de ces plans. De plus, lors de la transformation $\beta \rightarrow \alpha$ l'angle entre les grandes diagonales dans le plan 110 β , étant de 70°32', se réduit à 60°. Cette diminution entraîne une rotation d'environ 5° autour de l'axe c de la phase α , dans un sens ou dans l'autre. De ce fait, il existe deux orientations légèrement différentes pour les lamelles α que l'on appelle des variants jumeaux. En résumé, un grain β peut donner 12 variants différents. Les propriétés des alliages possédant une structure cristalline hexagonale, tels que le zirconium et le titane, dépendent fortement de leur texture cristallographique. Il est proposé ici une étude sur la sélection des variants dans l'alliage Zircaloy-4 à l'aide d'une analyse EBSD. Pour cela, plusieurs

cartographies EBSD ont été acquises. Dans chacune d'elles, on repère chacun des ex-grains ? afin de quantifier les fractions des variants présents. Après les traitements thermiques, on repère de nouveau ces ex-grains ? afin d'étudier l'influence de la vitesse de refroidissement sur la sélection des variants. Les résultats expérimentaux sont comparés à un calcul analytique de la sélection des variants sous l'effet d'une contrainte thermo-élastique isotrope dans le plan de l'observation (surface libre de l'échantillon). La suite de cette étude consistera à comprendre la sélection des variants sous l'effet d'une déformation imposée sur une éprouvette de traction pendant la transformation de phases.

6. T. Otsuka, R. Brenner, B. Bacroix.

- LSPM, Université Paris 13,
- IJRA, Université Paris 6.

Numerical modeling of transformation plasticity in steels by considering Greenwood-Johnson effect

✉ : otsuka.takayuki@nsc.co.jp

1. Introduction

During phase transformation of steels, when stress is applied, significant plastic strain can be observed even if the applied stress is smaller than the yield stress. The phenomenon is called Transformation Plasticity or TRansformation Induced Plasticity (TRIP). Transformation plasticity is known to play an important role during steel producing processes such as quenching. In this paper, a micromechanical model using discrete Fast Fourier Transformation (FFT) [1] is developed to describe the TRIP phenomenon. Instead of introducing artificial transformation plastic strain term, which is widely used for this kind of problem, volume expansion by phase transformation-Greenwood-Johnson effect [2]-is taken into account. It allows to evaluate the transformation plasticity and mechanical behaviour during phase transformation. The numerical scheme is assessed by comparing with Leblond's mathematical model [3].

2. Governing equations

2-1. Constitutive model - The local strain can be divided into average and fluctuation terms. When we assume periodic boundary conditions, the fluctuation term will be periodic as well. In this case, the local problem can be solved efficiently by FFT [1]. This numerical scheme has been revealed to be much more efficient than other methods like FEM in terms of computational cost. For elasto-plastic materials, the incremental constitutive relation can be thus transformed using polarisation tensor $\boldsymbol{\tau}$, such that

$$\dot{\sigma}_{ij} = C_{ijkl}(\mathbf{x})(\dot{\epsilon}_{kl} - \dot{\epsilon}_{kl}^p) \quad , \quad \dot{\sigma}_{ij} = C_{ijkl}^o(\dot{\epsilon}_{kl} - \dot{\epsilon}_{kl}^p) + \dot{\tau}_{ij} \quad (6.1)$$

where $\boldsymbol{\epsilon}$ is total strain tensor, $\boldsymbol{\epsilon}^p$ is plastic strain tensor and $\mathbf{C}(\mathbf{x})$ and \mathbf{C}^o are elastic stiffness tensor of local and homogeneous reference media respectively. This method makes use of the equivalence between a heterogeneous elastic problem and a homogeneous one with polarisation tensor. In addition to elastic and plastic strain, thermal and transformation dilatation $\boldsymbol{\epsilon}^m$ is to be considered as following equation.

$$\dot{\sigma}_{ij} = C_{ijkl}^o(\dot{\epsilon}_{kl} - \dot{\epsilon}_{kl}^p - \dot{\epsilon}_{kl}^m) + \dot{\tau}_{ij} = C_{ijkl}^o(\dot{\epsilon}_{kl} - \dot{\epsilon}_{kl}^p) + \dot{\tau}_{ij}' \quad (6.2)$$

This generalised equation can be solved exactly as the same manner as the reference [1].

2-1. Phase transformation model - In this study, diffusive transformation is considered. At the beginning of the calculation, several new phase seeds are randomly distributed throughout the calculation region. After the germination, the new grains start to grow isotropically with time. For the sake of simplicity, an intermediate zone, where volume fraction of new phase ξ takes values between 0 and 1, is considered. Within this zone, transformation strain can be expressed as follows

$$\dot{\epsilon}_{ij}^m = \beta \dot{\xi} \delta_{ij} \quad (6.3)$$

where β is a coefficient of transformation expansion.

3. Calculation results and discussions

Simulations have been done with 100 new grain seeds out of 100 parent phase grains of polycrystalline materials within 64^3 pixels cubic space. The initial orientation of each grain has been set randomly, whereas the product phase grains take orientations according to Kurdjumov Sachs relation. The materials

component is equivalent to that of carbon steel at about 600 °C. The parent phase is Austenite (fcc) and the product phase is Ferrite (bcc). Fig. 11 shows transformation plastic strain under several applied uniaxial tension stresses. Transformation plastic strain can be calculated by subtracting transformation strain from classic plastic strain.

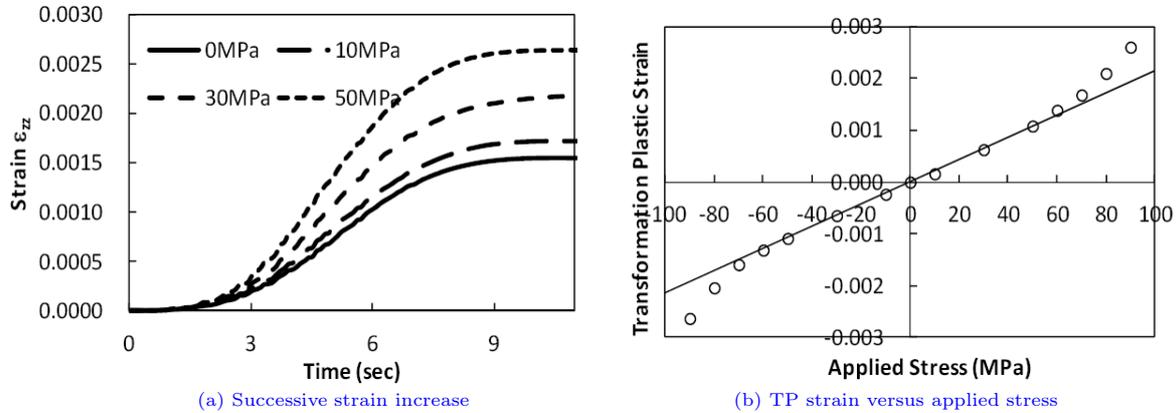


FIGURE 11. Transformation plastic strain under several applied stresses.

