

Prédiction de distorsions induites lors du procédé de trempe
de brames d'acier de fortes dimensions : modélisation et
validation expérimentale

par

Yassine BOUISSA

THÈSE PAR ARTICLES PRÉSENTÉE À L'ÉCOLE DE TECHNOLOGIE
SUPÉRIEURE COMME EXIGENCE PARTIELLE À L'OBTENTION DU
DOCTORAT EN GÉNIE
Ph.D.

MONTREAL, LE 07 JUILLET 2020

ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE
UNIVERSITÉ DU QUÉBEC



Yassine BOUISSA, 2020



Cette licence [Creative Commons](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/) signifie qu'il est permis de diffuser, d'imprimer ou de sauvegarder sur un autre support une partie ou la totalité de cette œuvre à condition de mentionner l'auteur, que ces utilisations soient faites à des fins non commerciales et que le contenu de l'œuvre n'ait pas été modifié.

PRÉSENTATION DU JURY

CETTE THÈSE A ÉTÉ ÉVALUÉE

PAR UN JURY COMPOSÉ DE :

M. Mohammad Jahazi, directeur de thèse
Génie mécanique à l'École de technologie supérieure

M. Henri Champlaud, codirecteur de thèse
Génie mécanique à l'École de technologie supérieure

M. Ali, Gharbi, président du jury
Génie des systèmes à l'École de technologie supérieure

M. Tan, Pham, membre du jury
Génie mécanique à l'École de technologie supérieure

M. Lotfi, Toubal, examinateur externe
Génie mécanique à l'Université du Québec à Trois-Rivières

ELLE A FAIT L'OBJET D'UNE SOUTENANCE DEVANT JURY ET PUBLIC

LE 18 JUIN 2020

À L'ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE

Dédicace

À mon épouse,

Avant tout, je tiens à prouver ma profonde reconnaissance à mon épouse pour son sacrifice et son soutien sans faille durant tout le long de mon chemin de doctorat,

À mes parents,

Pour votre amour, votre patience et votre reconnaissance. J'espère avoir été digne de votre si sincère affection et de votre confiance.

À ma famille,

Pour tous les efforts et l'attention que vous avez consentis en ma faveur, veuillez trouver dans ce modeste travail l'expression de mon affection.

À mon fils,

Que j'ai vu naître en plein milieu de ce parcours,
Qui a accepté malgré lui que ma présence soit souvent restreinte, je lui dédie cette thèse pour tout le bonheur qu'il a pu m'apporter jusqu'à présent.

REMERCIEMENTS

Ce travail de thèse a été inscrit dans le cadre d'un partenariat industriel avec le groupe Finkl Steel-Sorel.

J'exprime ma profonde gratitude à mon directeur de thèse Professeur Mohammad Jahazi, de m'avoir accueilli au sein de son équipe dans le cadre de la chaire de recherche CM2P, j'ai bien profité de sa pédagogie, son expérience et ses conseils qui ont réorienté ma réflexion durant mon projet de doctorat.

Je remercie particulièrement Professeur Henri Champliand d'avoir codirigé ma thèse, pour son suivi scrupuleux de l'avancée de mes travaux, sa démarche scientifique sa patience et surtout ses qualités humaines.

Je tiens à remercier vivement Monsieur Jean-Benoit Morin au nom du partenaire industriel Finkl Steel - Sorel, d'avoir investi tous les moyens possibles pour réussir ce projet de doctorat.

Je tiens à remercier également l'ensemble des membres du jury, qui m'ont fait l'honneur d'accepter l'évaluation de mon travail.

Finalement, j'aimerais exprimer ma gratitude à toutes les personnes, trop nombreuses pour les citer individuellement, qui ont contribué de près ou de loin à faire progresser mon travail, ou même de lui y consacrer une partie de leur temps.

Prédiction de distorsions induites lors du procédé de trempe de brames d'acier de fortes dimensions: modélisation et validation expérimentale

Yassine BOUISSA

RÉSUMÉ

L'industrie du forgeage a recours à la trempe comme procédé de traitement thermique post forgeage par excellence pour durcir l'acier par le biais de la transformation de phases. Ceci permet aux entreprises de conférer aux produits forgés les meilleures propriétés mécaniques recherchées, telles qu'un profil de dureté bien déterminé à travers l'épaisseur et une répartition bien définie de la microstructure. Le grand nombre de variables et de paramètres impliqués durant la trempe de pièces à l'échelle industrielle (jusqu'à 40 pouces d'épaisseur) exige l'exploitation d'outils prédictifs qui aident à mieux contrôler les fluctuations du procédé.

La modélisation de la trempe de brames de grandes dimensions a été conduite dans ce travail en utilisant la méthode d'éléments finis pour pouvoir prédire l'évolution de tous les domaines physiques impliqués durant ce processus (thermique, transformation de phase et mécanique) jusqu'à la fin de la trempe.

Dans la première partie, nous avons utilisé une méthode d'optimisation qui combine un modèle éléments finis (EF) tridimensionnels avec un réseau de neurones artificiel progressif pour prédire le coefficient de transfert thermique. Le modèle EF utilisé tient compte du couplage entre le modèle thermique et métallurgique pour pouvoir considérer la transformation de phases afin d'améliorer les prédictions de température grâce à la libération de la chaleur latente. Le modèle EF a initialement intégré différents modèles de coefficients de transfert thermique (HTC) issus de la littérature pour simuler l'effet de la variabilité du HTC sur le comportement thermique de la brame. Le modèle de réseau de neurones artificiel (ANN) développé utilise initialement les températures issues du modèle EF comme entrant ainsi que leurs HTC correspondant (utilisés comme des conditions aux limites) comme sortants pour l'entraînement. L'instrumentation de la brame a été réalisée pour comparer la validité de la réponse de la température simulée dans la brame par rapport à celle mesurée aux emplacements des thermocouples à la suite des différentes excitations par HTC. La simulation du modèle ANN (entraîné) se fait en utilisant la température expérimentale pour pouvoir prédire un nouveau HTC, qui sera utilisé ensuite pour simuler l'évolution de la température dans la brame.

Cette méthode progressive avait une tendance à améliorer les prédictions de température en alimentant les entrants et sortants du modèle ANN par de nouvelles données de meilleure qualité après chaque itération (simulation du ANN). Les résultats montrent que les prédictions progressives du HTC obtenues par le modèle ANN peuvent s'améliorer après chaque itération et tendent vers un modèle qui a un profil récurrent. Finalement le HTC est considéré optimal s'il minimise indirectement l'erreur moyenne en pourcentage entre la température simulée par le modèle EF et celle mesurée expérimentalement jusqu'à 1.5 %.

Dans la deuxième partie, le HTC développé dans la première partie a été adapté et introduit dans le modèle EF, mais cette fois pour étudier l'évolution de la transformation de phase d'une

autre brame industrielle de taille réduite. Cette dernière a été instrumentée par différents thermocouples à différentes épaisseurs pour surveiller l'évolution de la température durant la trempe.

Au début, l'optimisation du diagramme Temps Température Transformation (TTT) a été effectuée pour que le diagramme de Transformation en Refroidissement Continu (TRC) qui lui correspond (calculé), soit le plus représentatif du TRC réel de l'acier étudié, en utilisant la vitesse du refroidissement critique comme contrainte d'optimisation. Les résultats obtenus à la fin de la simulation montrent encore une fois que l'évolution de la température est en concordance avec les mesures expérimentales réalisées. Les échantillons extraits directement de la brame instrumentée, ont servi d'échantillons témoins. Néanmoins, des tests sur dilatomètre ont été réalisés pour reproduire fidèlement des échantillons ayant subi les mêmes cycles thermiques (réels) durant la trempe que celles des zones instrumentées de la brame.

Les prédictions du modèle EF concernant la distribution des fractions volumiques de phases sont en concordance avec les résultats expérimentaux calculés à partir des courbes dilatométriques. Également, les analyses métallographiques au microscope électronique à balayage ont aussi confirmé, l'existence d'une surabondance de la bainite dans la région qui se situe au quart de l'épaisseur de la brame par rapport à celle du centre.

Dans la troisième partie, les propriétés mécaniques essentielles pour la simulation ont été générées expérimentalement pour chaque phase et à différentes températures vu leur sensibilité sur la prédiction de la distorsion. Une méthodologie expérimentale a été aussi développée pour mesurer les distorsions de la brame après traitement thermique. La méthodologie a été basée sur la mesure expérimentale de la géométrie externe du bloc d'acier avant et après traitement thermique en utilisant un scanneur portable 3D de haute résolution. Les géométries scannées par la suite ont été analysées par le logiciel CATIA V5 pour créer des modèles 3D continus. L'objectif de la mesure était d'évaluer la réduction de l'épaisseur de la brame mesurée expérimentalement de manière tridimensionnelle. Les résultats de la simulation montrent la même tendance observée dans la mesure expérimentale. De plus, la valeur maximale de la réduction de l'épaisseur a été prédite par EF avec une précision acceptable. Ainsi, cela a permis de justifier l'utilisation des prédictions du modèle EF pour décrire et suivre l'évolution de la distorsion pour différents pas de temps et, puis conclure sur le niveau des contraintes résiduelles développées à la fin de la trempe.

Finalement, le modèle EF développé a été capable de suivre l'évolution de la température et la transformation de phase à travers le volume de la brame, pour prédire finalement une cartographie de la microstructure après trempe. De façon analogue à précédemment, ceci a été aussi confirmé par la concordance entre le modèle EF et la mesure expérimentale de la distorsion, en plus de la dureté.

MOTS CLÉS : Coefficient du transfert thermique, MEF, modélisation de la trempe, réseau de neurones artificiels, TTT, transformation de phase, prédiction de la microstructure, aciers à haute résistance mécanique, prédiction de la distorsion, contraintes résiduelles, modélisation de la trempe, brames forgées de fortes dimensions, mesure de la distorsion.

Prediction of distortions induced during the quench process of large size steel forgings: modeling and experimental validation

Yassine BOUISSA

ABSTRACT

The forging industry utilizes quench as the ultimate heat treatment process for steel hardening through phase transformation. This process allows companies to provide the best mechanical properties to their products, such as a well-defined hardness profile across the thickness as well as the microstructure distribution. The huge amount of variability as well as the involved parameters in quenching parts at industrial scale (up to 40 inches in thickness) requires using predictive tools that help control the process fluctuations.

The quench modelling of a large forging was carried out in this work using a finite element method, in order to predict separately the evolution of all physical domains involved in calculation during this process (thermal, microstructural and mechanical) up to the end of quenching.

The first part used an optimization method that combines a symmetric three-dimensional finite element model with a progressive neural network to predict the heat transfer coefficient. The used FEM model was considering for analysis a thermal model coupled with a metallurgical model that considers the phase transformation to improve the temperature predictions with the consideration of latent heat release.

The FEM model was initially integrating different heat transfer coefficients (HTC) from the literature to simulate the effect of HTC variability on the thermal behavior of the forging steel block.

The developed artificial neural network model (ANN) uses initially the temperatures calculated by the FE model as Inputs as well as their corresponding HTC (used as boundary conditions) as outputs for the training. The steel block instrumentation was carried out to compare the validity of the simulated thermal response of the block, through the calculated temperature at the locations of the thermocouples follows to the different HTCs relative to the measured temperature.

The simulation of the trained ANN was performed by using the measured temperature in order to predict a new HTC, that will be used again as a boundary condition for modeling the evolution of temperature inside the steel block. This progressive method seems improve the temperature predictions by supplying the ANN model by Inputs and Outputs with higher quality after each iteration (simulation of the ANN). The results show that the progressive HTC predictions by ANN could be improved after each iteration and establish a recurrent profile. Finally, the HTC was considered optimized if it indirectly minimizes the percentage of average error between the FEM calculated temperature and the measured one up to 1.5%.

In the second part, the HTC developed in the first part was introduced in the FE model, in order to study the phase transformation evolution for a reduced geometry of an industrial block. The block was instrumented by thermocouples to monitor the temperature evolution during quenching. The Time Temperature Transformation diagram (TTT) was first optimized so that its corresponding Continuous Cooling Transformation (CCT) diagram (computed) could represent the real CCT of the investigated steel, by using the critical cooling rate as an optimization constraint.

The FE results showed a good agreement on temperature evolution with the measured ones. Extracted samples from the instrumented block were used as a reference. However, dilatometry tests were additionally carried out to physically simulate the experimental real thermal cycle experienced by the instrumented block in order to reproduce samples with similar microstructure. The predictions of phase volume fractions distribution using the FE model showed a good agreement with the experimental ones, calculated from the dilatometric curves. Likewise, metallographic analysis using scanning electron microscopy confirmed the overabundance of bainite in the quarter thickness of the block in comparison to the center.

In the third part, the main mechanical properties needed for FEM simulations were experimentally determined for each phase and at different temperatures. An experimental methodology was developed to measure the block distortions after heat treatment. The methodology is based on the experimental measurement of the external geometry of the steel block before and after heat treatment using a high-resolution portable 3D scanner. The scanned shapes were analyzed by CATIA V5 software to produce a continuous 3D model. The measurement objective was to assess in 3D, the measured thickness reduction for the block.

The FEM results predicted similar distortion trend to the one observed in the experimental measurement. In addition, the maximum thickness reduction magnitude was predicted with acceptable accuracy, which justify using the FE model to monitor the distortion evolution over time and thus estimate the level of residual stress generated after quench.

Finally, the developed FE model was able to monitor phase transformation and temperature evolution through the whole block and then predict a microstructure mapping after quench. This was also confirmed by the observed agreements between the FE predicted distortion and experimentally measured as well as hardness values.

Keywords: Heat transfer coefficient, FEM, quench modelling, Artificial Neural Network, TTT, Phase transformation, prediction of microstructure, high strength steels, prediction of distortion, residual stress, quenches modeling, large forging, distortion measurement.

TABLE DES MATIÈRES

	Page
CONTEXTE GÉNÉRAL DE LA RECHERCHE ET INTRODUCTION	1
CHAPITRE 1 LES TRAITEMENTS THERMIQUES POUR ACIERS	7
1.1 Les transformations de phases dans les aciers	8
1.1.1 L'austénitisation.....	9
1.1.2 La trempe	10
1.1.2.1 La martensite.....	13
1.1.2.2 La bainite	16
CHAPITRE 2 LA PROBLÉMATIQUE DE LA MODÉLISATION DE LA TREMPÉ ..	19
2.1 Modélisation métallurgique	20
2.1.1 Cinétique des transformations diffusives.....	21
2.1.1.1 Modèle de Johnson–Mehl–Avrami–Kolmogorov (JMAK).....	21
2.1.1.2 Modèle de Kirkaldy et Venugopalan	23
2.1.1.3 Principe d'additivité de Scheil	25
2.1.2 Cinétique de transformations non diffusives	27
2.1.3 Propriétés macroscopiques de la mixture des phases	28
2.2 Modélisation thermique	30
2.2.1 Formulation générale du problème thermique.....	31
2.2.2 Chaleur latente	31
2.2.3 Les conditions aux limites (surfaces libres).....	32
2.2.4 Généralités sur le coefficient de transfert thermique durant la trempe	33
2.2.5 Détermination du coefficient du transfert thermique.....	38
2.3 Modélisation mécanique	40
2.3.1 Contraintes résiduelles générées lors de la trempe	41
2.3.1.1 Contraintes thermiques et de transformation de phases.....	41
2.3.1.2 Déformation induite par la plasticité de transformation (TRIP)	47
2.3.2 Formulation du problème mécanique	49
2.3.3 Rhéologie du matériau	51
2.4 Conclusion	53
CHAPITRE 3 MÉTHODOLOGIE EXPÉRIMENTALE ET MÉTHODE DE MODÉLISATION.....	57
3.1 Méthode de simulation.....	57
3.1.1 Mini élément $P1 + /P1$	58
3.1.2 Choix de maillage	59
3.1.3 Généralités sur le formalisme EF utilisé durant la modélisation de la trempe.....	62
3.1.3.1 Schéma d'intégration temporelle	63
3.1.3.2 Schématisation de la simulation de la trempe.....	64
3.2 Propriétés du matériau de l'étude	67

3.2.1	Composition chimique	67
3.2.2	Mesures des propriétés thermophysiques	68
3.2.3	Génération des courbes contrainte-déformation par phase	68
3.2.3.1	Réalisation des éprouvettes monophasiques	68
3.2.3.2	Essais de traction à différentes températures (Gleeble ® 3800 TM)	69
3.3	Mesures de températures durant la trempe	71
3.4	Mesure 3D de la géométrie de la brame expérimentale	73
3.5	Techniques métallographiques	74
3.5.1	Essais réalisés sur le dilatomètre	74
3.5.2	Techniques d'imagerie	75
3.5.3	Mesure de la dureté	75
CHAPITRE 4	ARTICLE 1 : PREDICTION OF HEAT TRANSFER COEFFICIENT DURING QUENCHING OF LARGE SIZE FORGED BLOCKS USING MODELING AND EXPERIMENTAL VALIDATION	77
	ABSTRACT	77
4.1	Introduction	80
4.2	Coupled fields in numerical modeling of the quenching process	83
4.3	The thermal model	84
4.4	The phase transformation model	85
4.5	Material and methods	87
4.5.1	Experimental setup and procedures	87
4.5.1.1	Block Instrumentation:	87
4.5.1.2	Quench bath Instrumentation	88
4.5.2	Material data set	89
4.5.2.1	TTT/CCT diagrams	89
4.5.2.2	Thermo-physical properties	90
4.5.3	FEM model specifications	91
4.5.4	Neural network specifications	92
4.5.5	Configuration of the ANN with FEM model for HTC optimization	96
4.6	Results and discussion	97
4.6.1	ANN predicted HTC Profile	97
4.6.2	Temperature prediction using HTCs predicted via ANN	98
4.6.3	Prediction accuracy and error analysis	100
4.7	Conclusions	101
CHAPITRE 5	ARTICLE 2 : MICROSTRUCTURE BASED FEM MODELING OF PHASE TRANSFORMATION DURING QUENCHING OF LARGE SIZE STEEL FORGINGS	103
	ABSTRACT	104
5.1	Introduction	104
5.2	Mathematical framework for quench modeling	108
5.2.1	Temperature evolution model	108
5.2.2	Multi-Phase transformational model	109

5.2.3	Hardness Model	111
5.3	Methodology	112
5.3.1	Experimental set up.....	112
5.3.2	Setup of the FEM Model.....	112
5.3.3	Material data input.	113
5.3.3.1	Thermo-physical properties	113
5.3.3.2	TTT - CCT optimization.....	115
5.4	Experiments	118
5.4.1	Thermocouples Instrumentation Techniques.....	118
5.4.2	Samples extracted from the instrumented block.....	118
5.4.3	Dilatometry experiments.....	119
5.5	Results and discussion	120
5.5.1	Thermal results.....	120
5.5.2	Evolution of volume fraction of phases	121
5.5.2.1	FEM results.....	121
5.5.2.2	Analysis of the dilatometry experiments	125
5.5.2.3	Microstructural validation.....	129
5.5.3	Hardness map.....	130
5.6	Conclusions.....	132
CHAPITRE 6	ARTICLE 3 : FEM MODELING AND EXPERIMENTAL VALIDATION OF QUENCH-INDUCED DISTORTIONS OF LARGE SIZE STEEL FORGINGS	135
	ABSTRACT	136
6.1	Introduction.....	136
6.2	Simulation of Quenching	139
6.2.1	Temperature field.....	140
6.2.2	Metallurgical field.....	142
6.2.3	Mechanical field.....	144
6.2.3.1	Strain model	144
6.2.3.2	Stress model	146
6.3	Methodology	148
6.3.1	Experimental setup.....	148
6.3.2	Geometrical modeling.....	149
6.3.2.1	3D Surface measurement	149
6.3.2.2	3D surface reconstruction and solid modeling.....	150
6.3.2.3	Reconstruction of 3D surfaces	150
6.3.2.4	Design of the nominal cuboid used for FEM model.....	151
6.3.3	FEM Modeling.....	153
6.3.3.1	Material data:	153
6.3.3.2	Thermo-mechanical data.....	153
6.3.3.3	TTT curves.....	158
6.3.3.4	Thermo-physical data.....	159
6.4	Results and Discussion	159
6.4.1	Thermal analysis	159

6.4.2	Distortion analysis	161
6.4.2.1	Distortion evolution during quench	162
6.4.2.2	Experimental validation of predicted distortions	163
6.4.3	Residual stresses	165
6.5	Conclusions.....	167
CONCLUSION.....		169
RECOMMANDATIONS		173
ANNEXE I	Modèle de JMAK : Concept du volume excédentaire	175
ANNEXE II	Schéma d'intégration temporelle	177
LISTE DE RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES.....		179

LISTE DES TABLEAUX

	Page
Tableau 2-1. Formules empiriques pour le calcul de la chaleur latente estimée pour différentes transformations de phase (Porto de Oliveira, Savi, Pacheco, & Souza, 2010).....	32
Tableau 2-2. Changements de volume au cours des transformations des phases (Božidar Liščić, 2006).....	43
Tableau 2-3. Coefficient d'expansion thermique (α) par phase (Rajeev, Jin, Farris, & Chandrasekar, 2009).....	44
Tableau 3-1. Composition chimique de l'acier (Poids massique / %).....	67
Table 4-1. Evolution of the quench bath temperature during the process.	89
Table 4-2. Typical chemical analysis of the investigated steel - % weight.	90
Table 4-3. FEM Simulation input parameters.....	91
Table 4-4. Analysis of FEM effectiveness using the predicted $HTC^{ANN\ I-6}$	101
Table 6-1. Chemical composition of steel block (wt / %).	148
Tableau 6-2. Schémas d'intégration utilisés	178

LISTE DES FIGURES

	Page
Figure 0 -1. Étapes de fabrication d'une brame d'acier chez Finkl Steel -Sorel : a) Coulée en lingotière b) Chauffage au four de forgeage c) Forgeage à chaud d) Trempe à l'eau.	1
Figure 0 -2. Brames produites par Finkl Steel a) après trempe et b) après usinage.....	2
Figure 1-1. Cycle thermique de traitement trempe et revenu.	7
Figure 1-2. Diagramme de phase Fe-C (Alexey V. Sverdlin 2006; S. Babu, 2007).	8
Figure 1-3. Comparaison de la distribution des contraintes principales S_{33} (a) et b)) et de phases (c) et d))) entre une trempe conventionnelle dans l'huile (a) et c))) et une trempe intensive en utilisant un jet d'eau (b) et d))) d'un acier 52100 (N. I. Kobasko et al., 2007)	12
Figure 1-4. Influence des conditions de refroidissement par catégorie de trempe sur l'état de la conformité de la pièce (N. Kobasko et al., 2010)	12
Figure 1-5. Effet de la teneur en carbone sur les températures M_s et M_f (Lauralice & George, 2010).....	14
Figure 1-6. Effet des contraintes mécaniques de traction sur l'évolution du M_s (Hans M. Tensi, 2006)	15
Figure 1-7. a) et b) Schématique des morphologies de la martensite (Reardon, 2011) , c) martensite en latte (0.35 % C) (Seyyed Hesamodin Talebi, 2018) et d) martensite en plaquette (1.86 % C) (Krauss, 1999).....	16
Figure 1-8. Diagramme TTT pour illustrer les températures de transformation bainitique (H.K.D.H.Bhadesha., 2001).	17
Figure 1-9. a) Morphologie de la bainite inférieure et supérieure (S. Babu, 2007) adapté du livre de (Bhadeshia, 2001). b) Morphologie expérimentale de la bainite supérieure (S. H. Talebi, Ghasemi-Nanesa, Jahazi, & Melkonyan, 2017).....	18
Figure 2-1. Couplages existants entre les domaines durant la simulation de la trempe (Gustavo Sánchez, 2009).	19

Figure 2-2.	Procédure d'incorporation du calcul de la transformation des phases dans les calculs thermiques (Chen, 1998)	21
Figure 2-3.	Diagrammes a) TTT et b) TRC pour la nuance d'acier : DIN 50CrV4 (G.E. Totten, 2006).	22
Figure 2-4.	Traitements thermiques isothermes: (a) Recuit isotherme (b) Trempe bainitique étagée (c) Trempe martensitique étagée (Božidar Liščić, 2006).	25
Figure 2-5.	Calcul du temps d'incubation non isotherme à partir de diagrammes TTT en utilisant le principe d'additivité de Scheil (H. Li, Zhao, He, & Mo, 2009).	26
Figure 2-6.	Diagramme de calcul des décompositions de phases (Caner Şimşir & C. Hakan Gür, 2010).	28
Figure 2-7.	Concept de la mixture des fractions de phase de ξ_1 à ξ_n (T.Inoue, 2002).....	29
Figure 2-8.	Procédure de l'incorporation du calcul métallurgique dans la simulation de la trempe (Anca, 2008).	30
Figure 2-9.	a) Mouillabilité de la surface d'un échantillon cylindrique en acier trempé dans l'eau distillée à 45°C (les flèches indiquent le point d'effondrement du film de vapeur et les cercles montrent la propagation du front de mouillage) (Pizetta Zordão et al., 2019), b) Schématisation de la variation et de la transition du HTC en fonction de la hauteur dans un front du mouillage (Şimşir, 2009).	35
Figure 2-10.	Régimes de refroidissements associés aux flux thermiques et au coefficient du transfert thermique durant l'immersion (Şimşir, 2009).	37
Figure 2-11.	Exemple du schéma utilisé pour estimer le HTC par les méthodes inverses (Felde & Réti, 2010).	39
Figure 2-12.	Schéma d'une courbe de dilatomètre pour extraire le coefficient d'expansion thermique ainsi que la déformation due à la transformation de phases (M. Schwenk, 2014).	41
Figure 2-13.	Développement des contraintes thermiques et de transformation pour un matériau (b) parfaitement élastique et (c) un matériau élasto-plastique (Hans M. Tensi, 2006).	43
Figure 2-14.	Évolution temporelle des contraintes totales (résultantes) et thermiques pour différentes conditions de trempe en cœur et en surface (Totten et al., 2002).	44

Figure 2-15. Distribution des contraintes résiduelles à travers la section entre la surface et le cœur en fonction du diamètre du cylindre (Volker Schulze, 2011).	46
Figure 2-16. Distribution des contraintes résiduelles à travers la section d'un cylindre pour deux types d'acier différents (Volker Schulze, 2011).	47
Figure 2-17. a) Influence de la contrainte mécanique appliquée sur la déformation totale b) Corrélation entre la déformation induite par la plasticité de transformation (TRIP) et la contrainte appliquée c) Influence de l'effet TRIP sur la modélisation FE des contraintes résiduelles (Franz et al., 2005).	48
Figure 2-18. Étude de l'impact de l'intégration de l'effet TRIP dans la modélisation de la distorsion a) après trempe et b) cémentation suivie d'une trempe en comparaison avec les résultats expérimentaux (Narazaki & Totten, 2006).	49
Figure 2-19. Courbes contraintes-déformations par phase (Umemoto, Tsuchiya, Liu, & Sugimoto, 2000).	52
Figure 3-1. Schéma expliquant le fonctionnement du logiciel Forge Nxt 1.1 et la façon d'acquérir les données.	57
Figure 3-2. Élément fini tétraédrique $P1 + /P1$ par rapport à la vitesse et la pression (Cardinaux, 2008).	58
Figure 3-3. Effet du maillage EF sur les résultats de simulation.	60
Figure 3-4. Évolution de la température (max.) et de la norme du déplacement (max.) par rapport au maillage.	61
Figure 3-5. Maillage C utilisé pour la modélisation de la trempe afin d'exploiter les résultats mécaniques.	62
Figure 3-6. Schéma de la simulation du procédé de trempe.	66
Figure 3-7. Cycle utilisé pour tester le comportement de l'austénite aux basses températures.	70
Figure 3-8. Essai de traction à chaud : a) procédure d'installation d'un échantillon avec extensomètre. b) spécification des échantillons utilisés c) Interface de la machine Gleeble ® 3800 TM	71
Figure 3-9. Procédures d'instrumentations de thermocouples. a) dimensions de la brame b) positionnement de thermocouples c) trempe de la brame d) enregistreur de température.	72
Figure 3-10. Technique utilisée pour la mesure de la géométrie du bloc.	73

Figure 4-1. Coupling between thermal, mechanical and microstructural fields in quench modelling.	83
Figure 4-2. Geometry of the quenched block, position of the thermocouples, meshing and the tetrahedral elements used for FEM simulation.....	88
Figure 4-3. Comparison between experimental CCT determined from (Chentouf et al., 2014) and the simulated one using JMatPro®.	90
Figure 4-4. (a) Predicted cooling curves (solid lines) obtained by FEM using $HTC^{1\text{ to }5}$ and experimental temperature profile (dotted lines) recorded by the thermocouple located in the near surface (TC ₁). (b) HTC's digitalized from the works of (H. Li, Zhao, He, et al., 2008) used as output for ANN training. (c) Schematic of the back-propagation ANN training used in the present study.....	95
Figure 4-5. Flow chart of HTC prediction using ANN combined with FEM.	97
Figure 4-6. HTC's predicted by ANN.	98
Figure 4-7. FEM of cooling curves using predicted HTC's.	100
Figure 5-1. HTC during water quench (Bouissa et al., 2019)	109
Figure 5-2. Thermal Cycle applied to the instrumented block.....	112
Figure 5-3. The block dimensions, including FEM Model geometry and TC positioning.	113
Figure 5-4. Thermo-physical properties per single phase used for FEM modelling: a) Thermal conductivity, b) Density, c) Specific heat, d) Latent Heat.	115
Figure 5-5. Flow chart of TTT optimization.	117
Figure 5-6. a) : Optimized TTT generated initially using JMatPro® , b) : Calculated and Optimized CCT.	117
Figure 5-7. Instrumentation technics: a) filling holes with iron powder b) sealing holes with cement.	118
Figure 5-8. Slice cut from the block indicating the position of sample extraction.	119
Figure 5-9. Temperature evolution during the quench process: experimental in dotted line and simulation in dashed line.	121
Figure 5-10. Distribution of bainite and martensite after quenching. a) 3D distribution of bainite, b) 3D distribution of martensite, c) Distribution of bainite and martensite along z and y axes.....	122

Figure 5-11. Evolution of phase transformation for the following positions: a) Surface b) Quarter 1 c) Quarter 2 and d) Center.....	123
Figure 5-12. Calculation of the time duration between Bs and Ms'	124
Figure 5-13 . Evolution of the experimental cooling rate with time.	125
Figure 5-14. a) The Relative change in length for different cooling conditions from the dilatometry tests, b) The Calculated complete transformation strain (TC2 / Quarter 1: near the bottom, TC3 / Quarter 2: near side, and TC4 is at the center).....	127
Figure 5-15. Evolution of the volume fraction of bainite obtained from dilatometry experiments.	128
Figure 5-16 . SEM images of microstructure obtained after quenching and tempering heat treatments for different block positions. At the surface (a, b), quarter1 (c, d), and center (e, f). α_b , α_m , and M/A stand for bainite, martensite and martensite/austenite phases respectively.	130
Figure 5-17. Comparison of hardness between experiments and simulation.....	131
Figure 5-18. Prediction of Hardness distribution along y-z cross section.....	132
Figure 6-1. Description of the existing interactions between the involved fields during quench modeling.....	140
Figure 6-2. Heat transfer coefficient during water (Bouissa et al., 2019) quenching and air cooling (Dung-An Wang, 2013).	142
Figure 6-3. Heat treatment cycle.	149
Figure 6-4. Measurement scanning procedure.	150
Figure 6-5. Procedure for shape reconstruction and body modeling using Catia V5.....	152
Figure 6-6. Dimensions of the block, and the mesh specifications.	153
Figure 6-7. Extraction of thermo-mechanical coefficient using dilatometry curves.....	154
Figure 6-8. Material flow stress determination - a) <i>Hot tensile testing set-up</i> for Gleeble TM 3800; b) Dimensions of the tensile test specimens.....	155
Figure 6-9. Experimental thermomechanical data as a function of temperature.....	157
Figure 6-10. TTT generated initially by JMatPro® and modified to fit Bs.	159

Figure 6-11. Evolution of temperature along x and z directions during a) water quenching, and b) air cooling.....	160
Figure 6-12. Distortion pattern obtained after quench simulation ($\times 10$ displacement magnification).	161
Figure 6-13. Evolution of (x_0, z_0) cross-section volume change superimposed with temperature evolution.	163
Figure 6-14. a) Thickness change ($z_{thickness}$) after hardening as a function of (x, y) coordinates, b) Data extraction procedures from the reconstructed block.	164
Figure 6-15. Thickness reduction, Δz : Comparison between the measured and the simulated values.	165
Figure 6-16. Distribution of residual stresses at the end of the quench process.	167
Figure 6-17. Illustration du concept du volume excédentaire après germination en temps t et croissance en $t + \Delta t$	175

LISTE DES ABRÉVIATIONS, SIGLES ET ACRONYMES

ANN : Réseau de neurones artificiel / Artificial neural network,

BP : Back-propagation / Rétro-propagation,

CCT / TRC : diagramme de Transformation en Refroidissement continu,

EF / FE : Éléments Finis / Finite elements

MEF/ FEM : Méthode des Éléments Finis / Finite elements Model,

HTC : Heat transfer coefficient / Coefficient de transfert thermique,

JMAK : Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov,

K-M : Koistinen et Marburger.

MAPE : Mean absolute percentage error / Erreur moyenne absolue en pourcentage,

Tansig : Fonction tangente hyperbolique,

TTT : diagramme Temps Température Transformation.

TRIP : Plasticité de transformation.

LISTE DES SYMBOLES ET UNITÉS DE MESURE

a :	Fonction d'activation
Ac_3 :	Température de transformation austénitique (°C)
Bi :	Nombre de Biot
b_j, b_k :	Biais des neurones j, k
B_s :	Température du début de la transformation bainitique (°C)
C_p :	Chaleur spécifique (J.kg ⁻¹ .K ⁻¹)
e_i, e_i^x :	Erreur moyenne absolue en pourcentage à l'instant t_i
f, f^φ, k :	Fraction volumique de la phase, φ ou k ,
h, HTC :	Coefficient de transfert thermique (W.m ⁻² .K ⁻¹)
h_r :	Coefficient de transfert thermique dû au rayonnement (W.m ⁻² .K ⁻¹)
h_c :	Coefficient de transfert thermique dû à la convection (W.m ⁻² .K ⁻¹)
$[HTC]_{k \times m}$:	Matrice du coefficient de transfert thermique de k lignes et m colonnes
HTC^x :	Vecteur colonne, où x est la position de la colonne dans la matrice $[HTC]_{k \times m}$
HTC^{ANN_p} :	Vecteur colonne du HTC prédit par le ANN, avec p le nombre de prédictions
HTC_n :	Vecteur colonne du Coefficient de transfert thermique normalisé
HV_{ToT}, HV_k :	Dureté totale de l'acier, dureté de la phase k (HV)
J_2 :	Second invariant du tenseur des contraintes
K_k, K	Paramètre TRIP (MPa ⁻¹)
L :	Longueur caractéristique (m)
M_s :	Température du début de la transformation martensitique (°C)
n, n_i :	Exposant de l'équation de JMAK à l'instant t_i
P^φ, P^k :	Propriété de la phase φ, k
$Q, \dot{q}$:	Source thermique interne due à la chaleur latente
R :	Coefficient de corrélation
S :	Somme de Scheil
t :	Temps(s)
T :	Température (°C)
T_s :	Température de surface (°C)

T_f :	Température du fluide (°C)
$[T]_{i \times m}$:	Matrice de température avec i lignes et m colonnes
T_n :	Vecteur colonne de la température normalisée
T^{exp} :	Vecteur colonne de la température mesurée (°C)
T^x :	Vecteur colonne de la température calculée par MEF, où x est la position de la colonne dans la matrice $[T]_{i \times m}$
t_i^* :	Temps fictif (s)
u_j :	Valeur de sortie du neurone j
$\{u\}$:	Tenseur de déplacement (mm)
w_{ji}, w_{kj} :	Matrices de poids (ANN)
Y_s :	Contrainte de la limite élastique (MPa)

SYMBOLES GRECS:

α, Ω :	Constante de l'équation de Koistinen et Marburger
ΔH^φ :	Différence d'enthalpie due à la transformation de phases (J.kg ⁻¹)
ΔH^k :	Chaleur latente (J.m ⁻³)
σ :	Constante de Stefan-Boltzmann , $\sigma = 5.670367 \times 10^{-8} \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-4}$
$\{\sigma\}, \sigma_{ij}$:	Tenseur de contraintes (MPa)
θ, θ_i :	Constantes de l'équation de JMAK,
φ :	Phase présente
λ :	Conductivité thermique (W.m ⁻¹ .K ⁻¹)
ρ :	Densité (kg. m ⁻³)
ϵ :	Émissivité
ξ :	Fraction volumique
δ :	Critère de convergence pour le <i>MAPE</i>
$\{\epsilon\}, \epsilon_{ij}$:	Tenseur de déformation
Δ_i :	Changement de volume
$\tau_{i(TTT)}$:	Temps d'incubation de Scheil à l'instant t_i (s)

CONTEXTE GÉNÉRAL DE LA RECHERCHE ET INTRODUCTION

Problématique de la recherche

Les industries de forgeage réalisent des pièces de structures de plus en plus critiques (moules, arbres de turbine, trains d'atterrissage, roues dentées...etc.), nécessitant ainsi l'utilisation de nuances d'aciers ayant de hautes résistances mécaniques pour supporter de fortes sollicitations mécaniques en service. Ces aciers sont généralement produits par coulée en lingotière (Figure 0-1.a) suivie d'un forgeage précédé par un chauffage au four de forgeage à haute température (Figure 0-1.b) pour la mise en forme et l'élimination des défauts de solidification (Figure 0-1.c), puis un traitement thermique en deux étapes (trempe (Figure 0-1.d) et revenu) pour l'amélioration des propriétés mécaniques recherchées de la brame obtenue (Chadha, Shahriari, & Jahazi, 2016).



Figure 0-1. Étapes de fabrication d'une brame d'acier chez Finkl Steel -Sorel : **a)** Coulée en lingotière **b)** Chauffage au four de forgeage **c)** Forgeage à chaud **d)** Trempe à l'eau.

Finkl Steel-Sorel produit des aciers à hautes résistances mécaniques, pour diverses applications de haute qualité, qui sont destinées principalement à l'industrie automobile et aux fabricants de moules à injection plastique. L'entreprise garantit à ses clients la production de nuances variées d'aciers avec de meilleures caractéristiques mécaniques. Une bonne usinabilité, un bon fini de surface et une dureté uniforme à travers l'épaisseur restent les qualités les plus recherchées.

Actuellement, la compétition industrielle dans ce secteur d'activité impose que le durcissement par trempe soit réalisé sur des pièces de plus en plus massives (Beaudet, 2009). Finkl Steel-Sorel recourt au procédé trempe-revenu, pour conférer à ses produits les propriétés mécaniques recherchées. Les effets indésirables de la trempe deviennent plus prononcés quand les brames possèdent des sections de fortes dimensions (Figure 0-2.a : épaisseurs jusqu'à 40 pouces). En revanche, l'ampleur du gradient thermique mis en jeu dans ce cas est très significative, car il induit des contraintes résiduelles conséquentes dues simultanément aux dilatations thermiques et aux transformations de phase hétérogènes, et dès lors, provoque dans la plupart des cas des distorsions et même des fissurations (Cheng, Liwen, Zhang, Quying, & Zhaokun, 2006; G. Y. Liu et al., 2016).

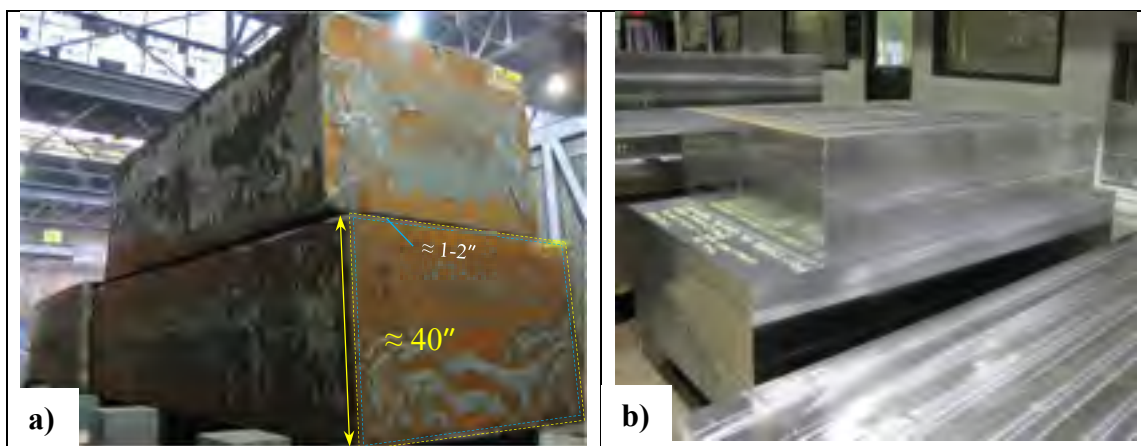


Figure 0-2. Brames produites par Finkl Steel **a)** après trempe et **b)** après usinage.

Les industries de forgeage investissent beaucoup de temps et de ressources pour pouvoir rattraper les effets indésirables dus au traitement thermique par la trempe. L'une des techniques les plus utilisées est le surdimensionnement du volume initial de la pièce, puis recourir à des

techniques d'enlèvement de matière pour réduire l'effet des distorsions, par exemple usiner la pièce pour correspondre aux spécifications du client (Figure 0-2.b). L'inconvénient de cette méthode est la surestimation systématique du volume initial de la pièce à tremper, dans la mesure où l'enlèvement de la matière devient un fardeau, puisque les coûts de production augmentent. Ceci peut être traduit soit par des temps d'usinage plus longs, mais aussi par une perte de matière excessive (plusieurs pouces par face) (Davis, 1998; Narazaki, Totten, & Webster, 2002).

Le développement d'un outil prédictif permettra de réduire considérablement les coûts engendrés par la pratique essai-erreur et présenter à l'entreprise d'importants avantages économiques, en termes de minimisation des non-conformités et d'optimisation des ressources déployées durant le procédé (Beaudet, 2009; Şimşir, 2008b). La prédiction de l'évolution de ces contraintes résiduelles durant la trempe est une discipline difficile impliquant de nombreux domaines d'ingénierie. Et ceci suppose le traitement et l'analyse de couplages complexes entre la métallurgie, la thermique et la mécanique. La complexité réside d'une part dans le matériau qui subit de grandes variations de propriétés mécaniques et thermophysiques à caractères non linéaires, associées à des transformations de phases, et d'autre part dans le procédé de trempe lui-même, qui est caractérisé par des phénomènes de transfert de chaleur avec des conditions aux limites très complexes (Şimşir, 2008a)

Objectifs de la recherche

Les codes de calculs commerciaux utilisés pour la modélisation de la trempe, possèdent souvent des bibliothèques très pauvres en données matériaux (propriétés thermomécaniques, et thermophysiques), en plus de ça, les modèles implémentés dans ces codes sont souvent méconnus (boîte noire). Généralement, les conditions et variables de trempe traitées dans la littérature ou dans les documentations techniques des logiciels traitent des cas très particuliers qui ne peuvent pas être adaptés directement aux cas étudiés dans cette recherche.

Le principal objectif du projet de thèse consiste à produire un modèle éléments finis (EF) capable de simuler de manière réaliste le procédé de trempe pour le cas de grandes brames forgées. Le modèle permettra de prédire les distorsions ainsi que la distribution des contraintes résiduelles induite par la trempe en fonction des différents paramètres ainsi que de la nuance de l'alliage considéré.

Dans le cadre de ce projet, un plan expérimental a été élaboré soit pour valider les résultats de simulation, ou pour alimenter le modèle éléments finis de données (procédés ou base de données matériaux).

Les sous-objectifs visés dans cette thèse peuvent être résumés comme suit :

- Objectif 1 : acquérir et développer des connaissances fondamentales approfondies sur les phénomènes physiques qui interagissent durant la modélisation du procédé de trempe dans un cas industriel (grandes dimensions).
- Objectif 2 : développer une méthodologie qui prédit le profil général de l'évolution du coefficient du transfert thermique durant la trempe à l'eau de brames de grandes dimensions.
- Objectif 3 : développer les lois et les modèles matériaux nécessaires à être implémentés pour paramétrer le modèle EF.
- Objectif 4 : développer une méthodologie expérimentale suffisamment précise pour mesurer et détecter les distorsions induites dans une brame de taille industrielle après la trempe de manière tridimensionnelle.
- Objectif 5 : Prédire par le modèle EF la distorsion induite lors de la trempe tout en s'assurant que la prédiction de la température, et la distribution des phases soient précises.

Organisation de la thèse

Le présent rapport contient 6 chapitres qui sont présentés de la manière suivante :

Le chapitre 1 traite de manière générale la transformation de phases des aciers en mettant l'accent sur les transformations martensitiques et bainitiques comme étant les phases ciblées par cette recherche dans la mesure où la trempabilité de la nuance de l'acier utilisé dans l'étude combinée avec les vitesses de refroidissement visées par le procédé de la trempe à l'eau ne permet pas généralement de former d'autres phases (perlite, ferrite). Les traitements d'austénitisation, trempe, seront évoqués par rapport à leurs importances dans les traitements thermiques et aussi puisqu'ils sont utilisés par l'industriel.

Le chapitre 2 discute la problématique de la modélisation de la trempe par rapport aux domaines impliqués de manière phénoménologique. Donc la problématique sera scindée en trois sous-problèmes séparés, soit métallurgique, thermique et mécanique, en discutant les couplages existants entre lesdits domaines physiques ainsi qu'en détaillant les équations qui règnent sur chaque problématique de manière séparée.

Le chapitre 3 présente, la méthodologie expérimentale suivie pour préparer et collecter les données utilisées afin de paramétrer le modèle EF pour la simulation du procédé de trempe dans le cadre d'une brame industrielle, tout en mettant en perspective les approches suivies pour la validation. En outre, une description du fonctionnement du modèle EF utilisé est présentée.

Le chapitre 4 présente la méthodologie développée pour la prédiction du coefficient du transfert thermique dans le cas de la trempe à l'eau d'une brame type de fortes dimensions en utilisant une optimisation progressive qui combine un modèle de réseau de neurones artificiel avec un modèle éléments finis.

Le chapitre 5 détaille l'approche suivie pour paramétrer le modèle éléments finis afin de modéliser l'évolution des transformations de phase de manière tridimensionnelle, mais aussi l'approche expérimentale conçue pour valider le modèle thermique et microstructural.

Le chapitre 6 présente la construction du modèle éléments finis tridimensionnel, mais par rapport à la réponse mécanique cette fois. La méthodologie expérimentale suivie pour mesurer les distorsions après traitement thermique a été bien détaillée. Ensuite, la capacité du modèle EF à prédire et valider les distorsions dans le cadre de la trempe d'un bloc forgé de taille industrielle a été discutée aussi.

Finalement, dans la partie conclusion, une discussion globale des résultats obtenus est présentée, suivie de recommandations pour de futurs travaux.

CHAPITRE 1

LES TRAITEMENTS THERMIQUES POUR ACIERS

Le traitement thermique désigne toute opération nécessitant un approvisionnement direct ou indirect de l'énergie thermique dans le but de faire évoluer la microstructure d'un matériau métallique, afin de lui conférer de nouvelles caractéristiques (Alexey V. Sverdlin 2006). Pour améliorer de manière significative les performances mécaniques des aciers, certains traitements thermiques s'avèrent inévitables.

Les traitements thermiques sont nombreux, cependant, l'étude sera limitée dans ce chapitre aux traitements d'austénitisation et trempe (Figure 1-1), qui favorisent la modification et l'ajustement des propriétés mécaniques de l'acier afin de répondre aux exigences fonctionnelles en service telles que : le niveau de la limite élastique, la ténacité, la résilience, la résistance à la traction, la dureté.

L'influence des paramètres de la trempe sur la distorsion et les contraintes résiduelles sera exposée dans la problématique mécanique à la section 2.3.

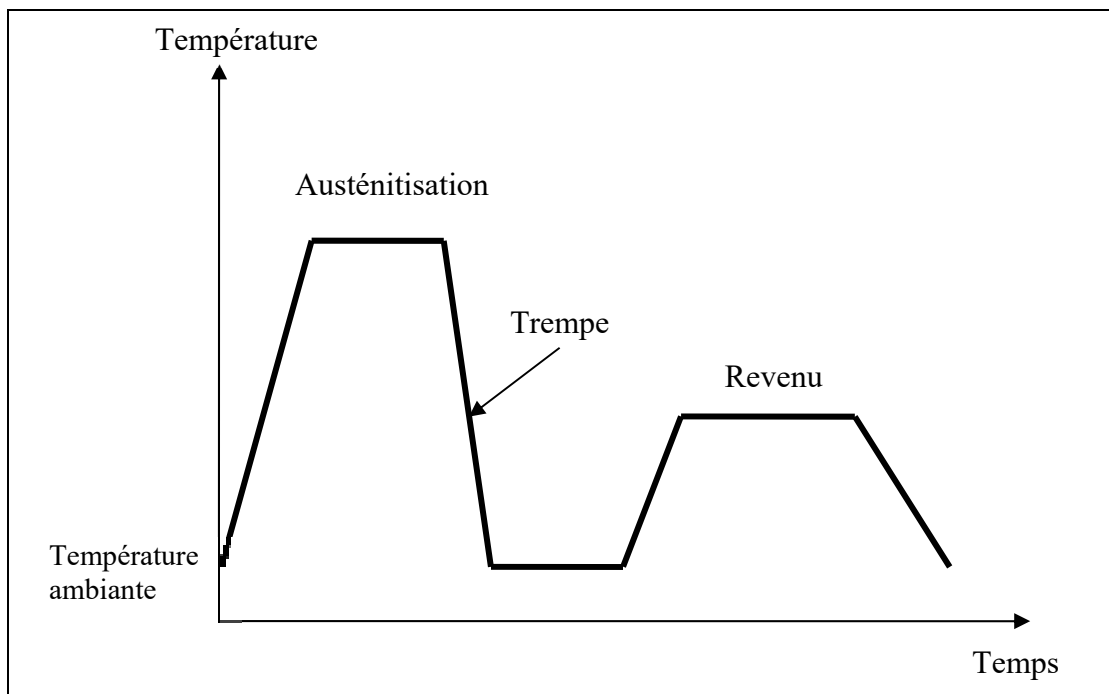


Figure 1-1. Cycle thermique de traitement trempe et revenu.

1.1 Les transformations de phases dans les aciers

L'acier est un alliage fer-carbone, qui peut contenir jusqu'à 2% massique de carbone (C). Le carbone demeure l'élément essentiel dans les aciers, cependant un groupe d'éléments d'alliage tels que : Mn, Si, Cr, Mo et Ni peuvent également être ajoutés dans le but d'améliorer les propriétés mécaniques désirées. Ces éléments doivent être ajoutés à l'élément de base, qui est le fer à l'état fondu, généralement à une température supérieure à 1600°C. Le fer pur présente plusieurs formes allotropiques comme le montre la Figure 1-2 (Alexey V. Sverdlin 2006; S. Babu, 2007).

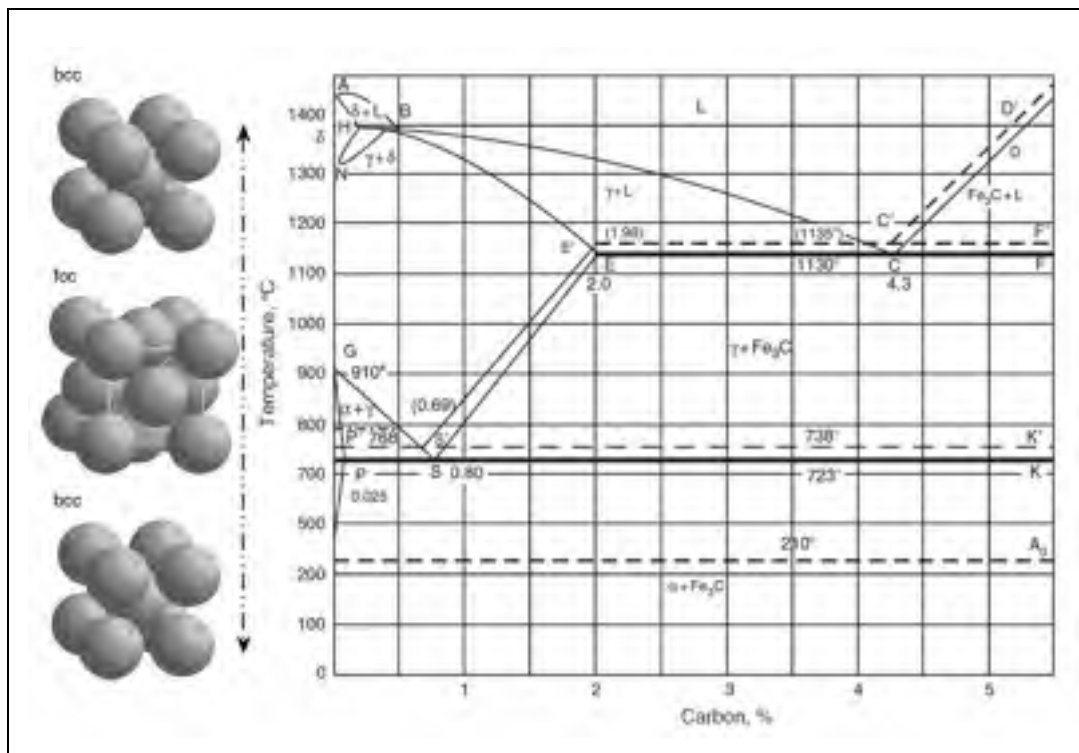


Figure 1-2. Diagramme de phase Fe-C (Alexey V. Sverdlin 2006; S. Babu, 2007).