One can confirm the linear relationship between applied stress and transformation plastic strain under relatively small (about a half of the yield stress of parent Austenite phase) stresses. According to the simulation, there is no significant difference between tensile and compressive stress. The proportional constant is $2.2 \times 10^{-5} (\text{MPa}^{-5})$ by Fig. 11, while it is $2.5 \times 10^{-5} (\text{MPa}^{-5})$ by Leblond's model. This appears to be a good quantitative agreement. In contrast, for large applied stress, this proportionality does not hold. The development of significant stress heterogeneities which could be responsible of this nonlinearity at high stress is currently investigated.

4. Conclusion

A micromechanical model using discrete FFT has been developed. This numerical scheme is efficient and accurate for calculating transformation plasticity arising from Greenwood-Johnson mechanism. It compares successfully with Leblond's model, which performance has been already confirmed by experiments. For further developments, this model will be used to determine the texture effect on transformation plasticity, which is formed during rolling and recrystallizing process.

Keywords : *Steel; Transformation Plasticity; Greenwood-Johnson; FFT.*

Bibliographie

- [1] H. MOULINEC, P. SUQUET. *A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure*, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., 157 :69-94, 1998.
- [2] G. W. GREENWOOD, R. H. JOHNSON. *The Deformation of Metals under Small Stresses during Phase Transformations*, Proc. Roy. Soc. London, 283A :403-422, 1965.
- [3] J.-B. LEBLOND,, J. DEVAUX, J.-C. DEVAUX. *A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure*, Int. J. Plasticity, 5 :551-572, 1989.

7. V. de Rancourt, E. Busso, S. Forest, B. Appolaire, K. Ammar.

• CdM P.M. Fourt, Mines ParisTech, Evry.

Multiphysical Coupling in Heterogeneous Media using the phase field method.

✉ : vrancourt@ensmp.fr

The phase field method emerged in the 60s with the work of Cahn and Hilliard [2] to study moving interface problems. This “diffuse interface“ method relies on the introduction of continuous field variable φ_i for the identification of phases i . The interface energy will be taken into account by a gradient energy term into the Helmholtz free energy :

$$\Psi(c, \varphi, \nabla\varphi, \xi^e, \alpha) = \Psi(c, \varphi, \xi^e, \alpha) + \frac{\beta}{2} \nabla\varphi^2 \quad (7.1)$$

From the framework offered by thermodynamics, multiphysics coupling is possible in the most general case. Nowadays, the field of research on multiphysics simulations is wide open particularly for cases where a description of inhomogeneous materials undergoing phase transformations is of interest [1]. The phase field method is a powerful tool to address such problems hence the growing interest for it in the scientific community.

In the present work, the case of stress-corrosion-cracking is studied. Therefore a coupling between mechanics and oxidation is to be found. It will be then assumed that the contribution for each phenomenon into the free energy can be separated .:

$$\Psi(c, \varphi, \nabla\varphi, \xi^e, \alpha) = \Psi_{mechanics}(c, \varphi, \xi^e, \alpha) + \Psi_{chemistry}(c, \varphi) + \frac{\alpha}{2} \nabla\varphi^2 \quad (7.2)$$

Throughout this work, the model will be enriched step-by-step, first with only a chemical behavior and then with linear elasticity and plasticity. Different homogenisation schemes will be used as an interpolation method to estimate the values of the free energy in the diffuse interface for mechanical and chemical behavior of two-phases materials.

The first case study will be a simplified model of oxidation : the oxide front will be taken as the interface and its motion will be governed by a Ginzburg-Landau evolution law. The physical meaning of the metal-oxide interface length using finite-element remeshing tools will be discussed. Some of the questions to be answered are : How thin the interface can be and how fine the mesh should be in the interface ?

The second case study will be the chemical-mechanical equilibrium of a precipitate embedded in a matrix. Coherent field diagram will be computed and the interplay between mechanics and diffusion will be discussed briefly.

Keywords : *Moving interface ; Ginzburg-Laundau, Phase-field ; Oxidation.*

Bibliographie

- [1] K. AMMAR. *Modelling and Simulation of Phase Transformation-Mechanics coupling Using a Phase Field Method*, PhD Thesis, Mines ParisTech, 2010.
- [2] J.W. CAHN, J.E. HILLIARD. *Free Energy of Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy*, The Journal of chemical physics, 28 :258-, 1958.

8. L. Siad, W.K. Liu.

- Université de Reims, Reims et DME,
- Northwestern University, Evanston, IL.

Un modèle de comportement avec 3^{me} invariant des contraintes pour endommagement ductile des matériaux

✉ : larbi.siad@univ-reims.fr, liu@northwestern.edu

Un modèle d'endommagement ductile pour matériaux plastiques poreux est utilisé dans cette étude pour simuler numériquement le comportement à la rupture d'éprouvettes axisymétriques lisses et entaillées ainsi que le cisaillement simple d'une pièce métallique. Le potentiel plastique de ce modèle, dépendant du déterminant des contraintes et généralisant le potentiel de Gurson, est celui proposé récemment par McElwain *et al.* (2006). Les résultats fournis par les modèles de comportement MRW et celui bien connu GTN se distinguent en phase finale de rupture.

La rupture des matériaux ductiles par nucléation, croissance et coalescence de microcavités est bien décrite par le modèle de comportement GTN et ses différentes extensions parmi lesquelles le modèle GLD [1, 2]. Cependant, par construction, le modèle GTN ne peut prédire de croissance du volume des microcavités sous faible triaxialité. L'observation fine d'éprouvettes en acier à très haute résistance rompues lors d'essais d'impact menés par Cowie *et al.* [3] ont mis en évidence une croissance du volume des microcavités sous une sollicitation de cisaillement pur. En outre, des calculs de cellules cubiques hétérogènes truffées de *minuscules* inclusions réparties aléatoirement et soumises à des contraintes de cisaillement ont confirmé ce constat [?]. Dans le but de se conformer à cette observation expérimentale et d'améliorer le modèle GTN, des extensions basées sur des considérations phénoménologiques ont été récemment proposées (*e.g.*, [6]. Formellement, selon leur auteurs, ces extensions sont à rattacher à la prise en compte dans le modèle de comportement du troisième invariant des contraintes.

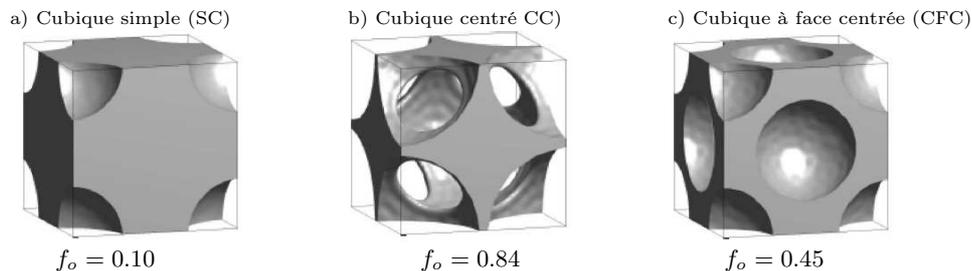


FIGURE 12. Trois cellules de base pour matériaux plastique poreux [4].