Le diagramme de phase permet de décrire la composition des phases présentes en équilibre.

Le fer α (ferrite α) et δ (ferrite δ) possèdent un réseau cubique centré (C.C).

Le fer γ (austénite) possède un réseau cubique à faces centrées (C.F.C).

Pour des vitesses de refroidissement très lentes (pseudo équilibre) et à des températures inférieures à la température de fusion, la ferrite α dissout une petite quantité de carbone allant jusqu'à de 0,02% en poids à la température 723 °C qui est aussi la température à laquelle

l'austénite commence à se former au cours du chauffage et qu'on appelle aussi température eutectoïde Ac_1 . A une teneur de 0,8 % en carbone (composition eutectoïde) se forme la perlite à la température Ac_1 sous forme d'un agrégat de ferrite et de cémentite (Alexey V. Sverdlin 2006).

La grande différence de solubilité du carbone dans la phase austénitique γ et ferritique α , est parmi les raisons principales des traitements thermiques des aciers. Pour un refroidissement donné, l'austénite se décompose en différentes phases comme la ferrite, la perlite, la bainite et la martensite. On peut obtenir une grande variété de propriétés mécaniques, juste en contrôlant les variables du procédé de refroidissement. Pour une meilleure compréhension des comportements des aciers, les évolutions de la microstructure doivent être étudiées en détail. Cependant, les transformations martensitiques et bainitiques suscitent encore plus d'attention vu leurs positions dominantes dans les processus de durcissements (Bhadeshia, 2001).

Malheureusement, le diagramme de phases d'équilibre ne peut pas décrire les transformations hors équilibre à partir de l'austénite telle que la martensite ou la bainite, car elles nécessitent l'utilisation des diagrammes de transformation de phases. Pendant les traitements thermiques des aciers (chauffage et/ou refroidissement), les aspects concernant les cinétiques de transformations de phase sont aussi importants que les diagrammes d'équilibre, en l'occurrence, il faut utiliser des diagrammes décrivant les transformations de phase en fonction de la température, du temps ou du gradient de température (Reardon, 2011).

L'étude dans le cadre de ce projet sera limitée aux diagrammes de transformations isothermes (TTT) et aux diagrammes de transformation en refroidissement continu (TRC), qui sont détaillés dans la section 2.1.1.

1.1.1 L'austénitisation

L'opération consistant à maintenir en chauffe un acier à une température particulière dans le domaine austénitique pendant une durée bien déterminée est appelée : austénitisation. L'objectif de cette opération consiste à mettre en solution le carbone, mais notamment les autres éléments d'alliage et les précipités sous forme de carbures (Guy, 2000), donc il faut se placer dans les conditions favorisant la solubilité du carbone dans le fer ; l'acier sera chauffé

jusqu'à l'inhibition de la transformation de la ferrite à quelques degrés au-dessus de la température d'austénitisation A_{c3} (30-50°C), qui est appelée aussi "température de trempe" .

Lors de l'austénitisation, l'acier homogénéise sa structure par transformation du fer α en fer γ (Guy, 2000). La microstructure de l'acier est très sensible à ces deux paramètres : la température de chauffage et le temps de maintien. Beaucoup de travaux ont été menés pour étudier l'impact de ces deux paramètres sur la taille du grain austénitique (S.-J. Lee, 2008). La température d'austénitisation dépend de la teneur en carbone et des autres éléments d'alliages ainsi que de la vitesse de chauffage. En revanche, l'influence de la vitesse de chauffage ne peut pas être prise en compte dans le cadre du présent projet vu les faibles vitesses de chauffage impliquées (jusqu'à 24 heures pour atteindre l'homogénéisation de la température), même en supposant que des vitesses de chauffage élevées sont atteintes, le phénomène sera localisé seulement au niveau des surfaces à cause de l'inertie de conduction imposée par les grandes dimensions des pièces.

La température A_{c3} , peut être calculée par des modèles empiriques en fonction de la composition chimique de l'acier (% massique) comme celui de *Park* (Antonio Augusto Gorni 2012).

$$A_{c3} (^\circ\text{C}) = 955 - 350C - 25Mn + 51Si + 106Nb + 100Ti + 68Al - 11Cr - 33Ni - 16Cu + 67Mo \text{ (\% massique)} \quad (1-1)$$

1.1.2 La trempe

La trempe d'un acier se traduit par un refroidissement rapide à partir du domaine austénitique vers le domaine martensitique, dans le but de lui conférer le maximum de dureté possible par la formation de la martensite. L'eau est souvent utilisée comme milieu de trempe favorisé pour garantir une meilleure trempabilité, cela n'empêche pas qu'on peut tremper aussi dans d'autres milieux comme l'huile, une solution polymérique, l'air ou d'autres gaz (Hans M. Tensi, 2006). Cependant, le fait de cibler une trempabilité désirée limite indirectement le choix du milieu de trempe à utiliser (Kaynar, Gündüz, & Türkmen, 2013). Face à des pièces massives à tremper, la possibilité d'avoir le même niveau de trempabilité en surface et en cœur, est contrainte par

le fait que la vitesse de refroidissement est bien différente entre ces deux zones (Beaudet et al., 2012; N. I. Kobasko, Morhuniuk, & Ushakov, 2007).

La trempe intensive peut être sollicitée, lorsque l'on désire faire subir aux pièces en acier une trempe très rapide dans un objectif d'atteindre des couches plus profondes de martensite et améliorer les propriétés mécaniques. Pour y parvenir, des systèmes d'agitation (ex. système de pompage, jet d'eau ...etc.) sont souvent utilisés avec l'eau seulement ou en mélange avec une faible solution de sel comme milieu de trempe (Figure 1-4), dans le but de garantir un refroidissement uniforme sur l'ensemble des surfaces et par conséquent une distribution de phase plus homogène. Contrairement à la trempe conventionnelle, la trempe intensive vise à générer des contraintes compressives en surface (Figure 1-3), et profiter de leurs bienfaits pour créer une résistance contre les fissures et la fatigue (N. Kobasko, Aronov, & Powell, 2010). La trempe intensive est aussi connue par les trois types de catégories IQ-1, IQ-2 et IQ3, dont IQ-3 représente la condition de refroidissement la plus intense, et qui est caractérisée par le passage direct du film recouvrant la pièce trempée au stade de convection (voir la section 2.2.4), en utilisant l'eau comme milieu de trempe suivie d'une interruption qui permet le refroidissement à l'air cette fois quand le durcissement atteint la profondeur ciblée pour réduire les contraintes générées (Figure 1-4). Cette dernière technique est très efficace pour le durcissement de pièces avec de larges épaisseurs (Dean, Kobasko, Aronov, & Powell, 2009). En utilisant souvent des nuances d'aciers fortement alliés, on peut profiter davantage de leurs trempabilités pour former plus de martensite en profondeur.

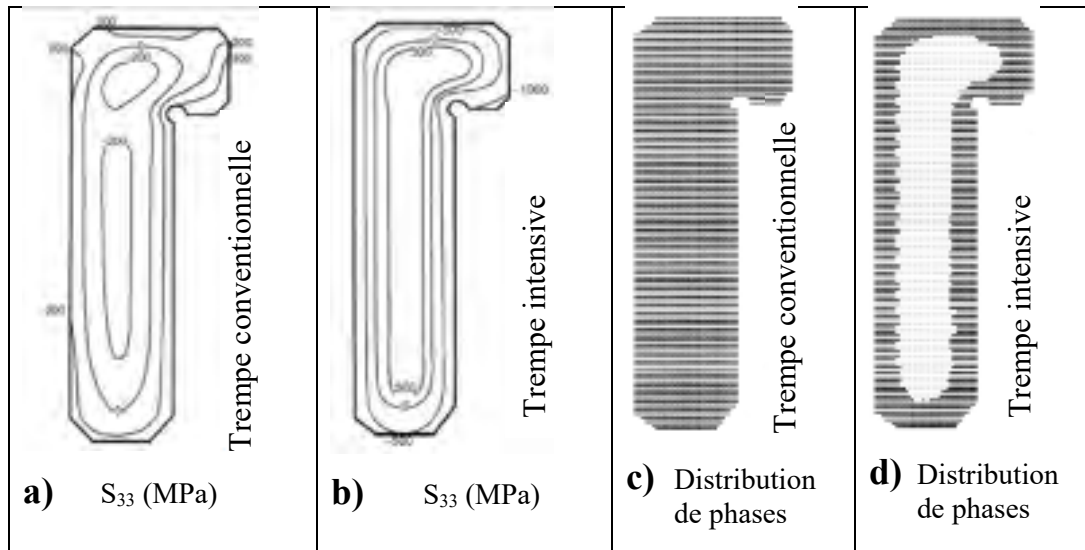


Figure 1-3. Comparaison de la distribution des contraintes principales S_{33} (a) et b)) et de phases (c) et d)) entre une trempe conventionnelle dans l'huile (a) et c)) et une trempe intensive en utilisant un jet d'eau (b) et d)) d'un acier 52100 (N. I. Kobasko et al., 2007)

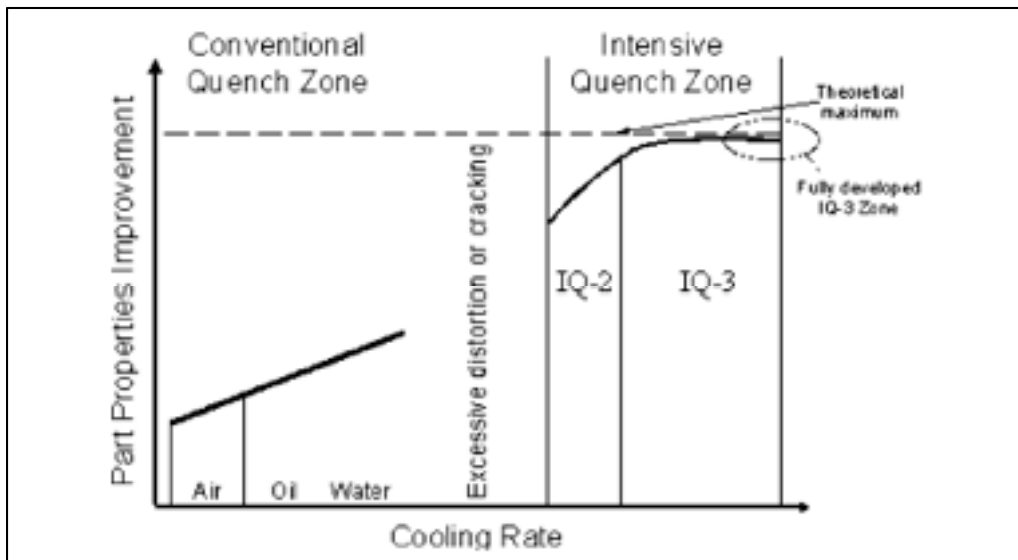


Figure 1-4. Influence des conditions de refroidissement par catégorie de trempe sur l'état de la conformité de la pièce (N. Kobasko et al., 2010)

1.1.2.1 La martensite

Le mécanisme de la transformation martensitique est un processus qui se fait sans diffusion, car la ségrégation du carbone et les autres éléments d'alliage nécessitent la diffusion sur des distances longues, en revanche cela suscite un temps encore plus long pour produire un effet appréciable. Les changements rapides en température causent un cisaillement et un déplacement coopératif des atomes de fer aux ordres interatomiques (transformation militaire) au sein d'une structure tétragonale centrée parallèle à un plan fixe, puisque le réseau cubique centré ne peut pas accueillir tout le carbone dissout dans la phase austénitique (Guy, 1998; Reardon, 2011).

Le changement de volume que subit la microstructure, crée une distorsion du réseau cristallin et génère des contraintes résiduelles. La transformation martensitique ne dépend pas seulement des vitesses de refroidissement, mais surtout de la température. Quand la vitesse de refroidissement est supérieure à la vitesse critique, la martensite commence à se former à partir de la température (M_s) annonçant le début de transformation, jusqu'à la température (M_f) qui annonce sa fin. Les températures M_s et M_f sont influencées par la nature de l'alliage (Reardon, 2011).

Selon la littérature, la température M_s peut être calculée par exemple par le modèle de Haynes (*Antonio Augusto Gorni 2012*) :

$$M_s(^{\circ}\text{C}) = 561 - 747C - 33Mn - 17Cr - 17Ni - 21Mo + 10Co - 7.5Si \quad (1-2)$$

(% massique)

Quand l'acier atteint la température M_f , la transformation martensitique s'arrête, et le reste de l'austénite γ non transformée est appelée austénite résiduelle.

Les températures M_s et M_f , sont directement influencées par la teneur du carbone comme illustré sur la figure ci-dessous (Figure 1-5).

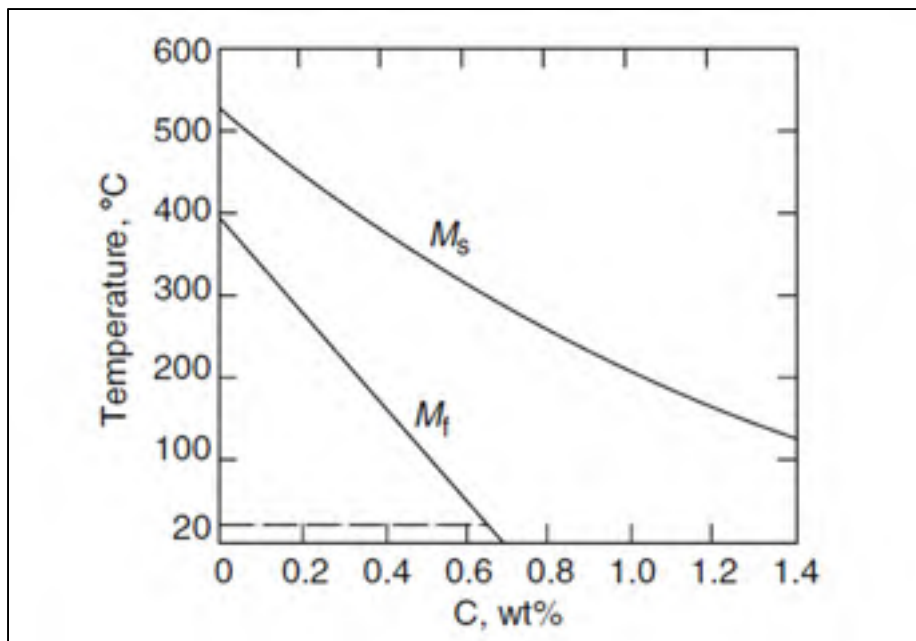


Figure 1-5. Effet de la teneur en carbone sur les températures M_s et M_f (Laurallice & George, 2010).

La température M_s est aussi influencée par l'état de contrainte mécanique appliqué σ , la Figure 1-6 schématise que lorsqu'un échantillon ayant subi une force de traction, sa température de transformation martensitique M_s est déplacée vers M_s' soit vers des températures supérieures. Le déplacement inverse de température et aussi possible sous l'effet d'une contrainte de compression. En revanche, le changement de la température M_s peut être associé indirectement à l'évolution de la déformation totale ; en effet cela peut être expliqué par la déformation due au phénomène de la plasticité induite par la transformation de phase (TRIP) qui sera traité avec plus de détails en section 2.3.1.2 (Božidar Liščić, 2006).

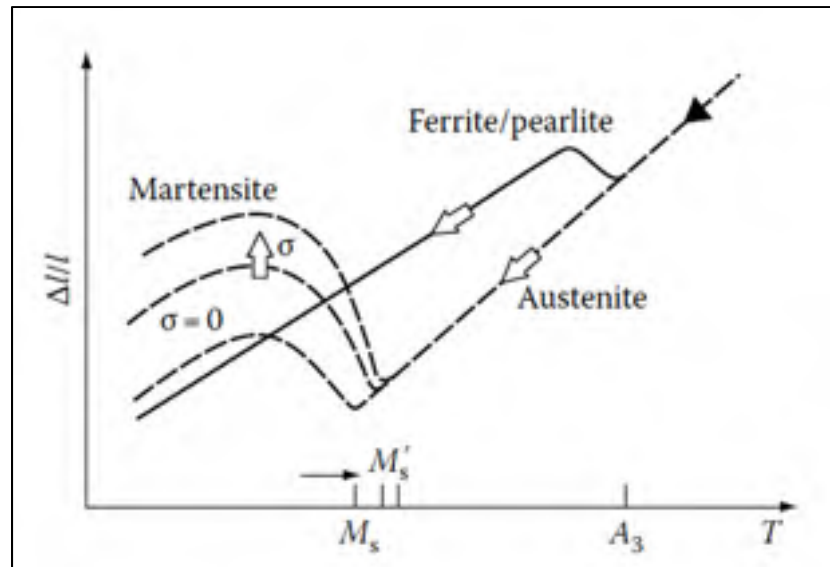


Figure 1-6. Effet des contraintes mécaniques de traction sur l'évolution du M_s (Hans M. Tensi, 2006)

Inoue & wang ont proposé une formulation pour évaluer la variation de la température M_s en fonction du chargement et qui peut être décrite comme suit (Inoue & Wang, 1985):

$$\Delta M_s = C_1 \sigma_m + C_2 J_2^{1/2} \quad (1-3)$$

Avec σ_m est la contrainte moyenne, J_2 le second invariant du tenseur des contraintes et C_1 , C_2 sont des constantes qui dépendent du matériau.

La morphologie de la martensite peut se présenter sous forme de plaques, qui sont caractérisées par des formes lenticulaires (cristaux sous forme de lentilles) avec un motif en zigzag de petites plaques (voir Figure 1-7 b,d). Cette morphologie est perçue à des teneurs en carbone supérieures à 1 %, tandis que la morphologie de la martensite en forme de lattes est retrouvée pour des teneurs de carbone allant jusqu'à environ 0,6% (voir Figure 1-7 a,c) (Reardon, 2011). La Figure 1-7 présente un schéma qui présente les deux morphologies décrites ci-dessus avec un exemple de microstructure correspondante pour chacune.

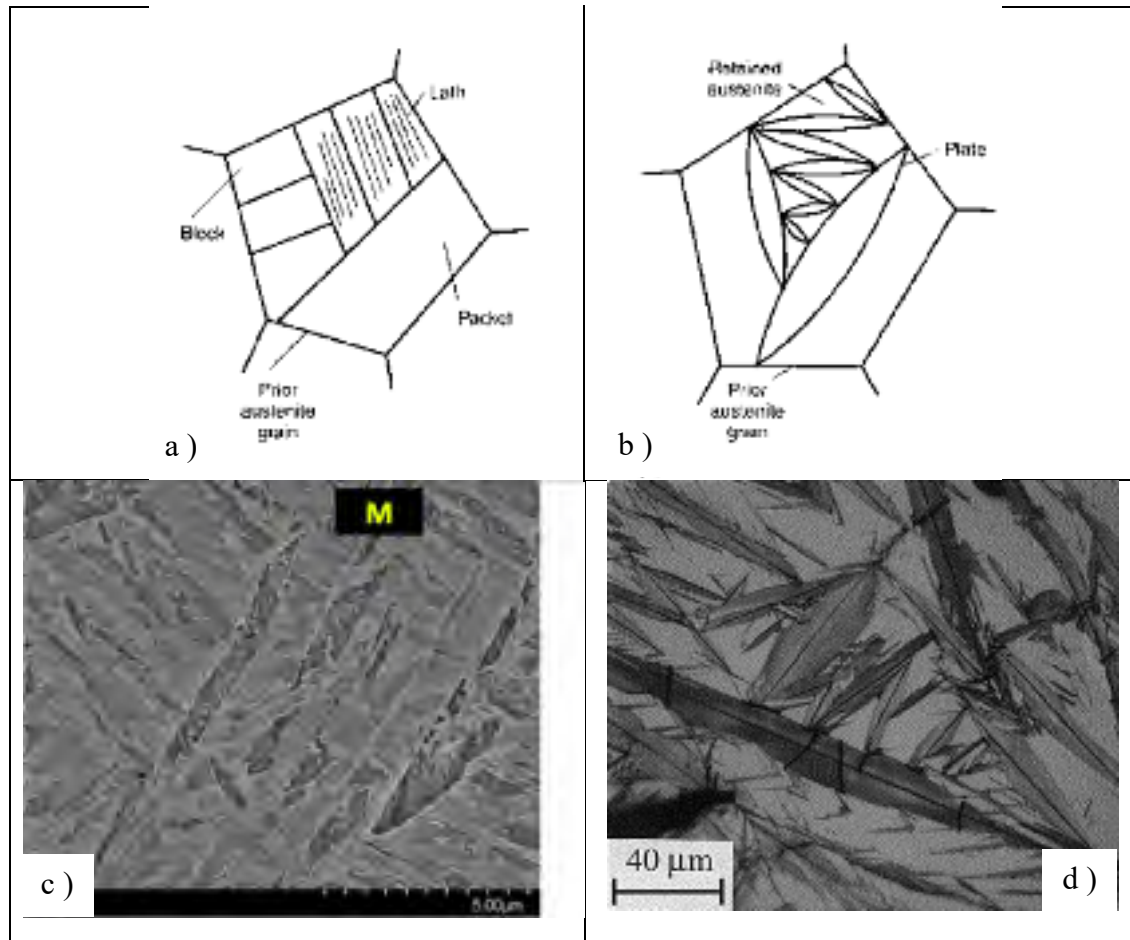


Figure 1-7. a) et b) Schématique des morphologies de la martensite (Reardon, 2011) , c) martensite en latte (0.35 % C) (Seyyed Hesamodin Talebi, 2018) et d) martensite en plaquette (1.86 % C) (Krauss, 1999).

1.1.2.2 La bainite

La bainite est une phase métastable (hors équilibre) distincte dans l'acier qui se transforme à partir de l'austénite quand les vitesses de refroidissement ne sont pas suffisamment rapides pour former la martensite, ni suffisamment lentes pour former la perlite, en utilisant un mécanisme de transformation de phase qui est à la fois partiellement diffusif et displacif (Lauralice & George, 2010) (Figure 1-8). La bainite est composée de la ferrite et de la cémentite. La transformation bainitique commence en dessous de la température B_s annonçant le début de la transformation, la fraction de la bainite transformée augmente quand la température décroît (Reardon, 2011).

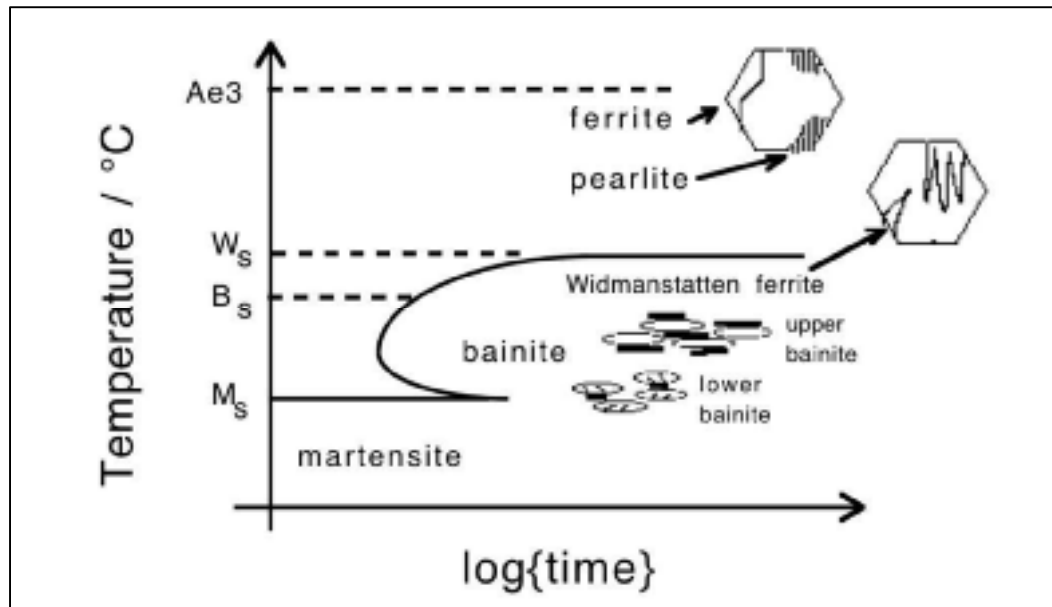


Figure 1-8. Diagramme TTT pour illustrer les températures de transformation bainitique (H.K.D.H.Bhadesha., 2001).

B_s peut être calculée par le modèle de Kirkaldy (Antonio Augusto Gorni 2012) comme suit :

$$B_s (°C) = 656 - 57.7C - 35Mn - 75Si - 15.3Ni - 34Cr - 41.2Mo \text{ (\% en masse)} \quad (1-4)$$

Similairement à la transformation martensitique, la transformation bainitique se caractérise aussi par une transformation displacive qui est due aux vitesses de refroidissement rapides, causant des cisaillements et déplacements d'atomes aux ordres interatomiques, mais associés aussi à une transformation diffusive surtout durant la croissance des germes.

On distingue deux types de morphologie de bainite (Bhadeshia, 2001; Zajac, Schwinn, & Tacke, 2005) comme montre la Figure 1-9.a) :

Bainite supérieure : est décrite par un amas de ferrite en forme de lattes parallèles formant des sous-unités, que l'on nomme paquets (sheaves), séparés par une bande contenant de la cémentite sous forme allongée ou de l'austénite résiduelle.

Bainite inférieure : est composée d'agrégats de la ferrite en forme de plaquettes et de petits carbures situés dans ou entre lesdites plaquettes. Une fine dispersion de la cémentite qui se situe dans les plaquettes se retrouve généralement avec de très faibles dimensions.

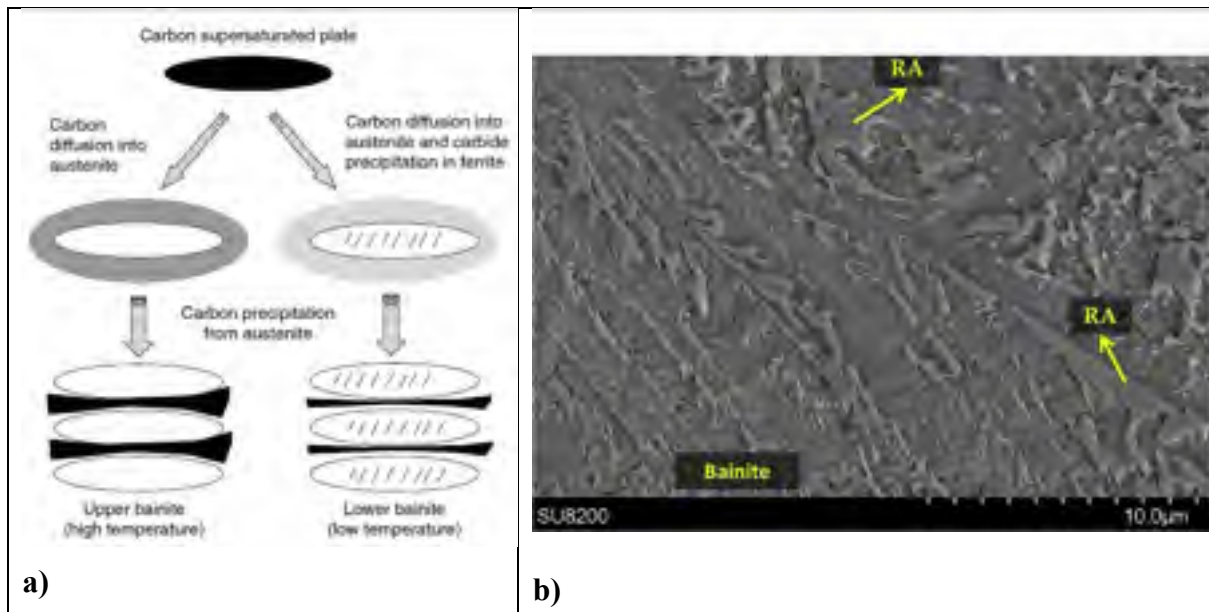


Figure 1-9. **a)** Morphologie de la bainite inférieure et supérieure (S. Babu, 2007) adapté du livre de (Bhadeshia, 2001). **b)** Morphologie expérimentale de la bainite supérieure (S. H. Talebi, Ghasemi-Nanasa, Jahazi, & Melkonyan, 2017).

CHAPITRE 2

LA PROBLÉMATIQUE DE LA MODÉLISATION DE LA TREMPE

La trempe est un phénomène multiphysique impliquant différents domaines (thermique, métallurgique et mécanique). Sa modélisation s'avère cruciale mais difficile à réaliser car elle nécessite une compréhension approfondie de chacun des domaines physiques impliqués dans le modèle pour avoir une vue d'ensemble du procédé, et surtout l'étude des mécanismes régissant les différents couplages impliqués. Cette approche permettra de développer des réflexions qui favorisent l'évaluation de l'impact des paramètres étudiés sur les résultats de la modélisation, mais plus particulièrement sur la réponse mécanique (distorsion, contraintes) (voir la Figure 2-1).

Il est certain que la nature du matériau utilisé influence de manière significative sur la réponse à la trempe, mais également les conditions de trempe qui peuvent en quelque sorte influencer sa sévérité (paramètres du procédé) telles que, la température du four durant l'étape de l'austénitisation, le milieu de trempe (agitation, température, fluide ...etc.), et aussi la taille de la pièce à tremper.

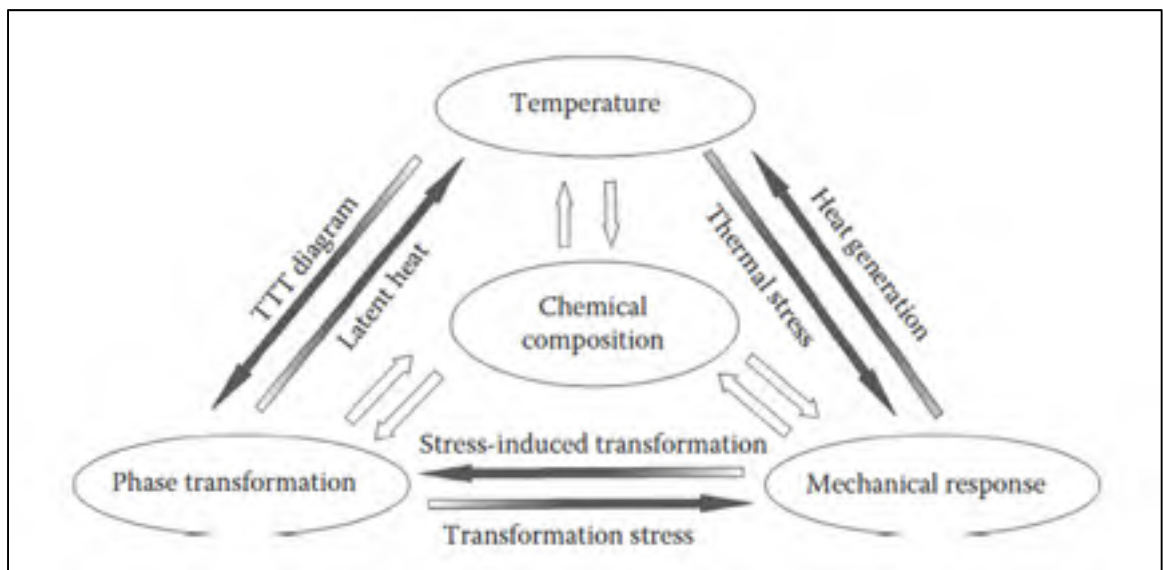


Figure 2-1. Couplages existants entre les domaines durant la simulation de la trempe (Gustavo Sánchez, 2009).

La modélisation de chacun des différents domaines physiques impliqués lors de la trempe est traitée séparément dans les prochaines sections ainsi que les couplages qui les régissent.

2.1 Modélisation métallurgique

Les procédés de trempe impliquent différentes transformations de phases dans les aciers, qui résultent de la diversité des régimes de refroidissement dans la pièce. En fonction du refroidissement encouru, l'austénite commence sa décomposition en d'autres phases avec des proportions évolutives à partir de la température d'austénitisation. Ces transformations successives sont accompagnées par une variation des propriétés physiques, thermiques et mécaniques de chaque phase naissante en fonction de la température.

La description des propriétés de l'acier à l'échelle macroscopique durant ou après traitement thermique, nécessite au moins la connaissance préalable des propriétés microscopiques des phases présentes (phase mère et transformées), ainsi que leurs proportions respectives afin de les combiner ensemble hypothétiquement par le biais de la règle des mélanges (équation (2-7)). Les propriétés des phases se retrouvent souvent avec des caractéristiques non linéaires très sensibles aux traitements thermiques et thermomécaniques (Anca, 2008). L'utilisation de modèles métallurgiques basés sur le calcul des cinétiques isothermes et non isothermes (à partir de diagrammes TTT, TRC), permet de calculer les évolutions temporelles de la microstructure et de garantir une bonne prédiction de la répartition des phases après trempe ce qui permettra de remonter aux propriétés du matériau à l'échelle macroscopique.

Beaucoup de travaux expérimentaux ont été entrepris pour construire les diagrammes (TTT, TRC) (voir la Figure 2-3). La disponibilité de larges plages de nuances d'acier, plus leurs sensibilités aux variations de la composition chimique, rend impossible la production de suffisamment de diagrammes à usage généralisé vu le grand nombre de combinaisons possibles (N. Saunders, 2004).

L'utilisation de cinétiques de transformation de phase représentées par un modèle métallurgique précis dans la simulation de la trempe, permettra d'ailleurs d'intégrer des

évolutions réalistes des proportions volumiques des phases (transformations de phase) dans le calcul de la température (Figure 2-2). Par conséquent, la pertinence des résultats générés par rapport à la température et le calcul de la transformation de phases influencera directement la précision des calculs mécaniques (contraintes, déformations, vitesses de déformation, déplacements...etc.).

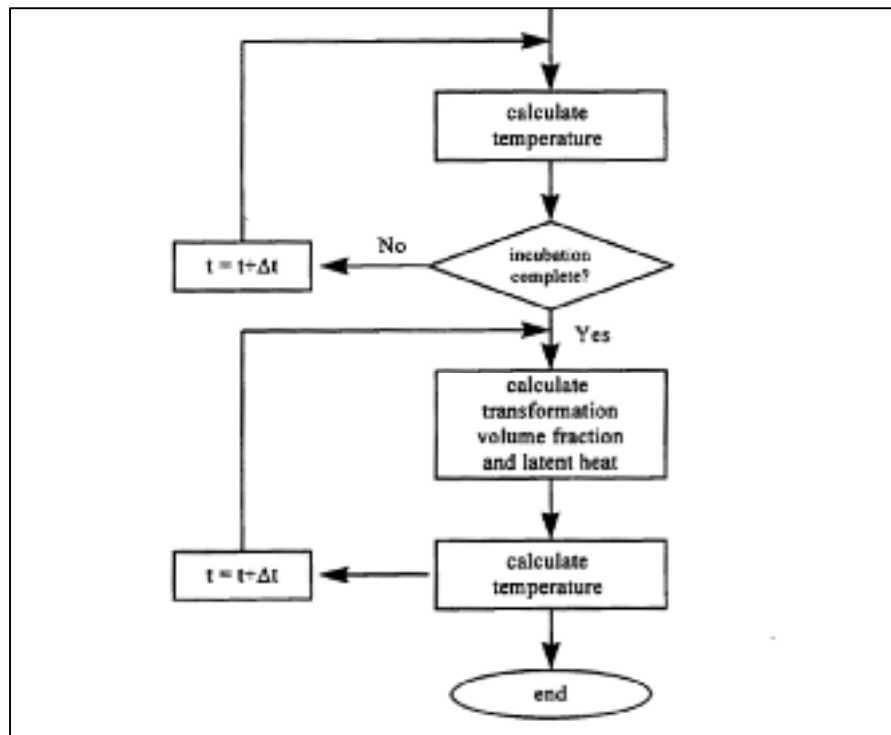


Figure 2-2. Procédure d'incorporation du calcul de la transformation des phases dans les calculs thermiques (Chen, 1998)

2.1.1 Cinétique des transformations diffusives

2.1.1.1 Modèle de Johnson–Mehl–Avrami–Kolmogorov (JMAK)

Le diagramme de transformation isotherme (Figure 2-3.a)), appelé TTT (Température Temps Transformation), fait la corrélation entre la quantité transformée d'une phase donnée et le temps à une température constante (Guy, 1998). Mais il permet aussi de caractériser le processus de décomposition de l'austénite à une température donnée, durant lequel le temps

d'incubation (courbe en " C " à gauche pour chaque phase) ainsi que le temps nécessaire pour compléter la transformation (courbe en " C " à droite pour chaque phase) peuvent être déterminés. L'instant où un alliage passe par les températures Ac_3 et Ac_1 lors de la trempe est généralement considéré comme un temps de référence (temps zéro).

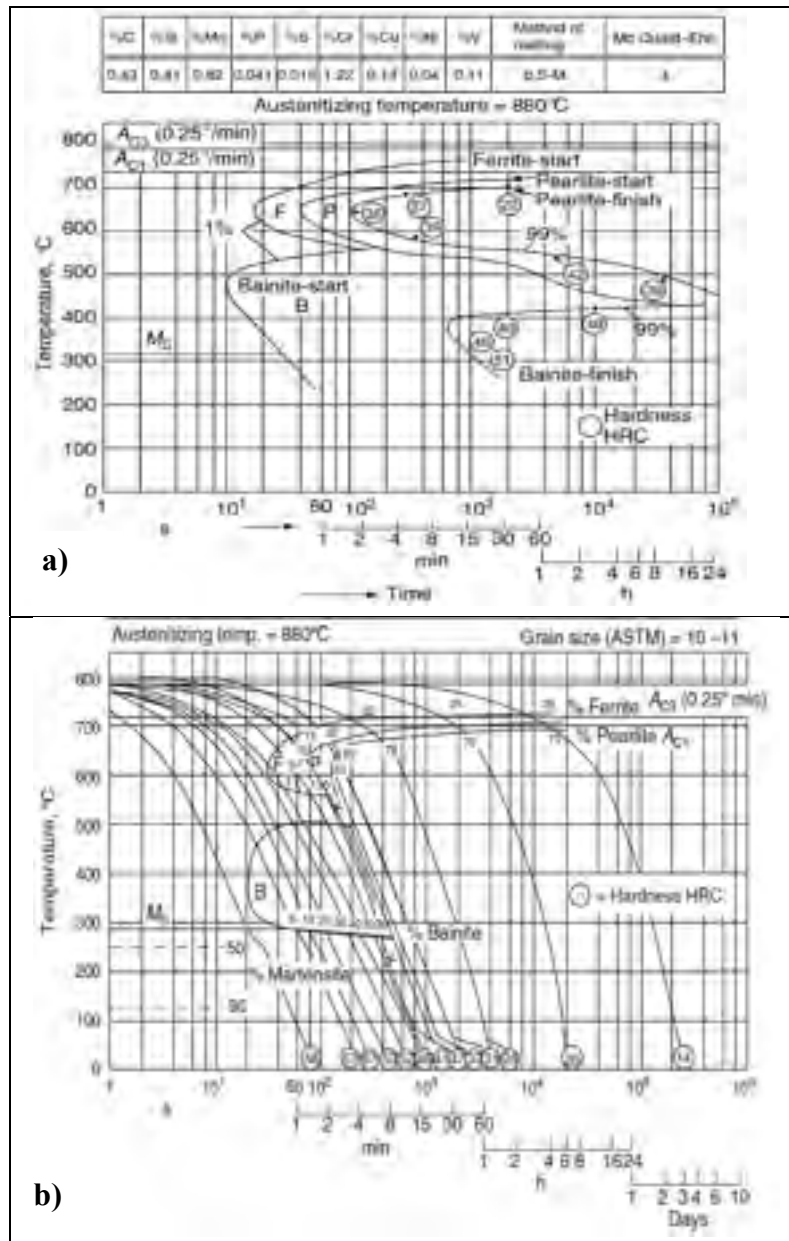


Figure 2-3. Diagrammes **a)** TTT et **b)** TRC pour la nuance d'acier : DIN 50CrV4 (G.E. Totten, 2006).

Kolmogorov, Johnson, Mehl et Avrami proposent le concept de volume excédentaire, qui considère le chevauchement entre les phases sans interférence mutuelle, ou entre les phases ayant nucléées les unes dans les autres afin de modéliser généralement les cinétiques de transformation de phase à une température constante (ANNEXE I). L'application de ce concept permet de modéliser l'évolution temporelle de la fraction volumique de transformation (Bhadeshia, 2001) :

$$\xi = 1 - \exp\{-k_A t^n\} \quad (2-1)$$

Les valeurs spécifiques de k_A et n dépendent des conditions de nucléation et de croissance.

Le modèle de JMAK peut évoluer vers des modèles modifiés qui considèrent en plus la concentration du carbone et le chargement appliqué dans le cas de la transformation de la phase perlitique (Narazaki et al., 2002):

$$\xi = 1 - \exp\left\{-f_t(T)f_s(\sigma_{ij})f_C(C) \int_0^t (t - \tau)^3 d\tau\right\} \quad (2-2)$$

$f_t(T)$, $f_s(\sigma_{ij})$ et $f_C(C)$, représentent respectivement, une fonction de la température T , une fonction de contraintes σ_{ij} et une fonction de la teneur du carbone C .

L'intégration de l'impact des contraintes σ_{ij} dans le calcul des cinétiques de transformation peut s'expliquer par la déviation du diagramme TTT suite à un chargement mécanique (Narazaki et al., 2002) .

2.1.1.2 Modèle de Kirkaldy et Venugopalan

Kirkaldy a présenté un modèle permettant de calculer la décomposition de l'austénite en ferrite et perlite (N. Saunders, 2004). Un ensemble de courbes en forme " C " ont été générées pour décrire l'évolution de la transformation d'une fraction x d'austénite à une température T en

fonction du temps (t) ; ces fonctions sont décrites par la formule générale suivante (Buchmayr & Kirkaldy, 1990) :

$$\tau(x, T) = \frac{1}{\alpha(N) D_{eff} \Delta T^n} \cdot \int_0^x \frac{dx}{x^{\frac{2(1-x)}{3}} (1-x)^{\frac{2x}{3}}} \quad (2-3)$$

Où $\alpha = 2^{(N-1)/2}$, β , β est un coefficient empirique, N est la taille de grain ASTM, D_{eff} est un coefficient de diffusion effectif, ΔT est le sous-refroidissement en dessous de A_{c3} , et n est un coefficient qui dépend du mécanisme de la diffusion effective.

Le modèle de Kirkaldy peut aussi être formulé à l'aide d'un produit de quatre fonctions pour décrire les cinétiques de transformation diffusives. Chacune des fonctions dépend d'un des quatre paramètres suivants: composition chimique, taille du grain, température, fraction volumique des phases (Cardinaux, 2008).

La forme du modèle de Kirkaldy peut être représentée par la forme générale suivante (M. V. Li, D. Niebuhr, L. Meekisho, & D. Atteridge, 1998a):

$$\tau(x, T) = \frac{F(C, Mn, Si, Ni, Cr, Mo, N)}{\Delta T^n \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right)} \cdot S(x) \quad (2-4)$$

La connaissance de la fonction F (empiriquement) et des paramètres n , N et x permet la reconstruction des diagrammes TTT pour plusieurs nuances d'aciers en utilisant seulement la taille de grain austénitique et la composition chimique de l'acier considéré.

Malheureusement, le modèle initial de Kirkaldy rencontre beaucoup de limitations pour représenter les aciers moyennement et fortement alliés (Zhanli Guo, Saunders, Miodownik, & Schillé, 2009; N. Saunders, 2004), du fait qu'il sous-estime leurs trempabilités réelles qui ont été évaluées expérimentalement. Certains auteurs ont modifié le modèle initial en attribuant la limitation observée essentiellement à la fonction qui représente la taille de grain austénitique, la manière par laquelle l'effet de la cinétique des différents éléments d'alliage présents a été

formulé (multiplicative ou additive), mais surtout au modèle utilisé pour représenter la cinétique de la réaction $S(x)$ (M. V. Li et al., 1998a).

2.1.1.3 Principe d'additivité de Scheil

Les modèles précités proposent des formalismes mathématiques capables de décrire la cinétique de transformation dans des conditions isothermes. Or les conditions de transformation non isothermes sont souvent les plus rencontrées dans les pratiques industrielles (Malakizadi, 2010).

L'utilité pratique des modèles susmentionnés est limitée à certains procédés spécifiques tels que le recuit isotherme, la trempe bainitique étagée et la trempe martensitique étagée qui consistent à tremper rapidement la pièce depuis la température d'austénitisation jusqu'à une température de maintien choisie pour former la microstructure ciblée (Figure 2-4) (Božidar Liščić, 2006).

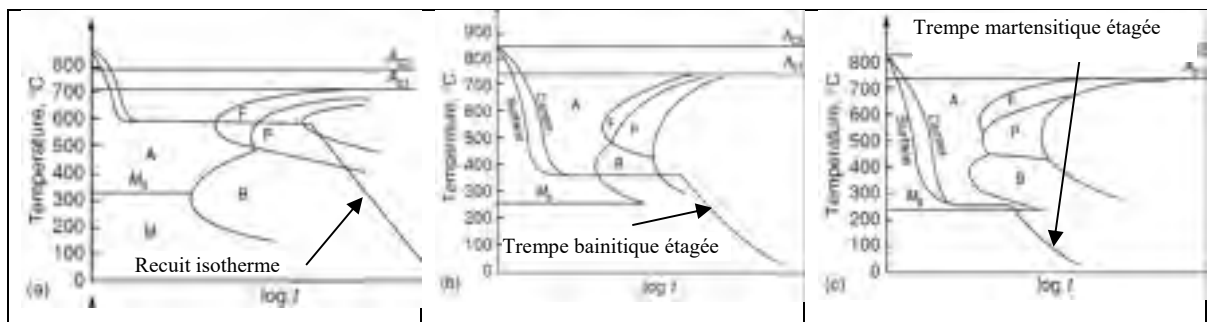


Figure 2-4. Traitements thermiques isothermes: (a) Recuit isotherme (b) Trempe bainitique étagée (c) Trempe martensitique étagée (Božidar Liščić, 2006).

Pour surpasser cette limitation, Scheil a proposé une hypothèse qui permet d'établir une relation entre le diagramme (TTT) et (TRC). En d'autres termes, la détermination du temps d'incubation dans le cas d'un refroidissement an-isotherme repose sur la connaissance des cinétiques de transformation isothermes intrinsèques à l'acier utilisé (Malakizadi, 2010).

Ce principe stipule que le processus thermique non isotherme pour un refroidissement donné, peut être représenté par la décomposition de la courbe de refroidissement en une série (n) de

sous étapes élémentaires pour lesquelles le refroidissement est supposé isotherme ($\int_0^t T(t)dt = \sum_n T_i \Delta t_i$) comme illustré dans la Figure 2-5.

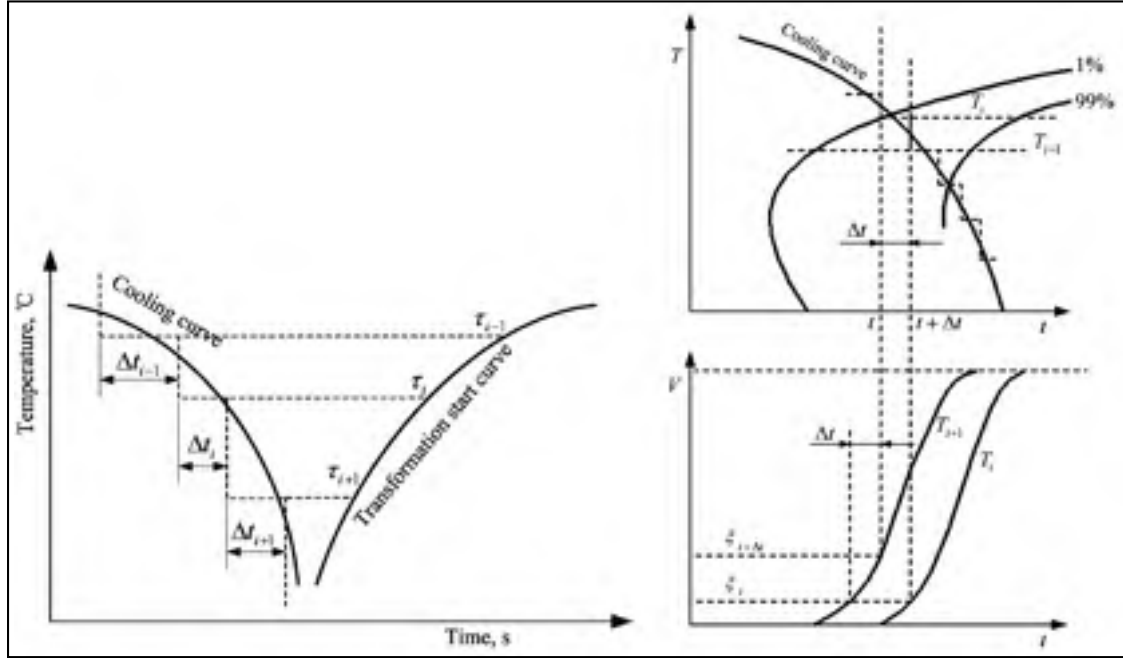


Figure 2-5. Calcul du temps d'incubation non isotherme à partir de diagrammes TTT en utilisant le principe d'additivité de Scheil (H. Li, Zhao, He, & Mo, 2009).

On peut définir S comme étant la somme de Scheil pour le dernier incrément (n) : si cette somme atteint l'unité, le temps d'incubation, t_{inc} dans les conditions considérées de refroidissement (non-isothermes) est aussi supposé atteint.

$$S = \sum_{i=1}^n \frac{\Delta t_i}{\tau_{TTT}(T_i)} \quad (2-5)$$

Où τ_{TTT} est le temps d'incubation pour chacune des conditions isothermes (différentes températures T_i).

Du moment que la somme de Scheil dépasse l'unité ($S \geq 1$), il est possible de considérer que le temps d'incubation est atteint, donc la nouvelle phase est apparue et la croissance du germe s'est amorcée (Braz Fernandes, Denis, & Simon, 1985; H. Li et al., 2009).

Les détails sur le calcul de l'évolution de la fraction volumique de phase dans le cas des cinétiques diffusives dans le cas d'un refroidissement non isotherme sont explicités dans les sections 4.4 , 5.2.2 et 6.2.2.

1.1.2 Cinétique de transformations non diffusives

La transformation martensitique est communément considérée comme une transformation indépendante du temps à une température inférieure à M_s . De plus, on assiste quand même à une phase de nucléation et de croissance, mais puisque la vitesse de croissance dépasse de loin la vitesse du volume transformé, la transformation est entièrement contrôlée par nucléation. En fait, l'interface austénite/martensite se déplace à une vitesse supersonique dans le matériau. De telle sorte que la cinétique de transformation est essentiellement contrôlée par la vitesse de refroidissement et par la température de transformation M_s (Şimşir, 2008a).

Koistinen et Marburger (K-M) ont proposé un modèle qui décrit la décomposition de la fraction volumique de la martensite (Wei, 2008):

$$\xi_M = \xi_\gamma (1 - \exp\{-\Omega (M_s - T)\}) \quad (2-6)$$

Où Ω est une constante pour la plupart des aciers, qui prend souvent la valeur 0.011 qui est censée être indépendante de la composition chimique (Şimşir, 2008a). Pourtant (Van Bohemen & Sietsma, 2009) démontrent que cette constante peut varier sous l'influence de la composition chimique de l'acier, et donc elle influence forcément la cinétique de transformation.

Le diagramme présenté sur la Figure 2-6, décrit un algorithme typique qui est généralement utilisé pour le calcul de la décomposition de phases dans le cas des cinétiques de

transformations diffusives et non diffusives, selon les conditions de transformation présentes à chaque incrément de temps.