Par ailleurs, suite à de fort nombreuses simulations numériques (EF et méthodes des moindres carrés) des réponses de trois microstructures poreuses représentatives d'un matériau poreux à des sollicitations macroscopiques quelconques, McElwain *et al.* [4] ont proposé un potentiel plastique généralisant le critère de Gurson. Ce potentiel plastique valable pour une large gamme de valeurs de la porosité a la particularité de dépendre linéairement du troisième invariant des contraintes. Dans cette étude, le *soi-disant* modèle MRW est identique au modèle GTN à l'exception du potentiel plastique. Il consiste en (i) un critère de plasticité (celui de McElwain *et al.* [4]) dépendant du type de microstructure et, comme attendu, de la porosité; (ii) une loi d'écoulement plastique associée au critère par la règle de normalité; et (iii) de deux lois d'évolution pour chacun des paramètres internes (porosité et écrouissage).

Le modèle MRW a été implanté dans un code aux éléments finis en optant pour le schéma implicite d'Euler pour l'intégration des équations constitutives. La validation de l'implantation est effectuée sur des cas tests standards (réponses de la brique à 8 nœuds et un point d'intégration) à diverses sollicitations. À titre d'applications, les problèmes de la striction d'une éprouvette axisymétrique lisse, de la rupture d'éprouvettes axisymétriques entaillées ainsi que le cisaillement simple à plan de cisaillement fixé d'une

pièce métallique avec les modèles MRW et GTN pour lois de comportement sont traités. Les résultats des simulations montrent des différences dans la phase d'adoucissement (Figs. 14 et 15).

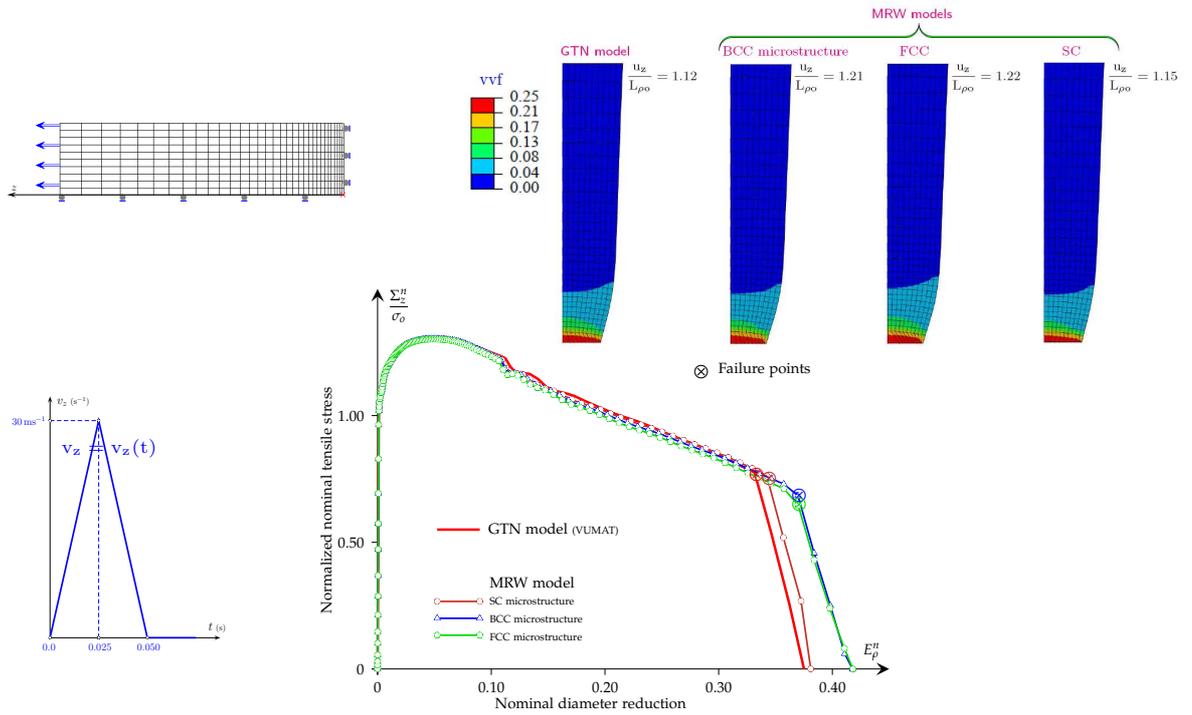


FIGURE 13. Simulation de la striction d'une barre lisse. Comparaison des prédictions des modèles MRW (SC, BCC and FCC) et GTN.

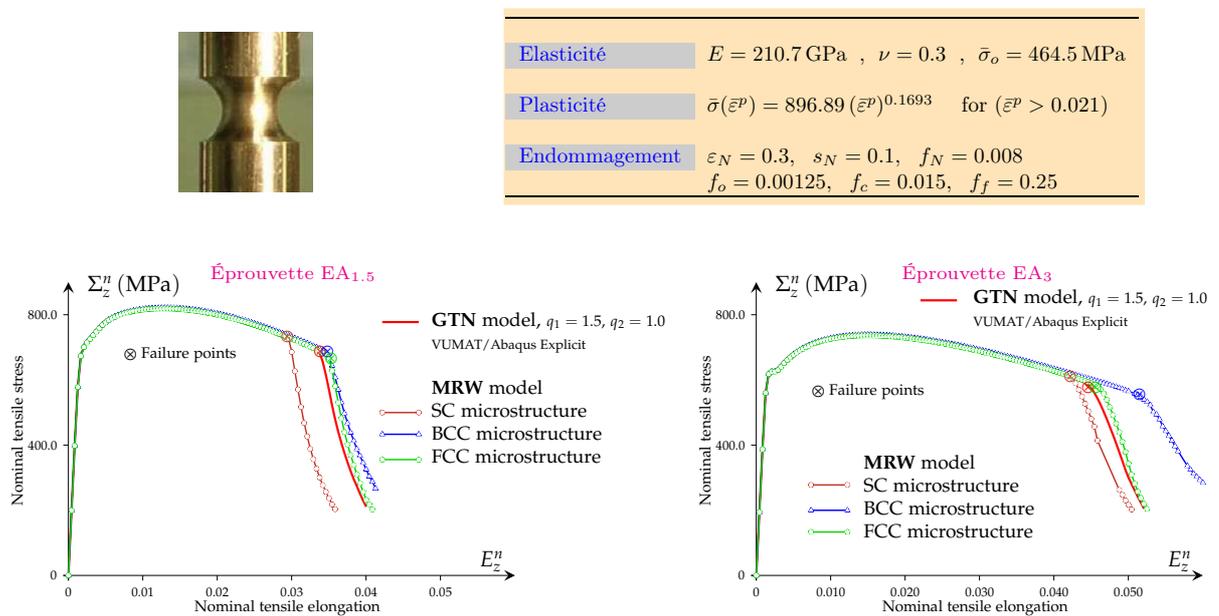


FIGURE 14. Simulation de traction d'éprouvettes entaillées. Comparaison des prédictions des modèles MRW (SC, BCC and FCC) et GTN.