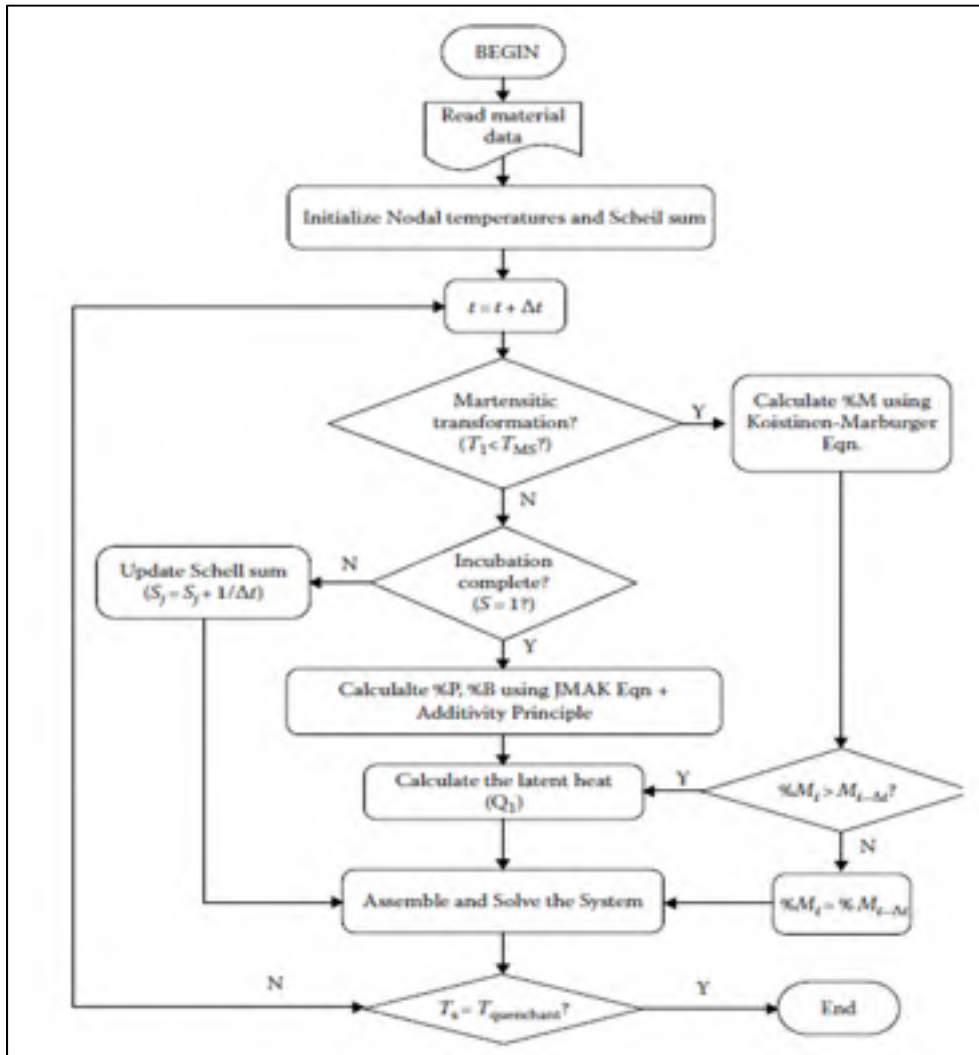


Figure 2-6. Diagramme de calcul des décompositions de phases (Caner Şimşir & C. Hakan Gür, 2010).

2.1.3 Propriétés macroscopiques de la mixture des phases

Les propriétés thermophysiques ou thermomécanique à l'échelle macroscopique du matériau peuvent être approchées en considérant les propriétés microscopiques de chacune des phases constituantes (Figure 2-7), le mélange des phases peut être pondéré par une loi linéaire où P représente une propriété moyenne du mélange (propriété thermophysique ou

thermomécanique, ex. $C_p, \lambda, \sigma_Y \dots$ etc.), P_k et ξ_k sont respectivement la propriété et la fraction volumique du k-ième constituante du mélange de phases (Şimşir, 2008b) :

$$P(T, \xi_k) = \sum_1^n P_k \xi_k \quad (2-7)$$

Cependant une loi de mélange sous sa forme générale, s'écrit comme suit (Şimşir, 2008a) :

$$P(T, \xi_k) = \left(\sum_1^n (P_k)^M \xi_k \right)^{\frac{1}{M}} = \sqrt[M]{\sum_1^n (P_k)^M \xi_k} \quad (2-8)$$

Où P_k et P représentent respectivement la propriété du k-ième composant du mélange. Particulièrement quand $M=1$ la règle de mélange est dite linéaire (arithmétique).

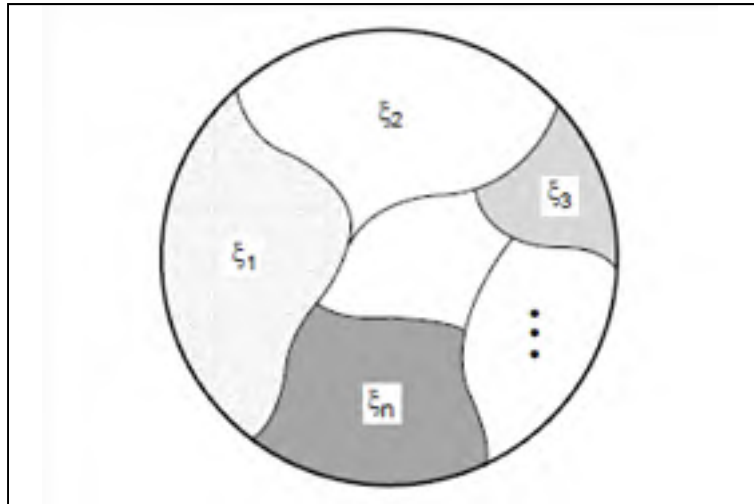


Figure 2-7. Concept de la mixture des fractions de phase de ξ_1 à ξ_n (T.Inoue, 2002)

2.2 Modélisation thermique

Une compréhension globale et profonde des phénomènes de transfert de chaleur qui se produisent durant le procédé de trempe, permettra de prédire de manière précise l'historique thermique dans la pièce, et s'approprier un modèle thermique de prédiction puissant.

L'utilisation d'un modèle thermique imprécis durant la simulation du procédé de la trempe (coefficient du transfert de chaleur, propriétés thermophysiques...etc.) finira par induire des erreurs considérables au niveau de la prédiction des profils thermiques ainsi que sur l'évolution de la microstructure dans la pièce trempée surtout si le modèle métallurgique n'est pas incorporé, l'impact de ces erreurs est plus important (double) sur la prédiction des résultats mécaniques (contraintes résiduelles, distorsions...etc.) du fait du fort couplage entre la thermique et la mécanique (Figure 2-8) (Şimşir, 2008b).

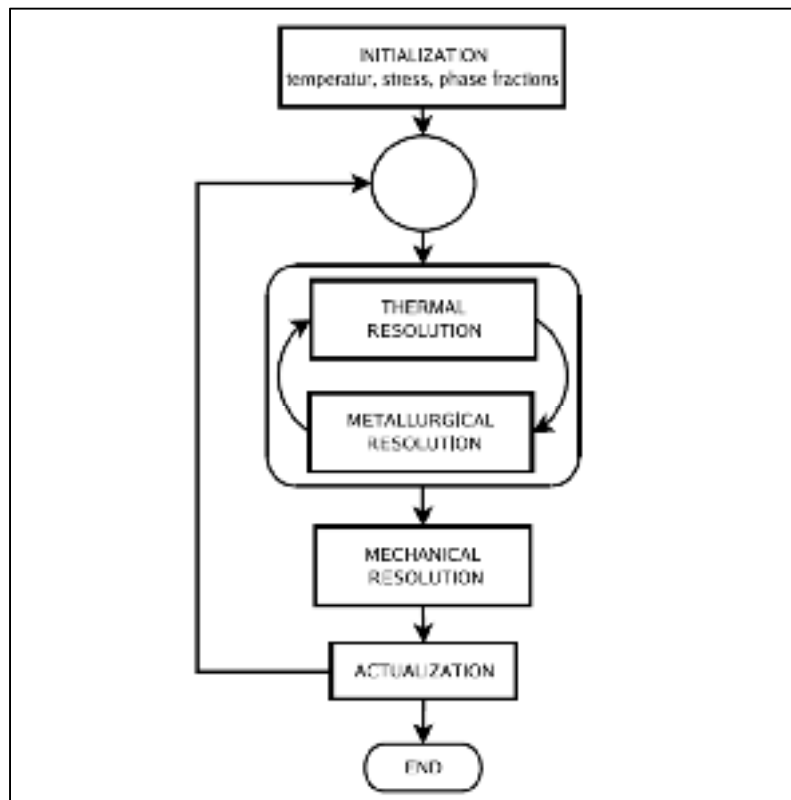


Figure 2-8. Procédure de l'incorporation du calcul métallurgique dans la simulation de la trempe (Anca, 2008).

2.2.1 Formulation générale du problème thermique

La modélisation du transfert de chaleur lors du procédé de trempe revient à traiter un problème thermique transitoire régi par l'équation de la chaleur (équation de Fourier pour la conduction) et par les conditions aux frontières sur les surfaces libres.

Considérant que le domaine thermique est altéré par la chaleur latente libérée à la suite des transformations de phases, l'équation peut être exprimée sous sa forme la plus générale par :

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}(\lambda \nabla T) + \dot{q} \quad (2-9)$$

où ρ , C_p , et λ sont respectivement la densité, la chaleur spécifique et la conductivité thermique d'un mélange de phases données en fonction de la température, $\dot{q}$ étant la source de chaleur interne due à la chaleur latente libérée (Şimşir, 2008b).

Il faut noter que les différentes propriétés thermophysiques utilisées décrivent une moyenne qui s'appuie sur la règle du mélange décrite par l'équation (2-7).

2.2.2 Chaleur latente

La densité d'une source de chaleur interne libérée lors de la transformation de phase pourra être calculée par l'équation suivante (Şimşir, 2008b):

$$\dot{q} = \Delta H_k \dot{\xi}_k = \Delta H_k \frac{d\xi_k}{dt} \quad (2-10)$$

où ΔH_k et $d\xi_k$ représentent, respectivement la chaleur latente libérée par la transformation, et $d\xi_k$ la fraction volumique du k-ième constituant durant un temps dt (en secondes). La chaleur latente peut aussi être calculée par la différence d'enthalpie entre la phase mère et la phase transformée. Des études ont été conduites pour quantifier l'effet de l'intégration de la chaleur latente sur les résultats de simulation lors de la trempe. Elles montrent une amélioration impressionnante concernant la prédiction de l'évolution de la température ainsi que la distribution de phases (Woodard, Chandrasekar, & Yang, 1999).

La calorimétrie différentielle à balayage ou *D.S.C. (Differential Scanning Calorimetry)* est souvent utilisée comme technique expérimentale pour la mesure de la chaleur latente (Wilthan, Schützenhöfer, & Pottlacher, 2017), par contre, cela nécessite des équipements très spécialisés pour des mesures de températures très élevées (températures supérieures à 650 °C) (Şimşir, 2014). Néanmoins la mesure expérimentale dépend de la connaissance de la chaleur spécifique ainsi que de la fraction de phase transformée qui est implicitement liée au taux de refroidissement (Juan J., 2008).

Des méthodes d'optimisation basées sur les méthodes inverses soit en utilisant la méthode EF (K.-Y. Wang, Jin, Xu, Chen, & Lu, 2015) ou les différences finies (Lee & Lee, 2009) montrent des résultats prometteurs pour l'estimation de la chaleur latente.

Plusieurs modèles empiriques existent pour estimer la quantité de la chaleur latente libérée durant la transformation d'une phase donnée en fonction de la température.

Le tableau suivant propose certaines formules empiriques utilisées pour l'estimation de la chaleur latente générée pour chaque transformation de phase.

Tableau 2-1. Formules empiriques pour le calcul de la chaleur latente estimée pour différentes transformations de phase (Porto de Oliveira, Savi, Pacheco, & Souza, 2010).

Phase transformation	ΔH (J/m ³)
Austenite → ferrite	$1.082 \times 10^2 - 0.162(T + 273) + 1.118 \times 10^{-4}(T + 273)^2 - 3.000 \times 10^{-8}(T + 273)^3 - \frac{3.501 \times 10^4}{(T + 273)}$
Austenite → pearlite, upper and lower bainite	$1.560 \times 10^9 - 1.500 \times 10^6 T$
Austenite → martensite	6.400×10^8

2.2.3 Les conditions aux limites (surfaces libres)

Pour bien situer le problème thermique dans le contexte industriel, les conditions initiales ainsi que les conditions aux limites doivent être bien définies.

La densité de flux Φ à travers une surface de température T_s peut s'écrire de la manière suivante :

$$\Phi(T_s, T_f) = h(T_s - T_f) = -\lambda \frac{\partial T}{\partial n} \quad (2-11)$$

Avec T_s la température de la surface S , T_f la température ambiante, h le coefficient de transfert de chaleur par convection et $\frac{\partial T}{\partial n}$ étant la variation de la température suivant la direction normale à la surface (n) (Dong-li Song 2006).

De manière générale, les conditions aux limites utilisées pour la modélisation du problème thermique de la trempe peuvent être soit (Cardinaux, 2008) :

- Convection et rayonnement;
- Température imposée sur la surface (conditions Dirichlet);
- Flux imposé sur la surface (conditions Neumann).

1.1.4 Généralités sur le coefficient de transfert thermique durant la trempe

Durant la trempe à l'air, le coefficient du transfert thermique est composé d'un coefficient de transfert convectif h_c et radiatif h_r de telle sorte que le coefficient du transfert global est une combinaison des deux, $h_{air} = h_r + h_c$

Le coefficient du transfert radiatif h_r peut être représenté par l'expression suivante :

$$h_r = \epsilon \sigma (T_s^2 + T_f^2)(T_s - T_f) \quad (2-12)$$

avec ϵ : l'émissivité de rayonnement de la surface et σ : la constante de Stefan-Boltzmann.

Une formulation empirique du coefficient convectif du transfert thermique h_c dû au refroidissement de l'air pourra se mettre sous la forme (Dong-li Song 2006) :

$$h_c = 2.2^4 \sqrt{T_s - T_f} \quad (2-13)$$

Le coefficient du transfert thermique est un paramètre essentiel pour la modélisation de la trempe à l'eau, car il est capable de renseigner sur sa sévérité. Cependant, il est difficile de l'estimer vu sa sensibilité aux faibles variations des conditions du bain de trempe (température, agitation, nature du fluide...etc), et aux conditions de la pièce à tremper (température, géométrie, état de surface, orientation de la pièce, propriétés physiques...etc.) (Maniruzzaman & Jr., 2004).

Par exemple durant la trempe à l'eau, et surtout au début de l'immersion, on assiste à une variation très sensible du coefficient de transfert thermique à la surface de la pièce trempée par rapport à la mouillabilité de surface. La Figure 2-9 illustre que la mouillabilité de la surface ne s'effectue pas de manière instantanée, plutôt via un front de mouillage qui se déplace verticalement le long de la pièce en fonction du temps, impliquant des variations du HTC due au changement des conditions du contact solide liquide (Pizetta Zordão, Oliveira, Totten, & Canale, 2019).

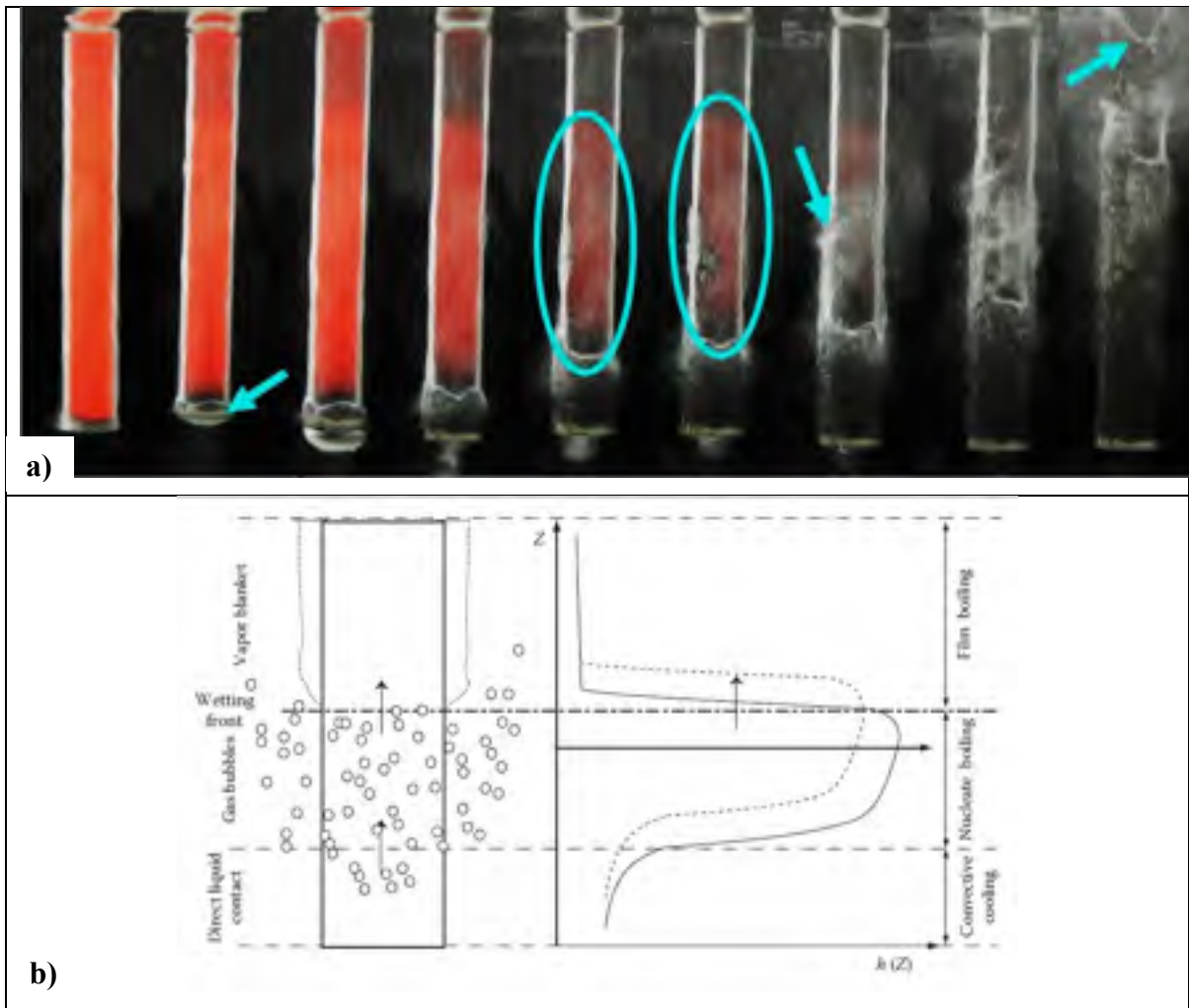


Figure 2-9. **a)** Mouillabilité de la surface d'un échantillon cylindrique en acier trempé dans l'eau distillée à 45°C (les flèches indiquent le point d'effondrement du film de vapeur et les cercles montrent la propagation du front de mouillage) (Pizetta Zordão et al., 2019), **b)** Schématisation de la variation et de la transition du HTC en fonction de la hauteur dans un front du mouillage (Şimşir, 2009).

Les différentes variabilités de ce coefficient au niveau de l'interface eau / surface peuvent être expliquées par des événements thermophysiques et thermochimiques complexes qui se produisant à l'interface de la pièce trempée (Şimşir, 2008a).

Les stades qui caractérisent le transfert de chaleur lors de l'immersion de la pièce dans l'eau durant le processus de refroidissement sont (Pizetta Zordão et al., 2019) :

- Le stade de couverture par un film de vapeur (vapor blanket) : Une phase vapeur stable est formée autour de la surface, cette vapeur forme une couverture qui agit par la suite comme un isolant en diminuant le flux de chaleur du métal vers le fluide de trempe.
- Le stade de l'ébullition nucléée (nucleate boiling) : la vitesse de refroidissement est maximale durant cette phase.
- Le stade convectif : on atteint le régime convectif lorsque la température du liquide est inférieure à la température d'évaporation.

Chacun des stades précités est associé à un régime de refroidissement distinct. Le stade initial demeure hautement transitoire dû au contact avec le liquide. Les étapes critiques et des changements associés dans les flux de chaleur et le coefficient de transfert de chaleur sont illustrés sur la Figure 2-10 (Narayan Prabhu & Ashish, 2002; Şimşir, 2008a).

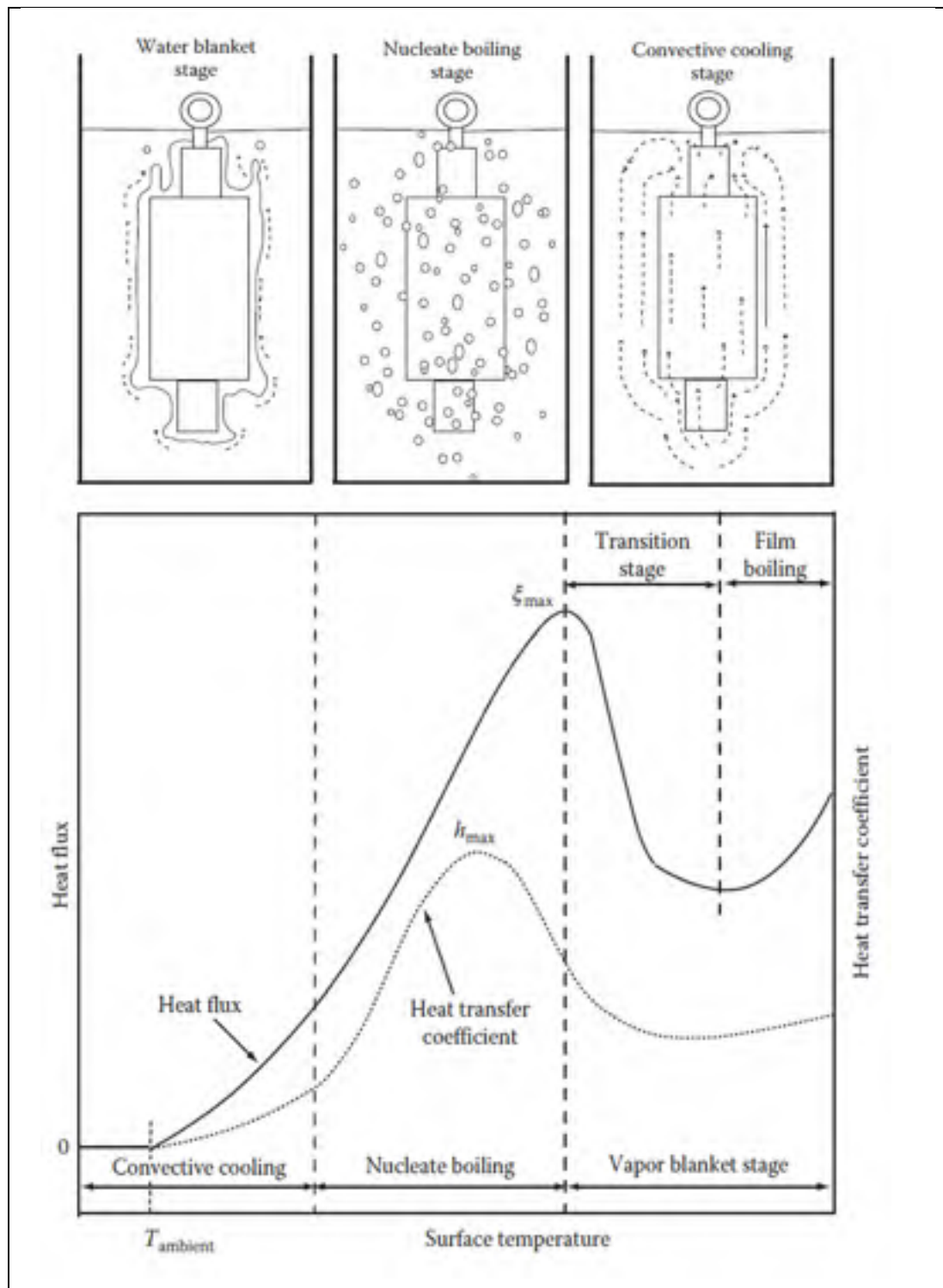


Figure 2-10. Régimes de refroidissements associés aux flux thermiques et au coefficient du transfert thermique durant l'immersion (Şimşir, 2009).

2.2.5 Détermination du coefficient du transfert thermique

Une description simpliste du procédé de trempe comme étant un refroidissement rapide d'une pièce préalablement austénitisée ne rends pas justice à la complexité du procédé, durant lequel le transfert de chaleur à travers le milieu de trempe implique de nombreux phénomènes à l'interface acier/liquide (qui peut inclure un espace de vapeur (gap) - Figure 2-9) (Narayan Prabhu & Ashish, 2002).

En présence d'échantillons de petite taille à faible nombre de Biot ($Bi = \frac{hL}{\lambda} < 0.1$, avec L : la longueur caractéristique $L = \frac{V}{A}$, avec V et A sont respectivement son volume et sa surface). La résolution du problème thermique est supposée régie par la théorie de systèmes minces (Lumped System) qui considère que la température est quasi uniforme au sein de la sonde au cours de la trempe (Prabhu & Fernandes, 2010).

$$h = C_p \frac{\rho V}{A} \left(\frac{\dot{T}}{T - T_f} \right) \quad (2-14)$$

La précision du coefficient h dépend de la précision de la vitesse de refroidissement obtenue à partir des courbes de température. Malheureusement, la méthode de systèmes minces ne peut pas s'appliquer dans le cas de pièces massives de grandes dimensions ($Bi \gg 1$), car le phénomène de conduction ne peut pas être négligé devant la convection ce qui se traduit par le maintien d'une différence de température qui s'établit entre la surface et le centre de l'échantillon.

Les méthodes inverses de conduction de la chaleur sont les plus répondues pour l'estimation du coefficient du transfert thermique et aussi les plus utilisées pour ce type d'application (Narayan Prabhu & Ashish, 2002).

L'objectif de cette méthode est d'estimer le HTC qui est censé être imposé comme condition aux limites sur les parois externes (la cause), à partir de l'historique de température mesurée à une position donnée de la pièce (l'effet). Le HTC sera généralement estimé de manière itérative, en s'appuyant sur une méthode de calcul directe (MEF, Différences finies, analytique...etc.). La température mesurée, T_i^m sera utilisée pour évaluer l'erreur par rapport à

la température calculée, T_i^c comme réponse au HTC imposé via une fonction objective, F_c à minimiser et qui est souvent formulée comme suit :

$$F_c = \sum_i^n (T_i^m - T_i^c)^2 \quad (2-15)$$

Des algorithmes d'optimisation sont utilisés pour minimiser la valeur de la fonction objective à chaque pas de temps t_i en actualisant la valeur de HTC.

Le schéma suivant illustre un exemple de démarche suivie pour minimiser la fonction objective afin d'estimer le HTC (Felde & Réti, 2010).

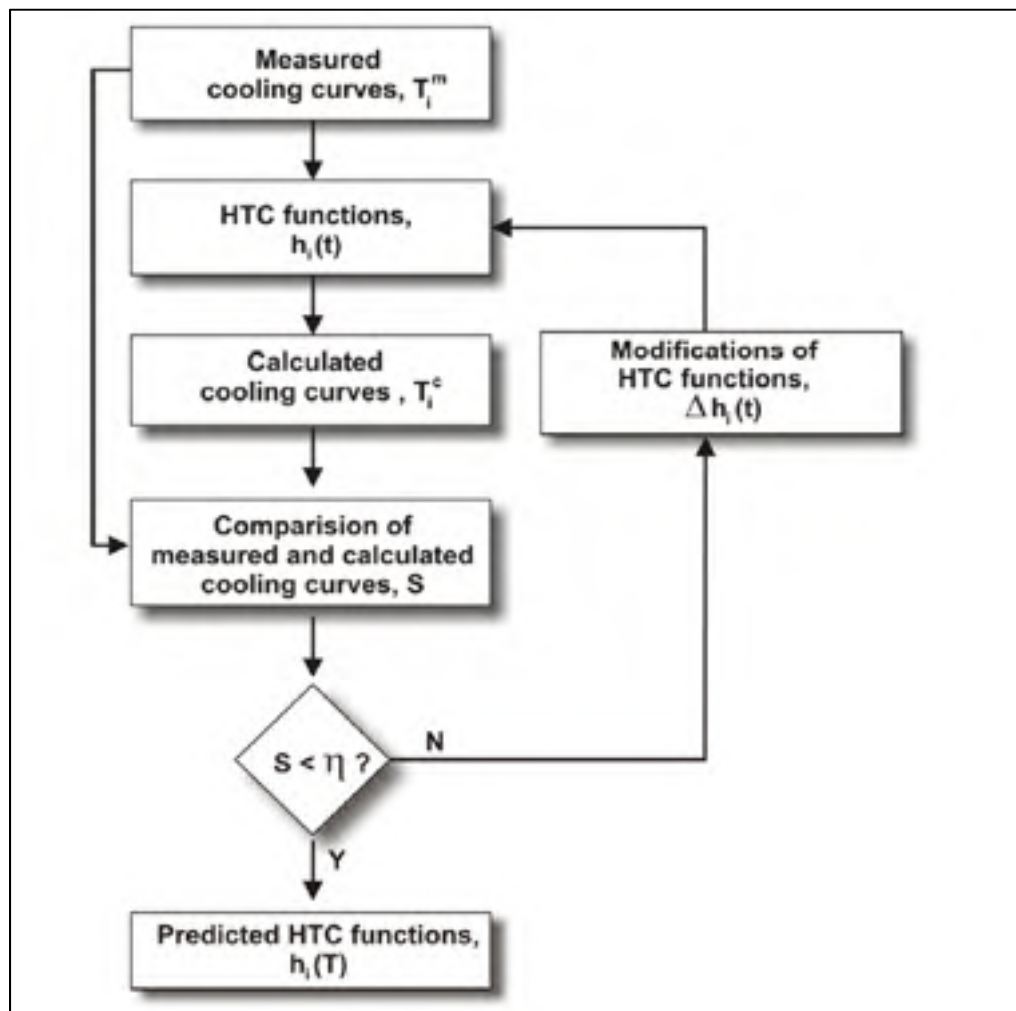


Figure 2-11. Exemple du schéma utilisé pour estimer le HTC par les méthodes inverses (Felde & Réti, 2010).

Idéalement, l'intégration de modèles tridimensionnels avec différentes conditions aux limites dans la méthode inverse produira une meilleure représentativité du problème étudié, mais peut-être avec un coût de calcul conséquent, cependant, les études qui traitent ce cas sont relativement limitées (C.-H. Huang & Wang, 1999; Malinowski, Telejko, Hadała, Cebo-Rudnicka, & Szajding, 2014a).

L'efficacité de la méthode inverse se base en quelque sorte sur la fiabilité du modèle thermique utilisé (méthode directe), qui incorpore bien évidemment toutes les propriétés thermophysiques du matériau comme variables essentielles de calcul. Dans le cas de trempe d'acier, l'estimation du HTC devient assez complexe, comme conséquence du nombre élevé de paramètres à considérer (Huiping, Guoqun, Shanting, & Yiguo, 2006) (transformation de phase, propriétés thermophysiques de phases, chaleur latente...etc.). En revanche, le résultat de l'estimation du HTC pourra être affecté considérablement dans le cas de données imprécises ou erronées (Ali, 2009) telles que la conductivité thermique (Wells & Daun, 2008; Yang, 1998), capacité calorifique (Wells & Daun, 2008), ou encore la chaleur latente dans le cas de transformation de phase.

Dans le CHAPITRE 4, une nouvelle méthodologie a été présentée pour estimer le coefficient de transfert dans le cas de la trempe des brames de fortes dimensions dans l'eau en combinant un code d'éléments finis avec un réseau de neurones artificiel progressif.

2.3 Modélisation mécanique

La prédiction de l'état de distorsion ou de contraintes résiduelles générées dans une pièce d'acier à la fin de la trempe, nécessite une connaissance approfondie de tous les mécanismes régissant leurs formations. L'explication la plus courante des mécanismes de génération de contraintes résiduelles dans le cas de la trempe est souvent réduite aux changements de volume induits par la température et/ou la transformation de phase. Donc une meilleure compréhension de l'évolution de tous les paramètres impliqués dans la génération de déformations et contraintes durant le procédé permettra d'avoir une meilleure estimation de leurs natures et amplitudes.

2.3.1 Contraintes résiduelles générées lors de la trempe

2.3.1.1 Contraintes thermiques et de transformation de phases

Lorsqu'une pièce en acier est trempée depuis la température d'austénitisation jusqu'à la température ambiante, un profil de contrainte résiduelle est créé dans la pièce comme conséquence directe de la combinaison du gradient thermique dans la pièce avec des changements de volume induits par les transformations de phase. Le refroidissement lui seul sans implication de la transformation de phase peut provoquer dans la pièce des contractions volumiques hétérogènes, dues au coefficient de dilatation thermique du matériau, α (Figure 2-12), en raison des différents taux de refroidissement.

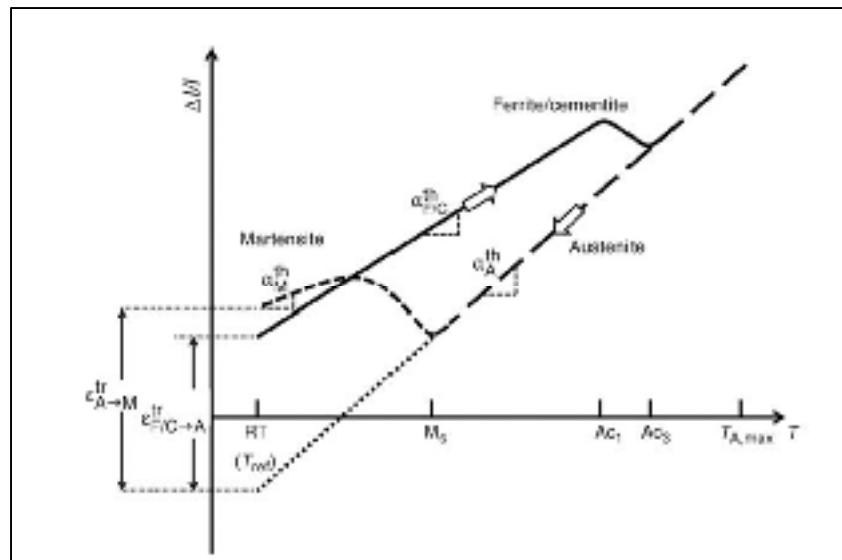


Figure 2-12. Schéma d'une courbe de dilatomètre pour extraire le coefficient d'expansion thermique ainsi que la déformation due à la transformation de phases (M. Schwenk, 2014).

Ceci génère des contraintes qui atteignent leurs maximums lorsque la différence de température dans le matériau est maximale (T_{max} , Figure 2-13.(a)). Les zones où la limite élastique du matériau est dépassée subissent une succession de déformations plastiques qui induisent un profil de contraintes thermiques depuis la surface jusqu'au cœur à la fin de la trempe (Figure 2-13.(c)) (Anil Kumar Sinha, 1991).

Sachant que chaque phase métallurgique présente un volume cristallographique particulier. La transformation de phase de l'austénite en martensite ou d'autres produits de transformation (bainite, ferrite, perlite ou martensite), provoque une déformation supplémentaire déclenchée par l'expansion volumique (ε_{A-M} , Figure 2-12) , comme conséquence du changement de volume spécifique des phases présentes (Humberto M. Celleri, 2014). Ceci induit alors la génération d'un autre type de contraintes que l'on appelle contraintes de transformations (Çakir & Özsoy, 2011; Volker Schulze, 2011).

La Figure 2-13 suivante schématise de manière isolée le développement des contraintes thermiques et de transformation entre la surface, S et le cœur, C d'un cylindre lors de la trempe (voir l'évolution de la température en Figure 2-13.(a)) dans le cas d'un matériau ayant un comportement purement élastique (Figure 2-13.(b)) et un matériau avec un comportement élasto-plastique (Figure 2-13.(c)). Les courbes discontinues sur la Figure 2-13.(b) représentent l'évolution de la limite élastique du matériau en cœur et en surface qui accroît avec la baisse de température Figure 2-13.(a). Le dépassement de la limite élastique provoque des déformations plastiques qui réduisent la contrainte générée (absorbent une portion de la contrainte thermique ou de transformation - Figure 2-13.(c)). L'amplitude des contraintes résiduelles permanentes induites à la fin du refroidissement dépend du niveau de la déformation plastique (Hans M. Tensi, 2006).

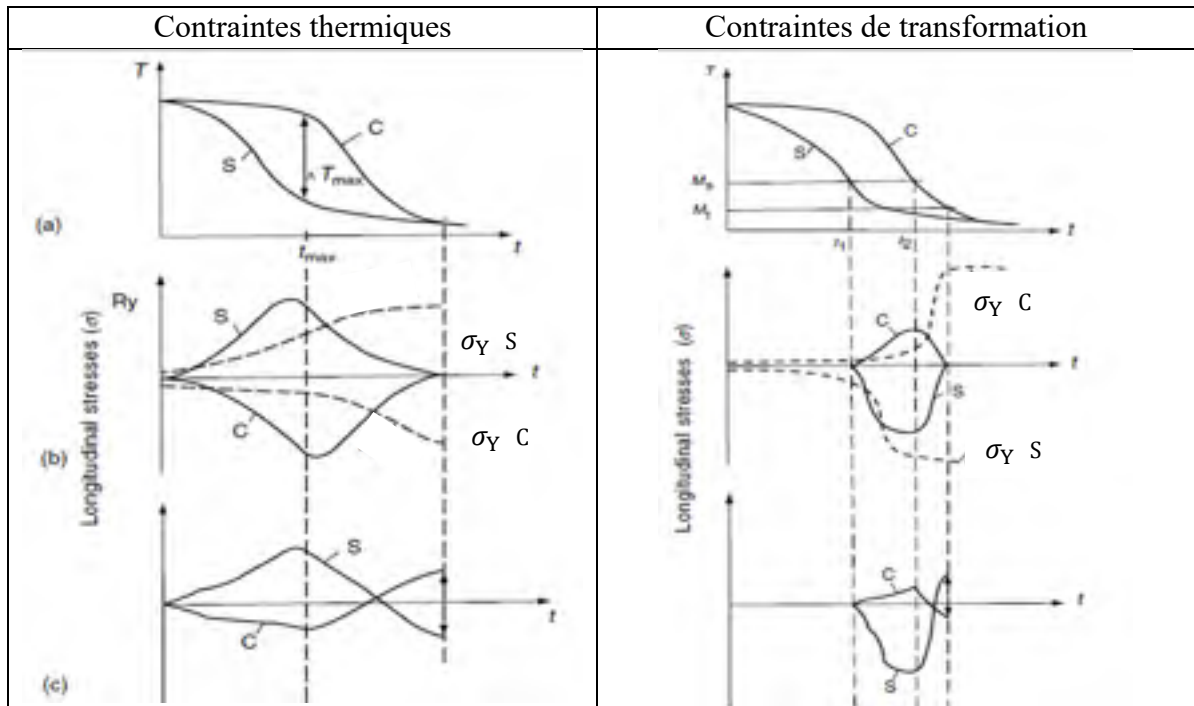


Figure 2-13. Développement des contraintes thermiques et de transformation pour un matériau **(b)** parfaitement élastique et **(c)** un matériau élasto-plastique (Hans M. Tensi, 2006).

Les tableaux suivants proposent des exemples de modèles empiriques utilisés pour estimer les coefficients de dilatations thermiques et des changements de volume utilisés pour la modélisation de traitements thermiques.

Tableau 2-2. Changements de volume au cours des transformations des phases (Božidar Liščić, 2006).

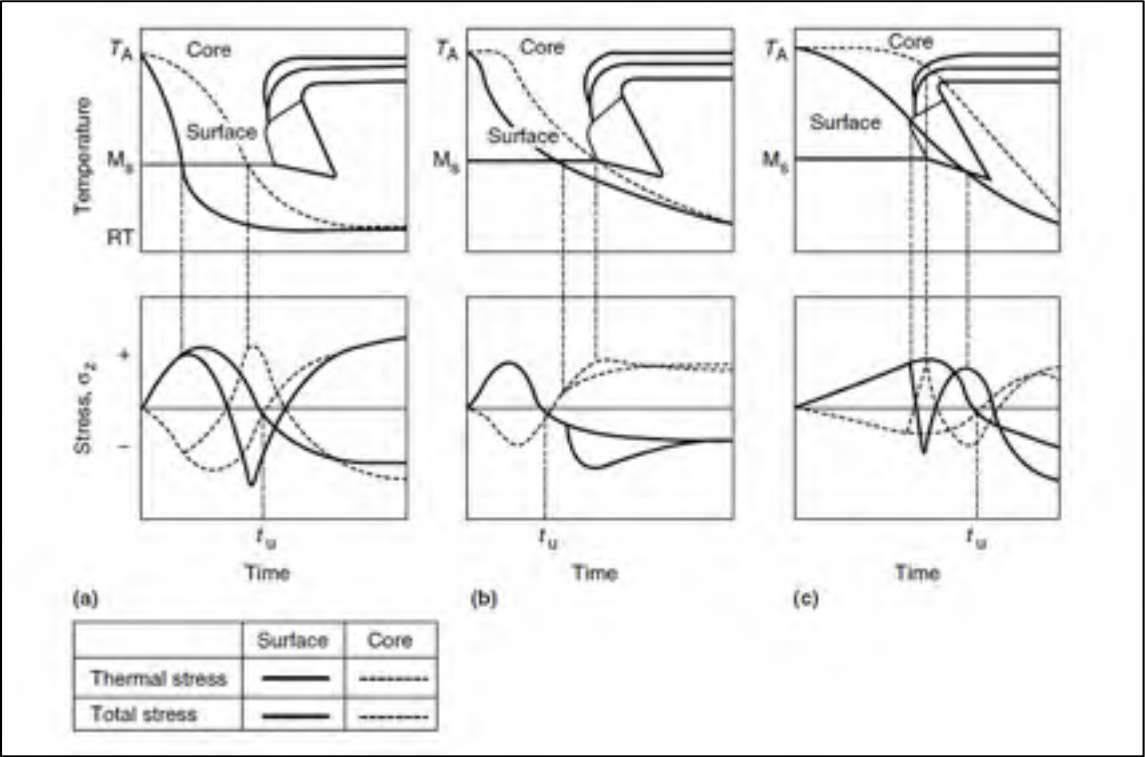
Transformation	Change in Volume (%)
Spheroidized pearlite $\rightarrow$ austenite	$-4.64 + 2.21 \times (\%C)$
Austenite $\rightarrow$ martensite	$4.64 - 0.53 \times (\%C)$
Spheroidized pearlite $\rightarrow$ martensite	$1.68 \times (\%C)$
Austenite $\rightarrow$ lower bainite	$4.64 - 1.43 \times (\%C)$
Spheroidized pearlite $\rightarrow$ lower bainite	$0.78 \times (\%C)$
Austenite $\rightarrow$ upper bainite	$4.64 - 2.21 \times (\%C)$
Spheroidized pearlite $\rightarrow$ upper bainite	0

Tableau 2-3. Coefficient d'expansion thermique (α) par phase (Rajeev, Jin, Farris, & Chandrasekar, 2009).

Microstructure	Coefficient of Thermal Expansion ($^{\circ}\text{C}^{-1}$)
Austenite	2.2×10^{-5}
Pearlite	1.533×10^{-5}
Bainite	1.15×10^{-5}
Martensite	1.15×10^{-5}
Sorbite	1.3×10^{-5}

L'état final des contraintes résiduelles après trempe est souvent représenté par l'évolution de la superposition des contraintes thermiques avec les contraintes de transformation.

La Figure 2-14 illustre l'évolution de la contrainte résiduelle totale (résultante de la contrainte thermique superposée avec la contrainte de transformation) pour trois configurations de trempe différentes.



On peut voir déjà que l'évolution de la contrainte totale est influencée par les différents parcours des profils de refroidissement entre la surface et le cœur à travers le diagramme de transformation, en d'autres termes de la progression des différents scénarios de superpositions de contraintes thermiques avec celles de transformation. Il est à noter que la nature compressive ou de tension de la contrainte totale à la fin de la trempe dépend particulièrement de la succession de l'événement du déclenchement de la contrainte de transformation au cœur avec celui de l'inversion du signe de la contrainte thermique pure (t_u) (Totten et al., 2002).

Les dimensions de la pièce à tremper peuvent aussi affecter l'état des contraintes résiduelles. La Figure 2-15 illustre l'influence du diamètre d'un cylindre en acier sur la configuration de la distribution totale des contraintes résiduelles pour un diagramme TRC donné. On peut déjà remarquer qu'au fur et à mesure que le diamètre du cylindre à tremper augmente, l'élargissement du gradient de température entre la surface et le cœur augmente, conduisant à des vitesses de refroidissement très lentes au niveau du centre; autrement dit, cela démontre qu'on assiste à différents types de transformations des phases (ferritique, bainitique, perlitique) autres que la transformation martensitique ($D = 10$ mm). En conclusion, la déduction de la distribution des contraintes et de leurs amplitudes entre la surface et le cœur ne semble pas être intuitive, les prédictions deviennent difficiles quand les dimensions de la pièce augmentent de manière générale.

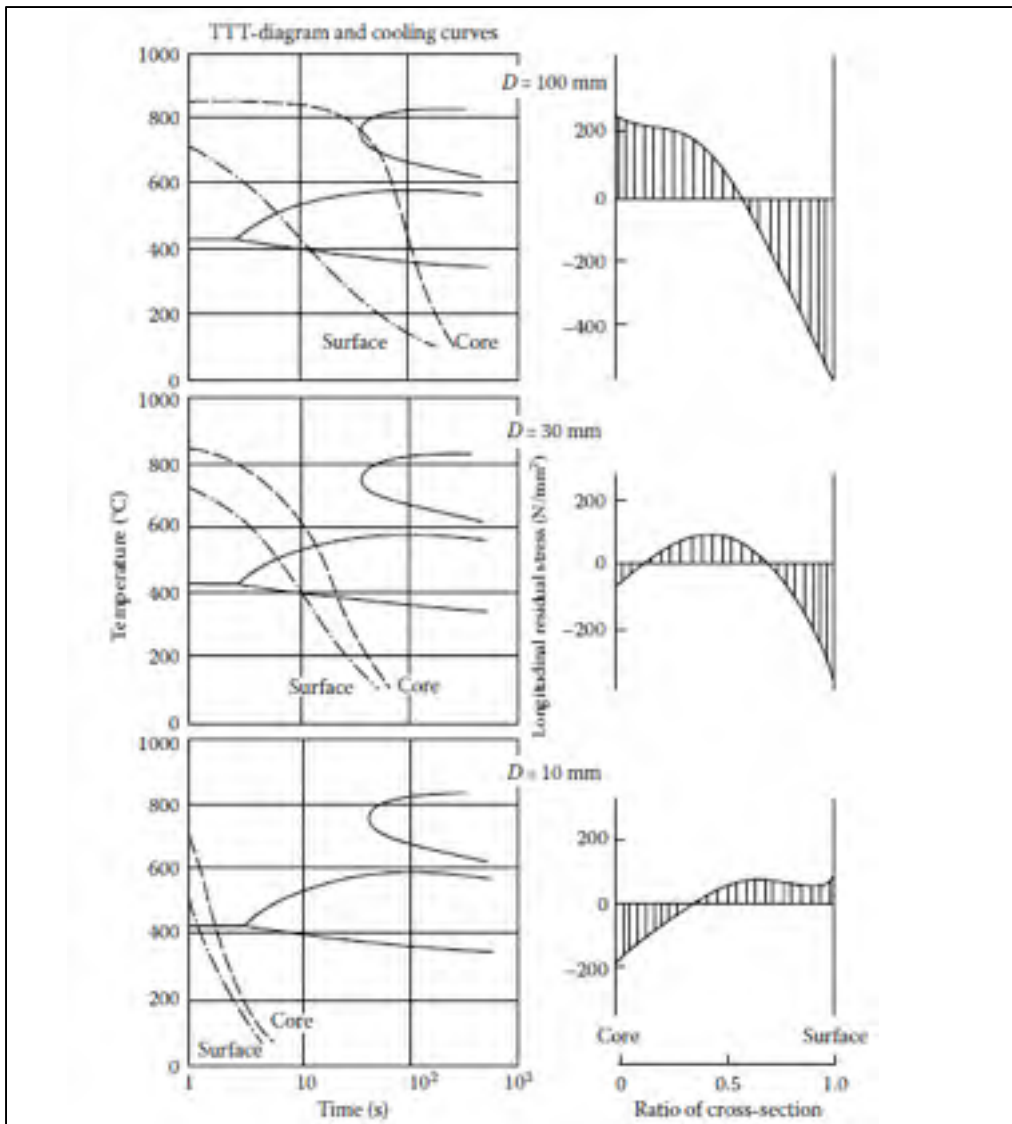


Figure 2-15. Distribution des contraintes résiduelles à travers la section entre la surface et le cœur en fonction du diamètre du cylindre (Volker Schulze, 2011).

La Figure 2-16 permet de conclure aussi que l'état final des contraintes résiduelles générées dans une pièce après trempe ne dépend pas seulement des profils de température de refroidissement aux différentes zones étudiées (surface et le centre), mais aussi du grade de l'acier considéré et de sa trempabilité ceci aura également une influence sur la nature et la cinétique de la transformation à prendre en compte.

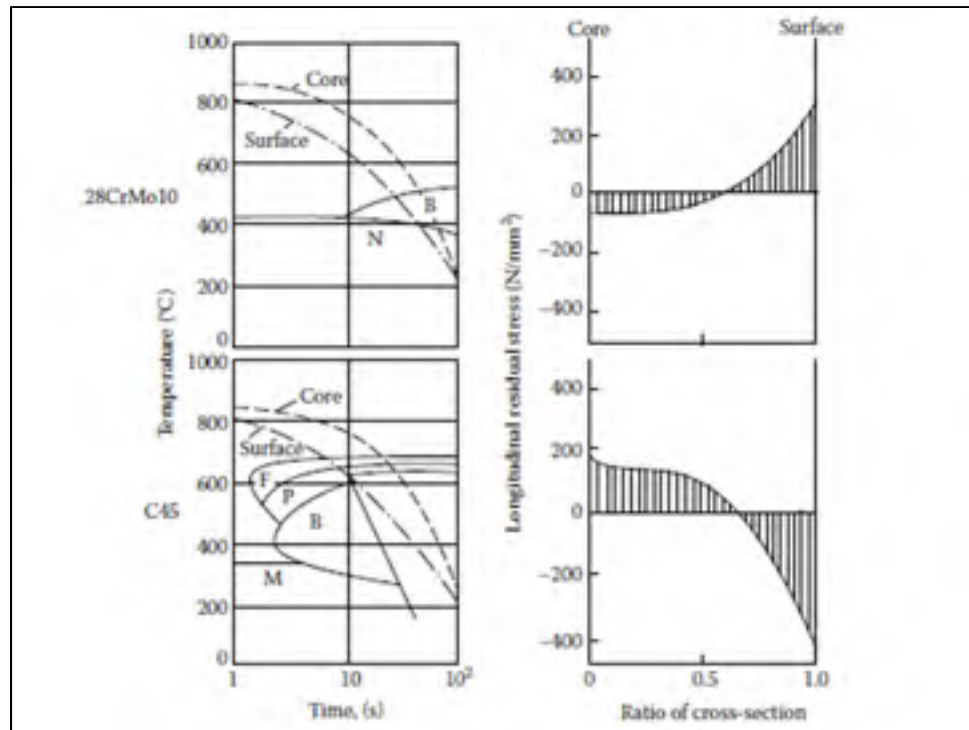


Figure 2-16. Distribution des contraintes résiduelles à travers la section d'un cylindre pour deux types d'acier différents (Volker Schulze, 2011).

2.3.1.2 Déformation induite par la plasticité de transformation (TRIP)

Il est important de noter que l'application d'une contrainte mécanique même inférieure à la limite élastique sur un mélange de phases composées de l'austénite et de la phase transformée (bainite, martensite, ...etc.), crée une déformation supplémentaire comme conséquence de la différence de densité de la phase molle (austenite) et la phase dure (J.-y. Liu, Lu, & Junmei, 2009; Vincent, Jullien, & Gilles, 2005). Cette déformation induite par la transformation est appelée plasticité de transformation (TRIP). La Figure 2-17.a) montre que le signe et la sévérité de la déformation induite la plasticité de transformation dépend de l'intensité des contraintes mécaniques appliquées. Il faut rappeler aussi qu'une relation de proportionnalité peut exister entre la déformation due à la plasticité de transformation et la contrainte mécanique appliquée (Figure 2-17.b)) (Franz, Besserdich, Schulze, Müller, & Löhé, 2005).

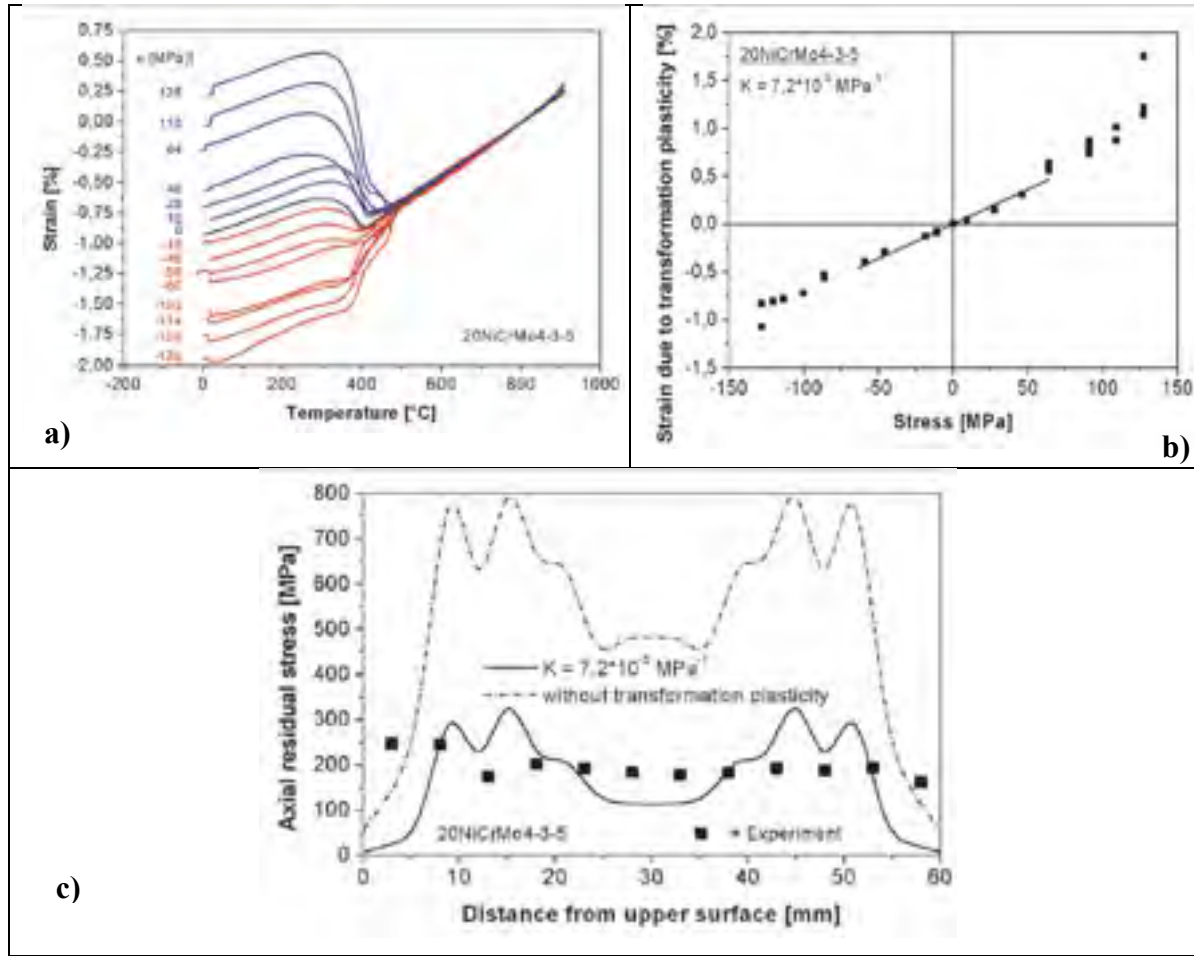


Figure 2-17. **a)** Influence de la contrainte mécanique appliquée sur la déformation totale
b) Corrélation entre la déformation induite par la plasticité de transformation (TRIP) et la contrainte appliquée **c)** Influence de l'effet TRIP sur la modélisation FE des contraintes résiduelles (Franz et al., 2005).