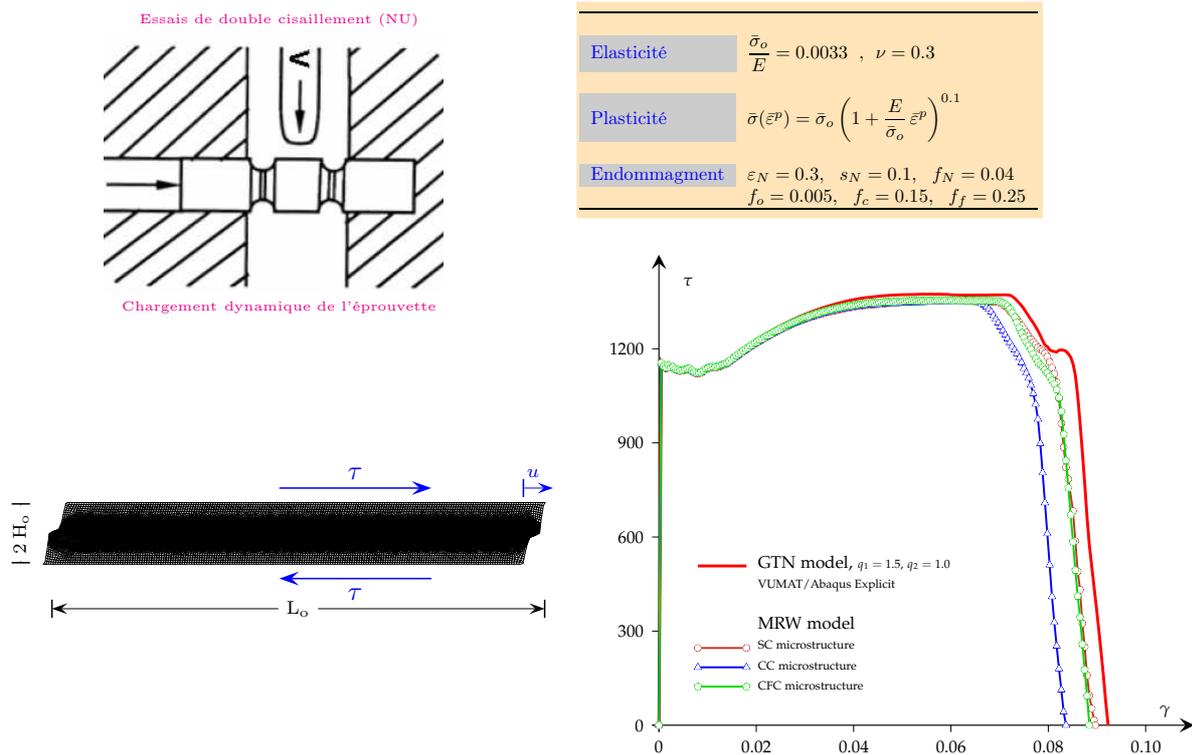


FIGURE 15. Tentative de simulations des essais de cisaillement de Cowie *et al.* [3].

Keywords : Endommagement ductile, microstructure, porosité, troisième invariant, EF explicites.

Bibliographie

- [1] A.A. BENZERGA, J.-B. LEBLOND. *Ductile Fracture by Void Growth to Coalescence*, Advances in Applied Mechanics, 44 :169-305, 2010.
- [2] J. BESSON Continuum models of ductile fracture : A review. Int. J. Damage Mechanics., 19(1) :3-52, 2010.
- [3] J.G. COWIE, M. AZRIN, G.B. OLSON. *Microvoid formation during shear deformation of ultrahigh strength steels*, Metallurgical Transaction A, 20A :143–153, January 1989.
- [4] D.L.S. McELWAIN, A.P. ROBERTS, A.H. WILKINS. *Yield criterion for porous materials subjected to complex stress states*, Acta Materialia, 54, 2006.
- [5] C. McVEIGH C., F. VERNEREY, W.K. LIU, B. MORAN, and G. OLSON An interactive micro-void shear localization mechanism in high strength steels. J. Mech. Phys. Solids, 55(2) :225-244, 2007.
- [6] NAHSHON K., HUTCHINSON J. Modification of the gurson model for shear failure. European Journal of Mechanics A/Solids, 27 :1-17, 2008.
- [7] L. SIAD. *Ductile damage analysis based on a J₃-GTN-like model*, Journal of Multiscale Modelling, 3 :4, 1–27, 2011.

9. J. Escoda, F. Willot, D. Jeulin, J. Sanahuja, C. Toulemonde.

- CMM, Mines ParisTech, Fontainebleau and DMMC,
- EDF R&D, Moret-sur-Loing.

3D random multiscale polyhedra model and elastic behaviour of concrete microstructure.

✉ : {julie.escoda,francois.willot,dominique.jeulin}@ensmp.fr
{julien.sanahuja,charles.toulemonde}@edf.fr

Concrete is a genuinely complex multi-scale material made up of aggregates, voids and matrix (cement paste). Due to the diversity of its constituents, concrete is also a material with a large range of properties. To optimize the properties of concrete for a given application, it is necessary to use modeling techniques. They help us estimate the long-term behavior, such as creep and mechanical properties. This work focuses on developing a proper and realistic concrete microstructure model [3].

Aggregates are modelled with 3D multiscale random polyhedra. Three-scale Poisson random polyhedra were found to reproduce the size distribution of a standard concrete formulation. A specific algorithm was developed to generate populations of Poisson polyhedra [1]. Large scale three-dimensional packings of the multiscale polyhedra, reproducing the input granulometry and volume fraction, are generated. Pores are introduced as a Boolean model of spheres, using 3D microtomographic images for model identification. After discretization of the simulations (typically cubes with 15cm edge and 0.15mm per voxel), full field simulations of the elastic fields are obtained by means of iterations of the Fast Fourier Transform method [2], for various contrasts of the components. From the fields, concrete elastic properties are estimated by homogenization. In addition to a real concrete, some artificial formulations are studied by numerical simulation

Keywords : *Poisson polyhedra ; Homogenization ; Elastic behavior*

Bibliographie

- [1] J. ESCODA, F. WILLOT, D. JEULIN. *Simulation of 3D granular media by multiscale random polyhedra*, Proc. ICS13, Beijing, October 19-23, 2011.
- [2] J. ESCODA, D. JEULIN, F. WILLOT, J. SANAHUJA, C. TOULEMONDE. *Estimation of local stresses and elastic properties of a mortar sample by FFT computation of fields on a 3D image*, Cement Concrete Res., 41 :542-556, 2011.
- [3] J. ESCODA, D. JEULIN, F. WILLOT, J. SANAHUJA, C. TOULEMONDE. *Modélisation morphologique et micromécanique 3D de matériaux cimentaires*, Thèse de Doctorat, Mines ParisTech, 30 Avril 2012.

10. Y. Ben Ammar, M. Darrieulat.

• Centre SMS, LCG, ENSMSE Saint-Étienne.

Modélisation du plissement des lamelles du Zircaloy-4 sous l'effet d'une contrainte uniaxiale.

✉ : {benammar,darrieul}@emse.fr

Le Zircaloy-4 est un alliage de zirconium employé dans l'industrie nucléaire comme matériau de gainage du combustible nucléaire à cause de sa faible section de capture des neutrons et sa bonne résistance à la corrosion. La fabrication des tubes de gainage fait intervenir de multiples étapes de mise en forme entrecoupées de trempes et de recuits afin d'optimiser les propriétés d'emploi en ajustant la microstructure ainsi que la texture cristallographique du matériau. Avant d'être filé sur aiguille, qui constitue la dernière opération de traitement thermomécanique, le matériau est homogénéisé en phase β puis trempé. La microstructure de trempe est lamellaire dite de Widmanstätten. Cette dernière est caractérisée par des grandes colonies de lamelles parallèles de même orientation cristallographique et des lamelles enchevêtrées dites « panier tressé » (Figure 16 (a)). Sous sollicitation uniaxiale, la fragmentation de ce type de microstructure est sensible à l'orientation de l'axe c des grains par rapport à la direction de compression [1]. En effet, les colonies de lamelles parallèles qui ont un axe c proche de la direction de compression se plissent, tandis qu'autres grains qui ont un axe c perpendiculaire à la direction de compression ne semble pas affectés par le chargement (Figure 16 (b)).

Le but de ce travail est de comprendre, à travers une modélisation basée sur un modèle de plasticité cristalline, comment évolue une colonie de lamelles parallèles (plissement, déformation) au cours d'une compression uniaxiale en haut domaine α (750 °C) en fonction de son orientation cristalline et en particulier de l'orientation de son axe c par rapport à la direction de compression.

La modélisation est réalisée sous Abaqus en utilisant une subroutine Umat dans laquelle la loi de comportement est programmée en langage Fortran. La subroutine Umat correspondante, écrite initialement par Huang [2] pour modéliser des monocristaux de structure cubique, a dû être adaptée dans le cadre de ce travail aux matériaux hexagonaux.

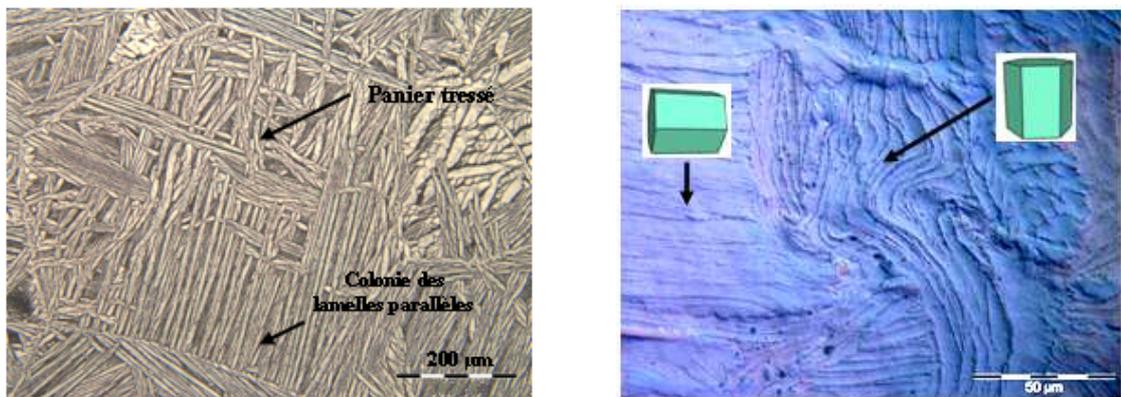
Dans chaque incrément de calcul, le programme commence par calculer le facteur de Schmid symétrique et puis la cission résolue critique pour chaque système de glissement et par suite calcule la vitesse de cisaillement sur chaque système de glissement selon la formule suivante [3] :

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_o \left(\frac{\tau_r^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right)^{\frac{1}{m}} \text{sgn}(\tau_r^{(\alpha)}) \\ \\ \text{Si } \left(\frac{\tau_r^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right) \geq 1 \implies \dot{\gamma}^{(\alpha)} \neq 0 \\ \\ \text{Si } \left(\frac{\tau_r^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right) < 1 \implies \dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0 \end{array} \right. \quad (10.1)$$

où $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ est la vitesse de cisaillement sur le système glissement α , $\dot{\gamma}_o$ est une vitesse de référence, $\tau_r^{(\alpha)}$ est la cission résolue sur le système de glissement α , $g^{(\alpha)}$ est un paramètre qui caractérise l'évolution de l'écroutissage sur le système de glissement α . Initialement il est égal à la cission résolue critique du système. m est un paramètre caractérisant la sensibilité à la vitesse de déformation.

Ainsi, un système n'est actif que lorsque le rapport $\left(\frac{\tau_r^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right)$ est supérieur à 1. Lors de la modélisation, les lamelles sont considérées comme des plaques de même orientation cristallographique avec un rapport de forme (hauteur/épaisseur) élevé. Ces plaques sont en contact et peuvent glisser les unes sur les autres au cours du plissement. En effet, les joints de lamelles renferment des précipités à base de chrome et de fer de

type $Zr(Fe, Cr)_2$ qui se déposent selon les plans prismatiques de la maille hexagonale des lamelles [4]. Une telle répartition va affaiblir la résistance mécanique dans cette région et un cisaillement inter-lamellaire peut se manifester au cours de la déformation [5]. Trois familles de systèmes de glissement sont prises en compte : les systèmes pyramidaux $\langle c + a \rangle$ de deuxième espèce (12 systèmes), les systèmes prismatiques (3 systèmes) et les systèmes basaux (3 systèmes). Les paramètres d'écroutissage de chaque système ont été tirés des travaux d'Akhtar [6]. Les cosinus directeurs des vecteurs représentant respectivement les normales aux plans de glissement et les directions de glissement de chaque système de glissement sont exprimés initialement dans un repère local lié au cristal ($e_{1c} = \langle -12 - 10 \rangle$, $e_{2c} = \langle -1010 \rangle$ et $e_{3c} = \langle 0001 \rangle$). Le passage du repère local (e_{1c}, e_{2c}, e_{3c}) au global (X, Y, Z) est régi par trois angles d'Euler ($\varphi_1, \Phi, \varphi_2$) permettant ainsi de caractériser l'orientation cristalline des lamelles par rapport à la direction de compression en faisant varier l'axe c dans leurs plans.