Le modèle qui représente la déformation due à la plasticité de transformation peut être formulé par l'équation (2-16)

$$\varepsilon_{tr}^k = K_k \cdot \sigma \cdot f(\xi) \quad (2-16)$$

Avec K_k et $f(\xi)$ représentent respectivement le paramètre TRIP et une fonction de mise à l'échelle.

$$K_k = C \cdot \frac{\Delta V_{a \rightarrow k}}{V_a} \cdot \frac{1}{\sigma_Y} \quad (2-17)$$

Où $\frac{\Delta V_{a \rightarrow k}}{V_a}$ est le changement de volume dû à la transformation de la phase, k , σ_Y , est la limite élastique de la phase mère (austénite) et « C » est une constante géométrique qui peut prendre par exemple la valeur 5/6 pour le cas du modèle du Greenwood ou 2/3 pour celui de Leblond (Dalgic, Irretier, Zoch, & Lowisch, 2008; Şimşir, 2017).

Plusieurs études montrent que l'intégration de l'effet TRIP dans les modèles de simulation de traitement thermique améliore les prédictions de la distorsion finale. Par exemple, la Figure 2-18 montre qu'un modèle éléments finis qui considère l'effet TRIP appliqué à un cylindre creux produit une meilleure prédiction de la distorsion après trempe (Figure 2-18.a) mais aussi dans le cas d'une cémentation suivie par une trempe (Figure 2-18.b) (Narazaki & Totten, 2006). Ce constat a été aussi vérifié pour la prédiction de la distribution des contraintes résiduelles dans le cas d'un cylindre en acier Figure 2-17.c) (Franz et al., 2005).

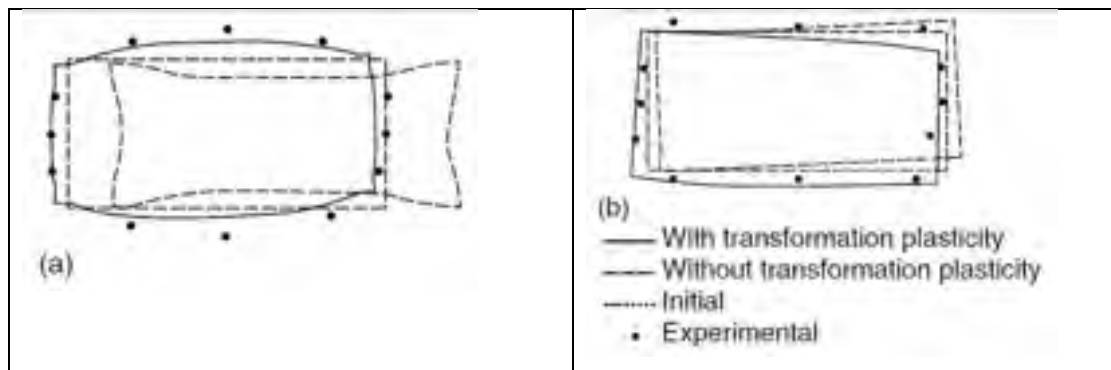


Figure 2-18. Étude de l'impact de l'intégration de l'effet TRIP dans la modélisation de la distorsion **a)** après trempe et **b)** cémentation suivie d'une trempe en comparaison avec les résultats expérimentaux (Narazaki & Totten, 2006).

2.3.2 Formulation du problème mécanique

La modélisation mécanique de la trempe propose de calculer le tenseur de déplacements $\{u\}$, déformations $\{\varepsilon\}$ et les contraintes $\{\sigma\}$ à différents points de la pièce (Humberto M. Celleri, 2014). Comme cité précédemment les causes les plus courantes de distorsion et de contraintes résiduelles durant la trempe sont :

Les contraintes internes résultantes dues aux gradients thermiques et aux changements de volumes de phases, en plus de l'effet de déformations induites la plasticité de transformation, provoquent des distorsions quand les limites élastiques des phases sont dépassées.

Généralement, les équations constitutives utilisées pour la simulation des contraintes résiduelles induites par la trempe utilisent une décomposition additive du tenseur de déformation en se plaçant dans l'hypothèse des petites déformations (Cardinaux, 2008; Şimşir, 2008a).

Le tenseur des déformations élémentaires totales peut être écrit comme une somme de tenseurs indépendants.

$$d\{\varepsilon\} = d\{\varepsilon_e\} + d\{\varepsilon_{th}\} + d\{\varepsilon_{tp}\} + d\{\varepsilon_{tr}\} + d\{\varepsilon_p\} \quad (2-18)$$

Où $d\{\varepsilon_e\}$, $d\{\varepsilon_{th}\}$, $d\{\varepsilon_{tp}\}$, $d\{\varepsilon_{tr}\}$ and $d\{\varepsilon_p\}$ sont respectivement la déformation élémentaire, totale, élastique, thermique, transformation de phase, plasticité de transformation et plastique (Denis, 1997).

La formulation qui représente le couplage entre les différentes déformations et la contrainte élémentaires durant le procédé de trempe peut être modélisée par l'équation suivante :

$$d\{\sigma\} = \begin{cases} [D_e(T)](d\{\varepsilon\} - d\{\varepsilon_{th}\} - d\{\varepsilon_{tp}\} - d\{\varepsilon_{tr}\} - d\{\varepsilon_0\}) & , \bar{\sigma} < \sigma_Y \\ [D_{ep}(T)](d\{\varepsilon\} - d\{\varepsilon_{th}\} - d\{\varepsilon_{tp}\} - d\{\varepsilon_{tr}\} - d\{\varepsilon_0\}) + d\{\sigma_0\} & , \bar{\sigma} = \sigma_Y \end{cases} \quad (2-19)$$

Il est important d'introduire une notion importante durant la modélisation de trempe qui est la perte de mémoire de la déformation plastique à la suite de l'apparition d'une nouvelle phase. Ce concept stipule que la phase issue de la transformation de phase n'hérite pas forcément l'état des déformations subies précédemment à l'austénite (phase mère). La restauration des déformations après la transformation de phase peut être totale ou partielle (Cardinaux, 2008).

Les détails de calcul de chacune des déformations élémentaires présentées ainsi que les calculs développés pour obtenir la relation entre la déformation et la contrainte élémentaire sont expliquées dans le chapitre 6 section 6.2.3.

On peut conclure que la connaissance des propriétés thermomécaniques des différentes phases est d'une importance capitale pour la détermination du tenseur de déformation et ensuite pour le calcul des distorsions.

2.3.3 Rhéologie du matériau

Le choix des lois rhéologiques représentatives de l'écoulement du matériau est parmi les défis majeurs rencontrés durant la modélisation des traitements thermiques (Müştak, Davut, Şimşir, & Gur, 2014). La loi de comportement influence énormément la réponse mécanique du matériau suite à un chargement externe, et doit donc tenir compte de l'évolution rhéologique du matériau, ainsi que de la gamme des températures couverte par le procédé de trempe (Aliaga, 2000).

Les modèles thermo-élasto-plastiques sont capables de décrire le comportement du matériau durant la trempe (Anil Kumar Sinha; Bhadeshia). Durant la trempe les vitesses de déformation mises en jeu sont régies par le régime quasi statique.

Un embarras de choix se présente pour le choix des lois qui sont capables de prédire et représenter fidèlement la rhéologie du matériau à différents régimes de température pour chaque phase. Il faut bien noter qu'on sous-entend par loi rhéologique de matériaux, le comportement isolé de chacune des phases constituantes comme illustré dans la Figure 2-19. Cela confronte l'expérimentateur souvent à des défis à la fois techniques et financiers. Le fait de reproduire plusieurs exemplaires d'échantillons pour une phase donnée (martensite, bainite, ferrite ou perlite) avec des conditions similaires représente un défi en soi, en plus cela multiplie le nombre d'expériences à réaliser par le nombre des phases supplémentaires que l'on veut étudier; ce qui alourdit la facture expérimentale (Şimşir, 2014).

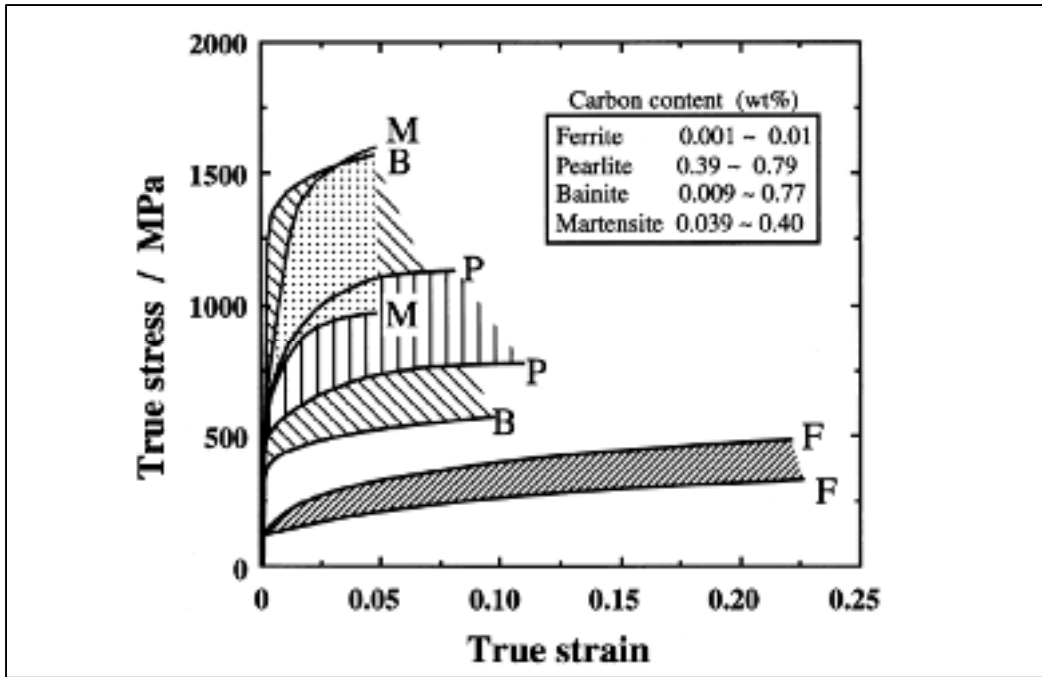


Figure 2-19. Courbes contraintes-déformations par phase (Umemoto, Tsuchiya, Liu, & Sugimoto, 2000).

Il est quand même important de mentionner que les taux de déformations impliqués durant le procédé de la trempe restent relativement limités (2% à 3%) (Löwisch & Dalgic, 2006; Şimşir, 2009) en comparaison avec d'autres procédés de fabrication (forgeage, laminage, à chaud); ceci stipule que la nature des lois de comportement utilisées pour la modélisation d'autres procédés ne peut pas être directement transposable au procédé de la trempe.

Plusieurs modèles sont capables de décrire le comportement mécanique des phases constituantes du matériau dans la gamme de déformation impactée par le procédé de trempe. Les modèles les plus populaires pour modéliser le comportement sont dérivés des lois de type puissance pour chaque température (Frerichs & Lübben, 2014; Löwisch & Dalgic, 2006).

$$\sigma = H\varepsilon^n \quad (2-20)$$

La loi puissance peut évoluer vers plusieurs variantes selon la nature du matériau telle que la loi de Ludowick (équation (2-21)) ou la loi de Swift (équation (2-22)) :

$$\sigma = \sigma_Y + H\varepsilon^n \quad (2-21)$$

$$\sigma = H(\varepsilon + \varepsilon_0)^n \quad (2-22)$$

Des modèles d'écrouissage élasto-viscoplastique peuvent idéalement être utilisés si les vitesses de déformations impliquées sont jugées avoir une importante influence sur la loi de comportement, ou à la suite de refroidissements très lents. Ils peuvent se présenter par un modèle additif des lois plastique et viscoplastique.

Par exemple, un modèle de loi de comportement de type Bingham généralisé permet de modéliser de manière précise les variations du comportement en tenant en compte l'évolution du domaine élastique:

$$\sigma = \sigma_Y(T) + H\varepsilon^n + K\dot{\varepsilon}^m \quad (2-23)$$

Avec n qui représente le coefficient d'écrouissage et H le module d'écrouissage.

De manière générale les paramètres rhéologiques σ_Y , K , H , n , m et ε_0 thermo-dépendants permettent la description du comportement du matériau lors de la viscoplasticité jusqu'à l'élasto-plasticité (Aliaga, 2000).

2.4 Conclusion

La modélisation de trempe implique différents domaines physiques qui interagissent les uns avec les autres de manière couplée. Chacun des domaines précités exige que les paramètres qui le caractérisent soient bien maîtrisés.

La modélisation de l'évolution de la transformation de phase repose essentiellement sur le diagramme TTT combiné avec le profil de refroidissement considéré via le calcul de la somme de Scheil. Cependant, la modélisation de diagrammes TTT précis n'est pas automatique, et elle

nécessite le plus souvent des adaptations. La détermination expérimentale de diagrammes de TTT est complexe, et même si elle est réalisée elle ne reflète pas les TTT idéaux (réels) qui sont censés être générés par un refroidissement infiniment rapide. Les diagrammes TTT expérimentaux sont produits par un refroidissement rapide depuis l'austénitisation jusqu'à la température de maintien désirée, et donc la contribution des précédentes températures parcourues est déjà considérée dans le temps d'incubation obtenu (Pan, 2001). En d'autres termes, même des diagrammes TTT expérimentaux imprécis ne peuvent pas être exploités directement pour décrire la cinétique de transformation de phase dans le cas d'un refroidissement donné via la méthode de Scheil ; par exemple remonter aux diagrammes TRC capables de représenter l'acier.

La modélisation du domaine thermique est limitée par la connaissance et la précision de toutes les propriétés thermophysiques en fonction de la température pour toutes les phases métallurgiques présentes. En plus, les erreurs qui peuvent surgir dans l'estimation ou la mesure des propriétés thermophysiques introduites dans le modèle thermique, n'auront pas la même réponse sur la prédiction de la température si on change les dimensions de la pièce à tremper (le facteur d'échelle). La modélisation thermique de pièces massives est sensible aux données du matériau, car la conduction contrôle le transfert thermique en comparaison avec la convection (nombre de Biot, $Bi \gg 1$). Le coefficient de transfert thermique est un paramètre qui dépend grandement du procédé utilisé (température, géométrie de la pièce, température du bain...etc.). Certes sa connaissance est indispensable et dépend du cas étudié, cependant, sa détermination dans le cas de la trempe des pièces massives est un défi majeur en utilisant les techniques conventionnelles pour son estimation (coût de calcul, traitement de données...etc.). En plus, il faut prévoir des protocoles expérimentaux personnalisés pour l'instrumentation en fonction de la géométrie à étudier. En plus, la littérature ne couvre pas assez de travaux à l'échelle industrielle pour l'estimation du HTC, et même si c'est le cas, ils ne peuvent pas être exploités directement.

Finalement, avant de s'aventurer dans le calcul de la réponse mécanique (déformation induite, distorsion ou contraintes résiduelles) à la trempe de pièces massives, il faut s'assurer que les

prédictions des modèles thermique et métallurgique soient très satisfaisantes. Ceci implique la détermination de la plupart des paramètres thermomécaniques. Malheureusement, la littérature scientifique est pauvre par rapport à ce genre de données, ou propose des données imprécises ou simplifiées. Pour les aciers à moule, on peut citer par exemple les coefficients d'expansion thermique des phases, les changements de volumes dus à la transformation de phases, mais surtout les lois rhéologiques. Les simplifications les plus répandues par exemple, sont les changements structuraux que l'on retrouve dans la littérature sont souvent exprimés seulement en fonction de la teneur du carbone, ou sous forme d'une valeur constante (Tableau 2-2). Aussi le paramètre K lié à l'effet TRIP est difficile à déterminer expérimentalement, et souvent considéré constant, alors que plusieurs expériences montrent déjà que sa valeur change en fonction de la nature des contraintes appliquées (compression ou traction). Rares sont les travaux où le paramètre K est exprimé en fonction de la température (Dalgic et al., 2008).

Finalement la validation de la réponse mécanique d'une pièce massive à la trempe, représente un défi de taille. La mesure des contraintes résiduelles ou distorsions des grandes pièces directement après trempe est complexe et dangereuse (expose à des risques sérieux).

La modélisation de la trempe de pièces massives nécessite une investigation profonde de toutes les variables impliquées dans la simulation (procédé et matériau). Toute simplification doit être étudiée, évaluée et justifiée.

CHAPITRE 3

MÉTHODOLOGIE EXPÉRIMENTALE ET MÉTHODE DE MODÉLISATION

3.1 Méthode de simulation

La simulation du procédé de trempe a été réalisée en utilisant le module « Quench » sur le logiciel Forge NXT 1.1.

Ce module a l'avantage d'avoir déjà intégré un algorithme basé sur la méthode de Scheil (détaillée en section 2.1.1.3) pour calculer l'évolution de la transformation de phase en fonction de la courbe de refroidissement étudié à chaque point.

La Figure 3-1 ci-après schématise de manière sommaire, les différentes approches possibles pour l'acquisition de données sur le logiciel Forge NxT 1.1 en s'appuyant sur différentes ressources (expérimentales, littérature, JMatPro®...etc.).

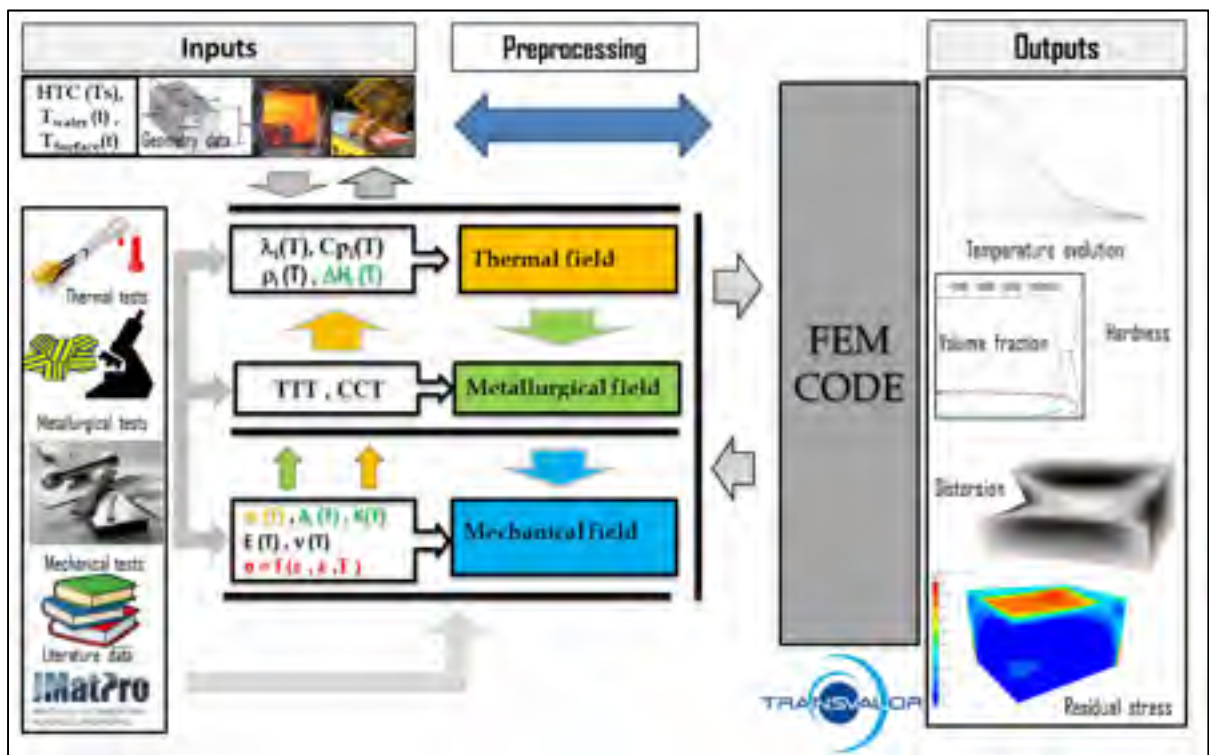


Figure 3-1. Schéma expliquant le fonctionnement du logiciel Forge NxT 1.1 et la façon d'acquérir les données.

La relation existante entre les différents domaines physiques utilisés pour le calcul et les données entrantes est aussi représentée dans la même figure, en plus de la nature de résultats à exploiter à la fin de la simulation (post-traitement).

3.1.1 Mini élément P_1^+/P_1

Le mini élément P_1^+/P_1 est disponible pour la modélisation du problème de la trempe dans le cas tridimensionnel dans le logiciel Forge NxT 1.1. Bien que cet élément soit adapté généralement aux calculs dans les régimes d'écoulements viscoplastiques (forgeage à chaud) considérés comme étant incompressibles ($Tr(\dot{\epsilon})=0$), il a démontré aussi une stabilité pour les calculs qui considèrent le comportement des matériaux élasto-plastiques. Le P_1^+/P_1 est un élément fini tétraédrique linéaire capable d'assurer la continuité des champs de température, pression et vitesse avec la particularité d'enrichir le champ de vitesse par un élément bulle « + » (Aliaga, 2000). L'ajout de ce nœud supplémentaire au centre du tétraèdre (1, 2, 3, 4) permet de recréer quatre nouveaux sous-tétraèdres distincts (k éléments) (Figure 3-2).

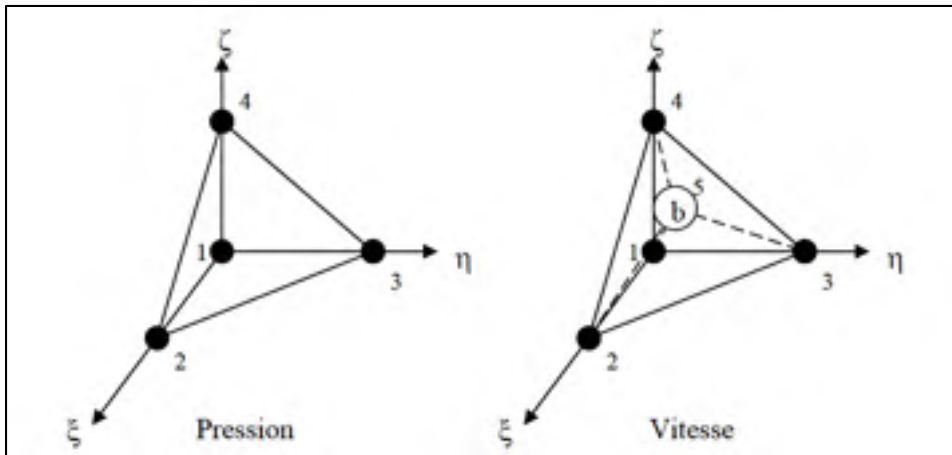


Figure 3-2. Élément fini tétraédrique P_1^+/P_1 par rapport à la vitesse et la pression (Cardinaux, 2008).

L'interpolation de la vitesse, $\mathbf{v}_h$ peut se décomposer en une composante linéaire $\mathbf{v}_l$ et une composante corrective, $\mathbf{b}$ qui sera utilisée pour enrichir l'élément pas le biais de l'incorporation

d'un degré de liberté supplémentaire (élément bulle), contrairement à la pression, p_h qui demeure linéaire et continue.

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_h &= \mathbf{v}_h^l + \mathbf{b}_h = \sum_{i=1}^n \mathbf{v}_i^l N_i + \sum_{k=1}^{n_e} \mathbf{b}_k N_k^b \\ p_h &= \sum_{i=1}^n p_i N_i \end{aligned} \quad (3-1)$$

Les fonctions hiérarchiques de la fonction bulle, N^b peuvent être définies comme suit sur les mailles construites par les sous tétraèdres (Aliaga, 2000) :

$$\begin{aligned} N_1^b &\text{ sur le sous-tétraèdre } 1,3,4,5 : N_1^b = 4\xi \\ N_2^b &\text{ sur le sous-tétraèdre } 1,4,2,5 : N_2^b = 4\eta \\ N_3^b &\text{ sur le sous-tétraèdre } 1,2,3,5 : N_3^b = 4\varsigma \\ N_4^b &\text{ sur le sous-tétraèdre } 2,4,3,5 : N_4^b = 4(1 - \xi - \eta - \varsigma) \end{aligned} \quad (3-2)$$

Avec n_e et n représentent respectivement le nombre d'éléments et de nœuds.

Il faudra rappeler que la fonction d'interpolation linéaire, N_i , sur la maille tétraédrique (1, 2, 3, 4) prend la valeur 1 au niveau du nœud i et s'annule ailleurs sur le reste des nœuds. Cependant, N_k^b est associée au champ de vitesse aux niveaux des mailles formants les sous-tétraèdres, et elle prend la valeur 1 au niveau du nœud bulle (5), mais elle s'annule sur les frontières. L'élément P_1^+/P_1 permet finalement d'assurer la compatibilité de l'élément par rapport à la pression et à la vitesse interpolées, en garantissant des résultats précis avec un coût de calcul raisonnable (Aliaga, 2000; Cardinaux, 2008; Pelissou, 2005).