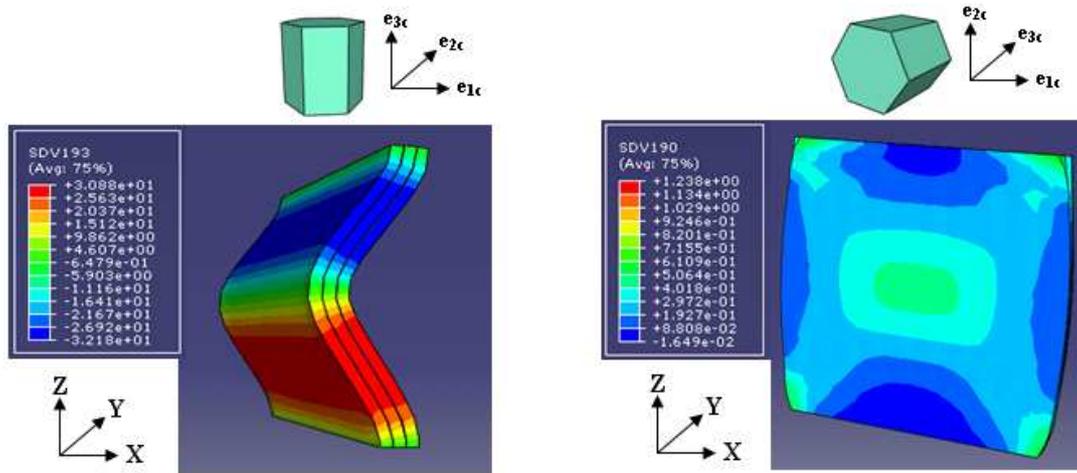
(a) Microstructure de Widmanstätten

(b) La direction de compression est verticale

FIGURE 16. Microstructure de Widmanstätten (a) et hétérogénéité de la déformation (b).

Le modèle a ensuite été appliqué à différents cas d'orientation ; voici quelques conclusions :

- Le plissement des lamelles est dû à une imperfection géométrique (rapport hauteur/épaisseur élevé). L'orientation cristalline des lamelles ne semble pas jouer un rôle dans le déclenchement du phénomène.
- Quand l'axe c des lamelles est proche de la direction de compression et avant plissement, seuls les systèmes pyramidaux sont actifs. Une fois le plissement est déclenché, une rotation importante de corps rigide dans le plan du plissement $\Omega_{XZ} \Delta t$ est observée. Cette dernière a tendance à réorienter les systèmes de glissement initialement inactifs (basaux et prismatiques) vers des orientations favorables au glissement (Figure 17 (a)).
- Quand les lamelles sont couchées (axe c perpendiculaire à la direction de compression), deux cas se présentent :
 - a) L'axe c est contenu dans le plan des lamelles et le plan de base est orienté selon l'épaisseur des lamelles. Dans ce cas, le plissement est observé, les contraintes sont faibles et le glissement se fait sur les systèmes prismatiques plus favorablement orientés que les pyramidaux.
 - b) L'axe c est orienté selon l'épaisseur des lamelles et le plan de base est contenu dans le plan des lamelles. Dans ce cas, le plissement n'est pas observé (Figure 17 (b)) et les contraintes sont faibles. La colonie s'étale selon le plan des lamelles.



(a) Rotation cumulée $\Omega_{XZ} \Delta t$ (degrés) engendrée par le plissement : $\varphi_1 = 0^\circ$, $\Phi = 0^\circ$ et $\varphi_2 = 0^\circ$.

(b) Déformation cumulée γ_{prism} sur les trois systèmes prismatiques : $\varphi_1 = 90^\circ$, $\Phi = 90^\circ$ et $\varphi_2 = 0^\circ$.

FIGURE 17. Résultats des simulations numériques. La direction de compression est verticale (Z).

Keywords : *Zircaloy-4 ; Colonie des lamelles parallèles ; Plissement ; Plasticité cristalline ; Umat.*

Bibliographie

- [1] T. R. BIELER, S.L. SEMIATIN. *The origins of heterogeneous deformation during primary hot working of Ti-6Al-4V*, International Journal of Plasticity, 18(9) : 1165-1189, 2002.
- [2] Y. HUANG. *A user- material subroutine incorporating single crystal plasticity in the Abaqus finite element program*, Harvard University, Cambridge, June 1991.
- [3] R. ASARO. *Micromechanics of crystals and polycrystals*, Advances in Applied Mechanics, 23 :1-, 1983.
- [4] J. CRÉPIN. *Étude des mécanismes de déformation et d'endommagement du Zirconium grade 702 traité β* , thèse de doctorat, École Polytechnique, Palaiseau, 1995.
- [5] N. VANDERESSE. *Morphologie et déformation à chaud de microstructures lamellaires dans les alliages de zirconium et de titane*, thèse de doctorat, ENSMSE, Saint-Étienne, 2008.
- [6] A. AKHTAR. *Compression of zirconium single crystal parallel to the c-axis*, Journal of Nuclear Materials, 47 :79-86, 1973.

11. H. Altendorf, F. Willot, D. Jeulin.

• CMM, Mines ParisTech, Fontainebleau.

Application of Virtual Material Design on a Glass Fiber Reinforced Polymer.

✉: {helen.altendorf,francois.willot,dominique.jeulin}@ensmp.fr

Keywords : *Virtual Material Design ; Force-biased Fiber Packing ; Glass Fiber Reinforced Polymer ; Fiber Quantification*

The various use of fiber-reinforced composites, for example in the enclosures of planes, boats and cars, generates demand for a detailed analysis of these materials. We developed a quantification method for fibrous materials, that can be applied on binary or directly on gray value images and produces local analysis of the fiber radius and orientation [1]. Furthermore, it is possible to separate single fibers based on binary images with a good resolution (as it is the case for glass fibers). This separation is based on a tracking algorithm from probability maps, indicating the fiber cores in non crossing regions [2].

From this knowledge, we can fit a stochastic model by estimating the model parameters from the separated fibers. As stochastic model, we make use of the force-biased packing of bended fibers, represented as chains of balls. Fibers are initiated with a random walk producing a softcore system of ball chains and in a second step the fibers are packed to a non overlapping configuration with repulsion and recover forces. A detailed description of the stochastic model and its properties can be found in [3].

The final goal of our studies is to optimize the physical properties of the fiber composites by adapting the microstructure. This process is called virtual material design. The aim is to create virtually new innovative materials with optimal physical properties in order to propose their structure and design before they are practically available. This approach replaces expensive prototypes and mechanical experiments. Therefore, the costs of development can be substantially reduced with the help of numerical simulation. The full-field computations are realized with the image-based fast Fourier transform method [4], that does not necessitate meshing.

In this presentation, we will show the results of the complete chain of virtual material design by an application on a glass fiber-reinforced polymer.

Keywords : *Virtual Material Design ; Force-biased Fiber Packing ; Glass Fiber Reinforced Polymer ; Fiber Quantification*

Bibliographie

- [1] H. ALTENDORF, D. JEULIN. *3d directional mathematical morphology for analysis of fiber orientations*, Image Analysis and Stereology, 28 :143–153, 2009.
- [2] H. ALTENDORF, D. JEULIN. *Fiber separation from local orientation and probability maps*, Conference Proceedings of ISMM 2009, 2009.
- [3] H. ALTENDORF, D. JEULIN. *Random-walk-based stochastic modeling of three-dimensional fiber systems*, Physical Review E, 83 :041804, 2011.
- [4] F. WILLOT, D. JEULIN. *Elastic behavior of composites containing Boolean random sets of inhomogeneities*, International Journal of Engineering Science, 47 :313–324, 2009.

12. A. Franczak, A. Levesque, F. Bohr, J. Douglade, J. P. Chopart.

• LISM, Université de Reims, Reims.

Influence of bath pH and applied magnetic field on the electrodeposition of cobalt coatings.

✉ : jp.chopart@univ-reims.fr

Electrodeposition of cobalt was done in a cobalt sulfate bath with boric acid additive and the deposits have been evaluated for structure and properties. The two main influences were considered : pH and magnetic field. The magnetic field was applied in direction parallel or perpendicular to the cathode surface. The plating conditions were as follow : current density - 20 mA/cm², bath temperature -500C, pH - 2.7 and 4.7. The deposits were characterized by Scanning Electron Microscopy (SEM), Atomic Force Microscopy (AFM) and X-ray diffraction (XRD). It was observed that for a lower pH value equal to 2.7, the obtained coatings had a face centered structure (fcc) with the formation of weak peaks of hexagonal close-packed (hcp). The intensity of hcp peaks was increasing with the magnetic field amplitude. For coatings obtained from bath pH equal to 4.7, the presence of mixed fcc and hcp structures was detected. When the magnetic field was applied, the increase of the intensity of hcp peaks was observed. We have also noted that for a lower pH value obtained coatings had fine-grain morphology which was not changed when the magnetic field was applied. Contrary to this case, when pH value was higher, the morphology of obtained coatings was mixed between small crystallites and long needles. After applying the magnetic field, the morphology has become more dendritic. It was found also that the presence of magnetic field increased the smoothness for coatings obtained from bath pH equal 2.7, but decreased it for a pH equal 4.7 and in both cases increased the roughness of cobalt surface.

Keywords : *Coating.*

13. D. Li, A. Levesque, W. Qiang, A. Franczak, J. P. Chopart, J. He.

- KLEPM, Northeastern University, Shenyang, P.R.China,
- LISM, Université de Reims, Reims.

High magnetic field annealing dependent the morphology and microstructure of nanocrystalline Co/Ni bilayered films

✉ : jp.chopart@univ-reims.fr

Keywords : *Thin Film ; Electrodeposition ; High magnetic fields annealing ; Atomic force microscopy ; Diffusion.*

Co/Ni bilayered films were prepared on ITO glass by electrodeposition assisted with a magnetic field up to 0.5T aligned parallel to the electrode surface. The effect of a high magnetic field annealing up to 12T on morphology and microstructure of the post-deposited films was investigated by field emission scanning electronic microscopy (FE-SEM), X-ray diffraction (XRD) and atomic force microscopy (AFM). Grain shape and grain boundary in the Co/Ni morphology were modified dramatically when the high magnetic field was applied during the annealing process. A magneto-induced anisotropy appeared in the films due to the preferential orientation of fcc-CoNi alloy in comparison with a weaker orientation of hcp-Co. High magnetic field annealing favored to form a more homogeneous surface with smaller grain size and lower roughness, compared with the annealed samples obtained in the absence of magnetic field. The influencing mechanisms of high magnetic field annealing on the microstructure evolution in the Co/Ni electrodeposits are interpreted in terms of the overlapping effects : diffusion, recrystallization, grain growth and magnetic domains.

14. M. Darrieulat, Y. Ben Ammar.

• Centre SMS, LCG, ENSMSE Saint-Étienne.

Évolutions microstructurales du Zircaloy-4 sous l'effet du forgeage multiaxial.

✉ : {darrieulat,benammar}@emse.fr

Lorsqu'il est utilisé pour le gainage du combustible nucléaire dans les centrales, le Zircaloy-4 est forgé, homogénéisé et trempé β . Puis il est travaillé dans le haut domaine α , au-dessous de 780 °C. L'enjeu est de transformer la microstructure de Widmanstätten, résultat de la trempe, en petits grains sensiblement équiaxes, produits du brisement des lamelles et de la recrystallisation.

La forge classique (compression uniaxiale) n'est pas toujours efficace dans cette tâche. Les colonies de lamelles perpendiculaires à la direction de compression résistent à la transformation. Le forgeage multiaxial a donc été essayé. Des échantillons parallélépipédiques ont été usinés avec des cotes dans le rapport 1 : R : R² (R < 1). Ils ne changent donc pas de forme dans un cycle de trois compressions le long de leurs axes, à condition que la déformation macroscopique à chaque passe soit $\Delta \bar{\epsilon} = \ln \left(\frac{1}{R^2} \right)$ [1].

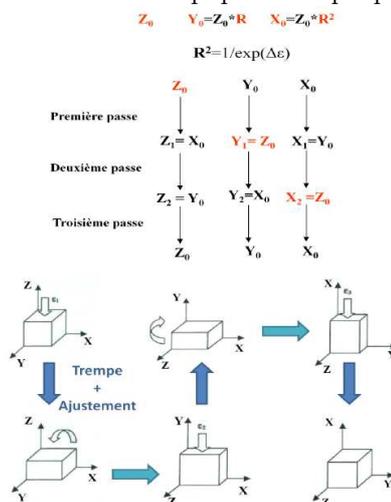


FIGURE 18. Protocole de compression.

Les conditions expérimentales ont été les suivantes. Les échantillons sont montés en température dans la machine de compression et maintenus 5 min pour homogénéisation. Les températures s'échelonnent entre $T = 550, 650$ et 750 °C et les vitesses de déformation $\dot{\epsilon}$ de $10^{-3}/s$ à $4/s$. Les échantillons sont comprimés dès l'obtention de la température de contrôle, trempés in-situ pour conserver leur microstructure pour la passe suivante, rectifiés puis comprimés dans une direction perpendiculaire selon ce qu'illustre la figure 18. Les passes d'amplitude notée $\Delta \bar{\epsilon}$ ont été de 0, 2 0, 40, 5 et 0, 6. Il est possible de rajouter des temps de maintien en température avant de procéder à la compression, afin de simuler un recuit à même température que la compression. Nous avons utilisé des durées $\Delta t_{red} = 5$ min.

Les échantillons sont ensuite examinés dans le plan perpendiculaire à la dernière passe de compression. Les observations ayant lieu au centre, il convient de tenir compte du phénomène dit "croix du forgeron" qui majore en moyenne de 60 à 75% les déformations dans la zone observée. Les courbes contrainte-déformation macroscopique ont été établies en tenant compte du frottement. L'analyse microstructurale a utilisé les rayons X, la microscopie optique (en particulier pour constater la disparition des lamelles), l'Electron BackScattering Pattern dans un microscope électronique à balayage Zeiss à effet tunnel. Outre les orientations cristallographiques, les paramètres les plus étudiés ont été le diamètre équivalent pondéré

des grains, la quantité relative de joints et de sous-grains et la fraction recristallisée données par le logiciel Channel 5TM de HKL.

Ces expériences ont permis à la fois de mieux comprendre l'effet de la compression multiaxiale suivie ou non d'un temps de recuit et de tester l'effet de T , $\dot{\varepsilon}$ et $\Delta \varepsilon$ sur l'état métallurgique final.

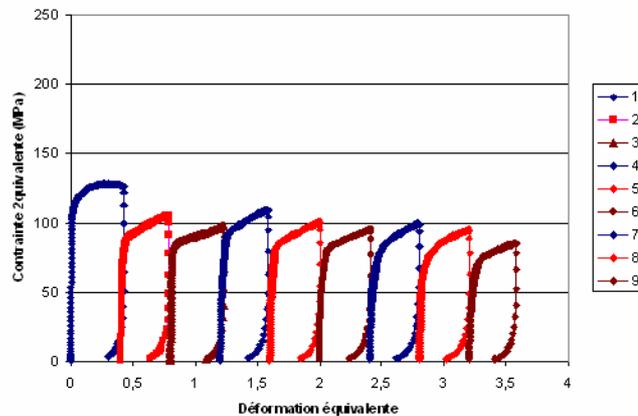


FIGURE 19. Évolution de la rhéologie au cours de trois cycles de trois passes de $\Delta \varepsilon = 0,4$.

1. Mécanismes à la base de l'efficacité de la compression multiaxiale

Il a été préalablement vérifié que la montée en température ne modifiait pas la microstructure. La trempe après compression est faite à titre de précaution, mais le refroidissement à l'air conserve la microstructure. Les précipités sont stables dans toute la phase α . La compression selon un axe entraîne une anisotropie mais celle-ci est compensée dans les passes suivantes. Pour $T > 550^\circ\text{C}$, les lamelles disparaissent au bout de trois passes (pas toujours de deux). Des considérations mécaniques sur la propagation d'un défaut établissent facilement ce fait [2].

Le résultat de ce brisement des lamelles est fortement influencé par T , $\dot{\varepsilon}$, $\Delta \varepsilon$, et Δt_{red} . En l'absence de Δt_{red} , il y a très peu de recristallisation. La restauration est effective à partir de $T = 650^\circ\text{C}$. Pour $T = 550^\circ\text{C}$, l'écroissage est encore très important. Il est utile de prendre car sinon la passe s'interrompt en pleine montée de la contrainte d'écoulement et ne donne pas son plein effet.

Δt_{red} produit la recristallisation statique à partir de $T = 650^\circ\text{C}$. Cet effet est plus marqué à 750°C et peut dans certains cas déclencher le grossissement des grains recristallisés résultats de la passe précédente, ce qui est contraire à l'intérêt du forgeron. À la seconde passe, la contrainte est toujours plus faible qu'à la première. C'est quelquefois le cas de la troisième par rapport à la seconde (voir Fig. 19). Outre les causes d'adoucissement évoquées ci-dessus (dont Δt_{red}), cela peut-être dû au fait que certains systèmes de glissement jouent dans un sens puis dans l'autre. La densité de dislocations baisse ; la recristallisation statique produit son effet.

2. Effet des variables de forge sur le résultat final

a) Au-dessous de $T = 650^\circ\text{C}$, la restauration est inefficace. Travailler à 750°C réduit l'effort mécanique mais peut créer les conditions de grossissement du grain si l'on multiplie les temps de recuit ou si $\Delta \varepsilon > 0,4$.

b) Augmenter $\dot{\varepsilon}$ est hautement favorable, voir Fig. 20. Pour être efficace, il faut $\dot{\varepsilon} \geq 10^{-1}/s$; $\dot{\varepsilon} \geq 2/s$ paraît optimum. Ce sont des vitesses de déformation industrielles.

c) $\Delta \bar{\varepsilon} = 0,4$ paraît optimum. Il correspond en fait à une déformation plus forte sur la surface observée (“croix du forgeron”).

d) Multiplier les cycles de trois passes est peu utile lorsque $T = 650^\circ\text{C}$. Il y a saturation de la contrainte et risque de grossissement des grains si un maintien en température intervient. Par contre à $T = 650^\circ\text{C}$ où la restauration est peu active, le grossissement des grains au cours du recuit n’a pas lieu.

e) Δt_{red} est très efficace. La quantité de sous-joints diminue fortement, la fraction recristallisée augmente. Les meilleurs résultats ont été obtenus pour

- $T = 650^\circ\text{C}$, $\dot{\varepsilon} = 2/s$, six passes de $\Delta \bar{\varepsilon} = 0,4$, $\Delta t_{red} = 5\text{min}$: le diamètre équivalent moyen des grains n’est que $17\mu\text{m}$, mais la fraction recristallisée est faible.
- $T = 750^\circ\text{C}$, trois passes de $\Delta \bar{\varepsilon} = 0,4$ et $\Delta t_{red} = 5\text{min}$: le grain est recristallisé à 50% pour $\dot{\varepsilon} = 2/s$ et 90% pour $\dot{\varepsilon} = 4/s$.

Ces études montrent la sensibilité du résultat aux paramètres T et $\Delta \bar{\varepsilon}$ d’une part, et $\dot{\varepsilon}$ et Δt_{red} de l’autre. Mais les deux premiers varient dans une grande pièce en cours de forgeage. L’optimum industriel est donc à rechercher dans une moyenne des propriétés étudiées ci-dessus.

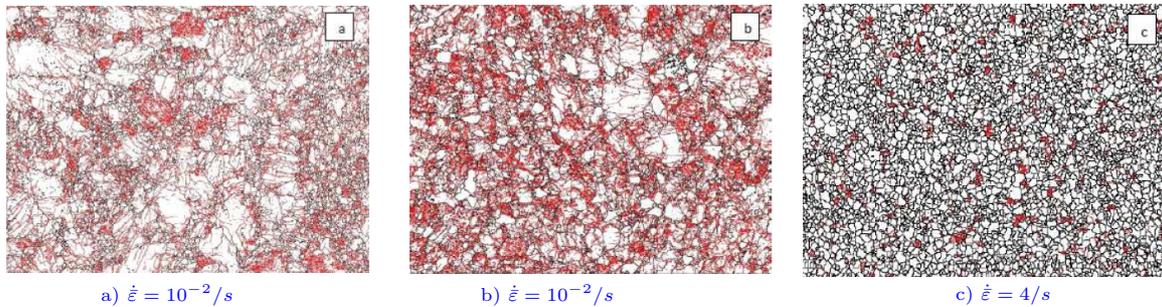


FIGURE 20. Joints (noirs) et sous-grains (rouges) pour a) $\dot{\varepsilon} = 10^{-2}/s$, b) $\dot{\varepsilon} = 10^{-2}/s$ et c) $\dot{\varepsilon} = 4/s$.

✉ : {}@univ-reims.fr

Keywords : Zircaloy-4 ; Compression multiaxiale ; Affinement de microstructure ; Recristallisation.

Bibliographie

- [1] A. BELYKOV, A. SAKAĪ. *Effect of initial microstructures on grain refinement in a stainless steel by large strain deformation*, Acta Materialia, 51 :847–861, 2003.
- [2] M. DARRIEULAT, Y. BEN AMMAR. *Modélisation du plissement des lamelles d’un alliage métallique hexagonal*, Actes du congrès Matériaux 2010, Nantes, 2010.

15. D. Jeulin, D. Piot, L. Siad, M. François.
Discussion et conclusion des journées thématiques.