Les détails concernant le test de cet élément, sa discrétisation et le calcul des matrices de rigidité, etc., ont été développés dans les travaux de (Aliaga, 2000; Cardinaux, 2008).

3.1.2 Choix de maillage

La brame d'acier à modéliser est un bloc parallélépipédique qui comporte trois plans de symétrie (1/8), pour optimiser le temps des calculs. Une analyse de convergence a été conduite pour vérifier l'indépendance du maillage et confirmer la représentation fidèle des résultats du

modèle EF. Il faut noter que le choix du maillage à utiliser dépend de la nature des analyses que l'on veut exploiter (thermique, mécanique, déplacements, contraintes, transformation...etc.), sans négliger le coût de calcul que l'on s'y apprête à investir.

Les premières simulations ont été initialisées avec un maillage de faible densité Figure 3-3 pour évaluer les résultats de la simulation EF au niveau de la section YZ après 2.5 heures de trempe.

Une adaptation de maillage consistant à raffiner le maillage pour les zones critiques et en utiliser un plus grossier ailleurs, semble être une meilleure approche pour établir un maillage optimal et capable de réduire le temps de calcul au lieu de produire un maillage dense et uniforme qui épuiserait les ressources de calcul.

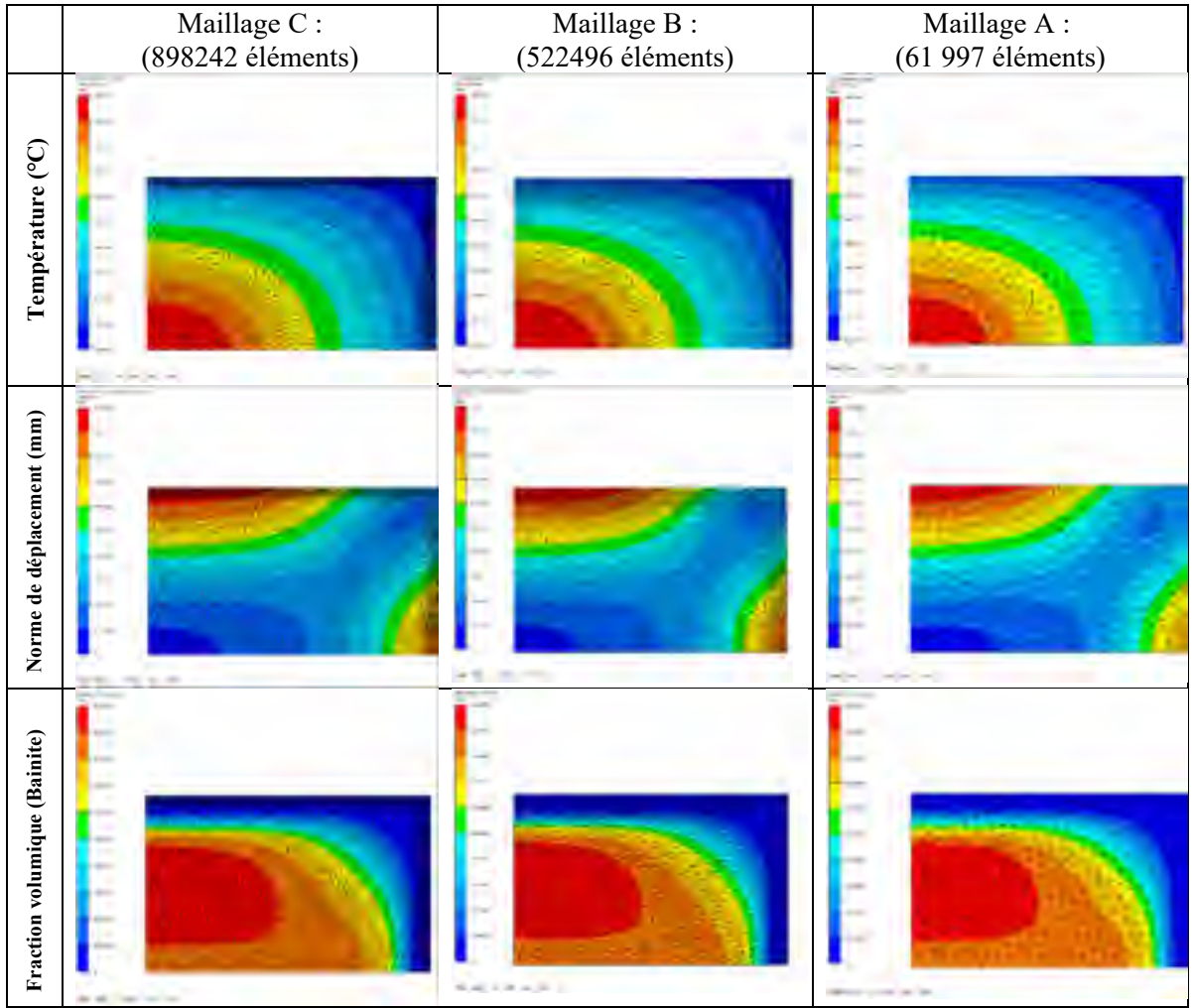


Figure 3-3. Effet du maillage EF sur les résultats de simulation.

La Figure 3-3 montre qu'en utilisant seulement un maillage à faible densité (Maillage A), on pouvait déjà identifier les zones de forts gradients thermiques (près des frontières), les zones de déplacements, et la distribution de phases.

Un raffinement du maillage surtout à proximité des surfaces (Maillage B), a permis d'obtenir une meilleure convergence au niveau des températures par rapport au maillage initial (Maillage A) ($\Delta T_{\max}(\text{maillage A-B}) \approx 1,4 \text{ }^{\circ}\text{C}$, $\Delta T_{\max}(\text{maillage B-C}) \approx 0,02 \text{ }^{\circ}\text{C}$).

Par exemple le maillage C a été jugé optimal pour représenter les analyses mécaniques (distorsions, contraintes résiduelles...etc.). La Figure 3-5 illustre une représentation tridimensionnelle du maillage C en zoomant sur la peau des surfaces de bloc, pour montrer l'évolution du maillage adopté (2,5 mm à la surface). Ce maillage peut anticiper l'effet des grands gradients de température. La convergence du maillage concernant les déplacements a été vérifiée ($\Delta u_{\max}(\text{maillage A-B}) \approx 0,56 \text{ mm}$, $\Delta u_{\max}(\text{maillage B-C}) \approx 0,03 \text{ mm}$). Pourtant, le maillage B était suffisamment optimal pour représenter les résultats thermiques et microstructuraux.

La Figure 3-4 ci-dessous illustre l'évolution de la température maximale et la norme du déplacement maximal en fonction des maillages choisis.

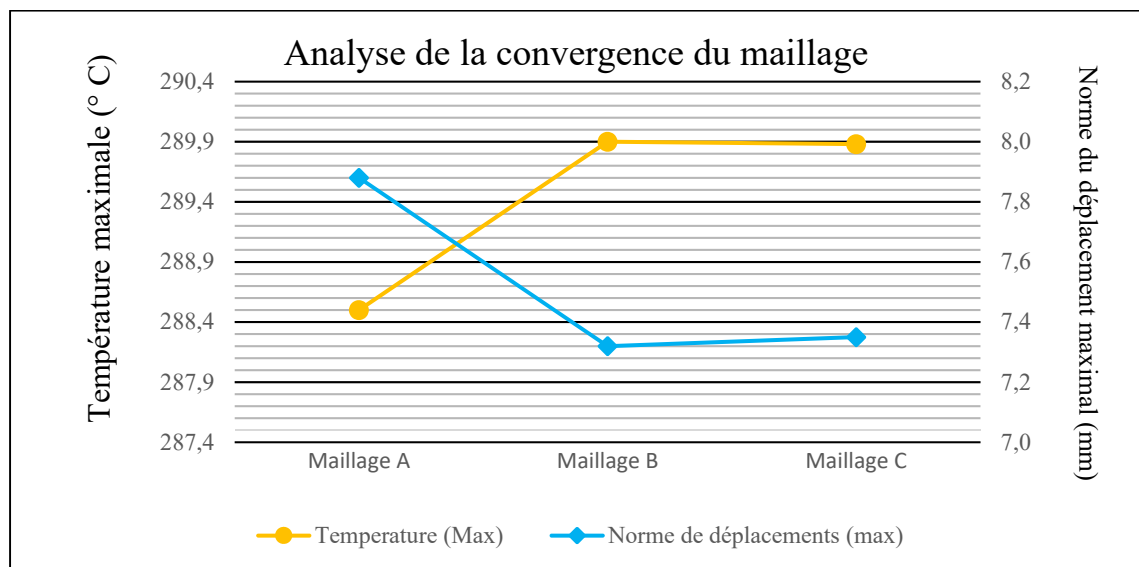


Figure 3-4. Évolution de la température (max.) et de la norme du déplacement (max.) par rapport au maillage.

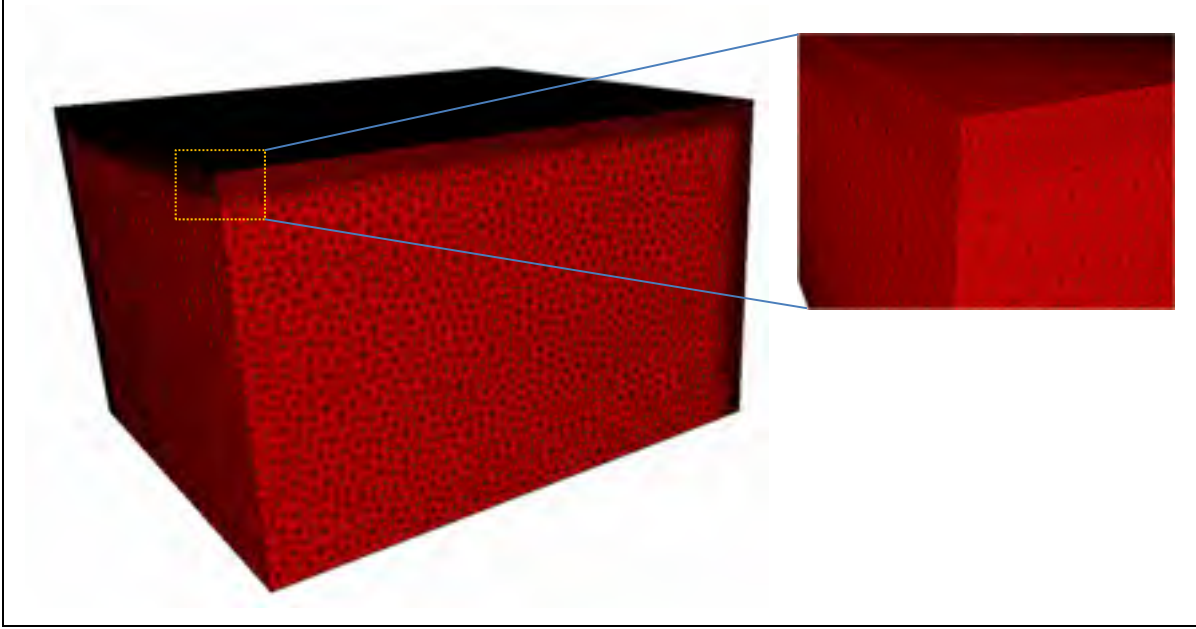


Figure 3-5. Maillage C utilisé pour la modélisation de la trempe afin d'exploiter les résultats mécaniques

3.1.3 Généralités sur le formalisme EF utilisé durant la modélisation de la trempe

Il faut rappeler que durant la trempe, les propriétés thermophysiques de chaque phase sont utilisées pour exprimer la propriété macro en moyennant la contribution des phases existantes en utilisant la loi des mélanges ($\rho(T, \xi_k) = \sum \rho_k \xi_k$, $C_p(T, \xi_k) = \sum C_{pk} \xi_k$, $\lambda(T, \xi_k) = \sum \lambda_k \xi_k$ (S. H. Kang & Y. T. Im, 2007)).

Les propriétés calculées par la suite seront intégrées dans les matrices de conduction et de capacité existantes à l'instant t:

$$[C] = \iiint [N]^T \rho C_p [N] dV \quad (3-3)$$

$$[K] = \iiint [B]^T \lambda [B] dV \quad (3-4)$$

Où $[N]$ et $[B]$ sont respectivement la matrice des fonctions d'interpolation linéaires (fonctions de forme) et la matrice des gradients des fonctions d'interpolation.

Les conditions aux frontières sont considérées pour construire les matrices de convection, $[H]$ et le vecteur de convection, $\{Q_h\}$:

$$[H] = \iint h[N]^T [N] dS \quad (3-5)$$

$$\{Q_h\} = \iint hT_0[N]^T dS \quad (3-6)$$

La formulation éléments finis de l'équation qui régit le problème de transfert de chaleur (transitoire et non linéaire) avec un vecteur de charge, $\{Q\}$, peut s'écrire comme suit:

$$[C] \left\{ \frac{\partial T}{\partial t} \right\} + ([K] + [H])\{T\} = \{Q\} = \{Q_h\} + \{Q_l\} \quad (3-7)$$

$\{Q_l\}$, représente le vecteur de la chaleur latente libérée, quand la transformation de phase a lieu, et il peut être formulé comme suit:

$$\{Q_l\} = \iiint \dot{q}[N]^T dV \quad (3-8)$$

3.1.3.1 Schéma d'intégration temporelle

Il faut noter que les calculs effectués dans le logiciel Forge Nxt 1.1 sont initiés par un schéma de Crank-Nicholson qui utilise un seul pas de temps, suivi par un schéma de Dupont d'ordre 2. Il est important de rappeler que le choix du pas de temps est géré de manière automatique par le logiciel.

Il faudra mentionner que durant la trempe à l'eau, les grandes vitesses de refroidissements au niveau de la surface d'un matériau donné, peuvent déclencher un choc thermique, qui peut se traduire dans la résolution numérique du problème par des fluctuations spatio-temporelles quand le pas de temps est assez petit. Pour remédier à ce problème, une désynchronisation entre le pas de temps thermique et mécanique (ou métallurgique) s'impose, cette technique est appelée thermique asynchrone.

Le principe derrière cette technique repose sur la définition d'un temps caractéristique (minimal), Δt_c pour la pénétration du flux de chaleur à une distance, d , à partir de la frontière, pour lequel le choc thermique se fait ressentir par l'élément en entier.

$$\Delta t_c = \frac{d^2}{4a} \quad (3-9)$$

d représente la profondeur de pénétration (ex. taille caractéristique de l'élément), et a la diffusivité thermique du matériau.

Ceci implique que les calculs thermiques doivent se réaliser à des pas de temps supérieurs à Δt_c , cependant, pour considérer le pas de temps nécessaire pour la résolution de la partie mécanique ou métallurgique, à des pas de temps, Δt inférieurs à Δt_c , une interpolation linéaire sera nécessaire pour calculer la température au pas du temps souhaité, T_{i+1} à partir de la température asynchrone calculée T_{i+1}^{Asyn} (Aliaga, 2000; Cardinaux, 2008; Pelissou, 2005).

$$T_{i+1} = \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta t_c}\right) T_i + \frac{\Delta t}{\Delta t_c} T_{i+1}^{Asyn} \quad (3-10)$$

Les détails concernant la discrétisation du pas de temps et le schéma d'intégration sont donnés dans l'ANNEXE II.

3.1.3.2 Schématisation de la simulation de la trempe

Le schéma représenté dans la Figure 3-6 a été développé pour décrire l'évolution de la simulation de la trempe ainsi que le couplage possible entre les différents modules. Pour chaque incrément temporel t_i l'équation de chaleur est résolue et l'historique de température est analysé sur chacun des nœuds représentés dans le maillage.

Quand les conditions de transformations de phases sont satisfaites pour un nœud donné (consigne **Ok** : la somme de Scheil, $S_n \geq 1$ ou $T \leq M_s$, (Figure 3-6)) alors le calcul des fractions volumiques des phases (ξ^i) se déclenche et le terme source $\{Q_l\}$ représentant l'énergie latente dégagée lors de la transformation est considéré dans le calcul global du vecteur de chargement

$\{Q\}$. Après chaque incrément de temps les matrices de conduction et de capacité thermique s'actualisent pour résoudre le nouveau problème thermique (Calcul thermique). Les incréments du temps utilisés satisfont bien les conditions du couplage thermo-métallurgique (Aliaga, 2000).

Les températures calculées sont utilisées pour démarrer les calculs mécaniques.

Lorsqu' une transformation de phase se déclenche, les changements structuraux de volumes, Δ^i , ainsi que les déformations induites par la transformation de phase sont considérées dans le calcul de la déformation totale et de la contrainte.

La relation entre les déformations et les contraintes de manière incrémentale peut être décrite par la forme suivante (Tong, Gu, & Yang, 2018):

$$d\{\sigma\} = [D_{ep}(T)](d\{\varepsilon\} - d\{\varepsilon_{th}\} - d\{\varepsilon_{tp}\} - d\{\varepsilon_{tr}\} - d\{\varepsilon_0\}) + d\{\sigma_0\}$$

Les fondements théoriques visant à construire cette relation entre la contrainte et la déformation élémentaire dans le cas de trempe qui intègre la contribution des différentes déformations précitées sont décrites dans la section 6.2.3.2 , afin d'illustrer la complexité du couplage existant. Il faut rappeler que les formalismes mathématiques utilisés dans le cadre de cette thèse sont en cohérence avec les travaux de certains auteurs qui ont contribué au développement du logiciel Forge (Aliaga, 2000; Cardinaux, 2008; Pelissou, 2005).

Les entrants du code EF peuvent être résumés comme suit :

- La géométrie initiale de la brame a été définie dans les sections 6.3.2.4 et 6.3.3.
- La considération de la courbe TTT optimisée sera traitée dans la section 5.3.3.2.
- Le coefficient du transfert thermique utilisé est développé dans le CHAPITRE 4 et est représenté dans les Figure 5-1 et Figure 6-2.
- Les propriétés thermophysiques qui représentent le matériau utilisé sont détaillées dans la section 5.3.3.1.
- Les propriétés thermomécaniques utilisées pour la simulation de la trempe sont détaillées dans la section 6.3.3.2.

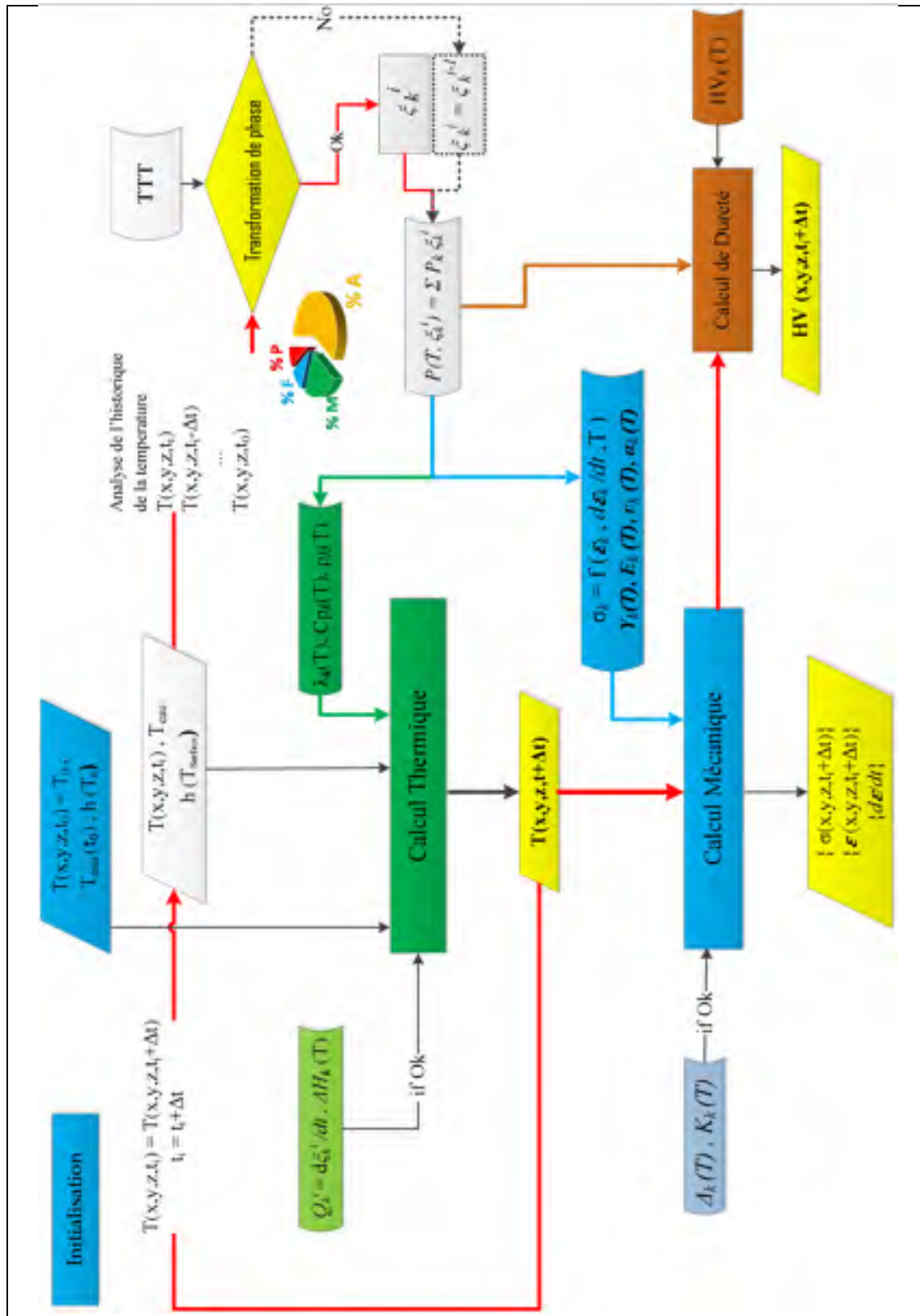


Figure 3-6. Schéma de la simulation du procédé de trempe

3.2 Propriétés du matériau de l'étude

Différentes approches expérimentales ont été développées dans le cadre de ce projet de thèse pour alimenter le modèle EF de données matériaux fiables.

L'approche utilisée dans la présente étude privilégie, de manière prioritaire, l'exploitation des résultats expérimentaux qui visent à représenter les propriétés du matériau étudié afin d'alimenter le modèle éléments finis d'entrants fiables de qualité supérieure. Pourtant, en considérant le grand nombre de propriétés essentielles pour initier la simulation de la trempe, et dans la mesure où une limitation se présente par rapport à la génération expérimentale de certaines propriétés (technique, matérielle, logistique...etc.), les données publiées dans la littérature sont privilégiées en seconde position. Néanmoins, vu la pertinence de la prédiction des bases de données générées par le logiciel JMatPro®, ce dernier sera utilisé comme complément en cas de manquement de données.

3.2.1 Composition chimique

L'acier utilisé dans cette étude est fourni par la compagnie Finkl Steel. Il s'agit d'un acier moyennement allié, utilisé pour les moules à injection plastique. Il est réputé pour sa haute résistance mécanique et sa trempabilité. L'acier étudié fait partie de la catégorie P20 selon la norme AISI (ASM-International-Handbook-Committee, 1991)

La composition chimique ciblée est contenue dans les intervalles de tolérance dans le tableau suivant.

Tableau 3-1. Composition chimique de l'acier (Poids massique / %)

% C	% Mn	% Si	% Ni	% Cr	% Mo	% Cu
0.28 - 0.40	0.60 - 1.00	0.20 - 0.80	0.45 - 0.65	1.4 - 2	0.35 - 0.55	0 - 0.25

3.2.2 Mesures des propriétés thermophysiques

La mesure des propriétés thermophysiques telles que la conductivité thermique et la chaleur spécifique a été réalisée sur un échantillon ayant un grade d'acier très similaire à l'acier étudié, dans un objectif de valider la fiabilité et la pertinence des prédictions du logiciel JMatpro®. Les mesures ont été réalisées au *Centre de Caractérisation (C³) à l'Université de Québec à Chicoutimi* en utilisant la machine FlashLineTM 3000. Le calcul des propriétés thermophysiques a été basé sur la méthode du flash laser (Takahashi, 1984) et l'évolution de la densité fournie pour l'échantillon.

Les propriétés ont été corrigées pour l'austénite, en considérant le saut de densité calculé par JMatpro® au passage de la phase austénitique.

Les résultats de mesures sont présentés dans la Figure 5-4.

3.2.3 Génération des courbes contrainte-déformation par phase

3.2.3.1 Réalisation des éprouvettes monophasiques

Des échantillons cylindriques ont été extraits à partir d'une brame forgée ayant la même nuance d'acier que celle instrumentée dans la présente étude. Dépendamment de la phase métallurgique que l'on vise former (martensite ou bainite), les échantillons cylindriques subiront le traitement thermique approprié.

Les traitements thermiques utilisés pour réaliser des échantillons monophasiques sont les suivants :

- Trempe martensitique : Consiste à tremper directement les échantillons cylindriques dans l'eau depuis la température d'austénitisation à 871 °C.
- Trempe bainitique étagée: Consiste à tremper les échantillons cylindriques dans un bain de sel maintenu à 400 °C à partir de la température d'austénitisation à 871 °C.

Après traitement thermique, les échantillons cylindriques sont usinés pour correspondre au standard ASTM E8. Les spécifications dimensionnelles sont mentionnées dans la Figure 3-8.b).

Il faut mentionner que le petit diamètre de l'éprouvette (section) illustré dans la Figure 3-8.b) a été défini par rapport à la force maximale de la machine Gleeble ® 3800TM en traction (98kN) et à la contrainte ultime maximale que le matériau à tester est capable d'atteindre (la martensite à température ambiante).

3.2.3.2 Essais de traction à différentes températures (Gleeble ® 3800TM)

Les essais de traction ont été réalisés sur la machine Gleeble ® 3800TM (Figure 3-8) pour les éprouvettes ayant subi un traitement thermique (martensite, bainite).

Lesdites éprouvettes prétraitées thermiquement (usinées), sont chauffées jusqu'aux températures désirées, qui sont situées dans l'intervalle de température de formation des phases visées dans le simulateur Gleeble ® 3800TM et puis déformées jusqu'à la rupture.

Quant à la détermination expérimentale de la rhéologie de l'austénite, les essais sont réalisés cette fois sur des éprouvettes n'ayant subi aucun traitement thermique. Pour les températures qui se situent au-dessus de la température d'austénitisation (900°C et 1000 °C), ces éprouvettes sont tout simplement maintenues en chauffe à la température désirée, puis déformées. Tandis que pour déterminer le comportement mécanique de l'austénite dans des gammes de températures inférieures à la température d'austénitisation (entre 350°C et 750°C), les essais ont subi le cycle thermique présenté dans la Figure 3-7 avant le début de la déformation. Le cycle présenté consiste à maintenir l'éprouvette à la température d'austénitisation, suivie d'un refroidissement rapide jusqu'à la température visée (au-dessus de Ms), et est conclu par une déformation à la température du maintien.

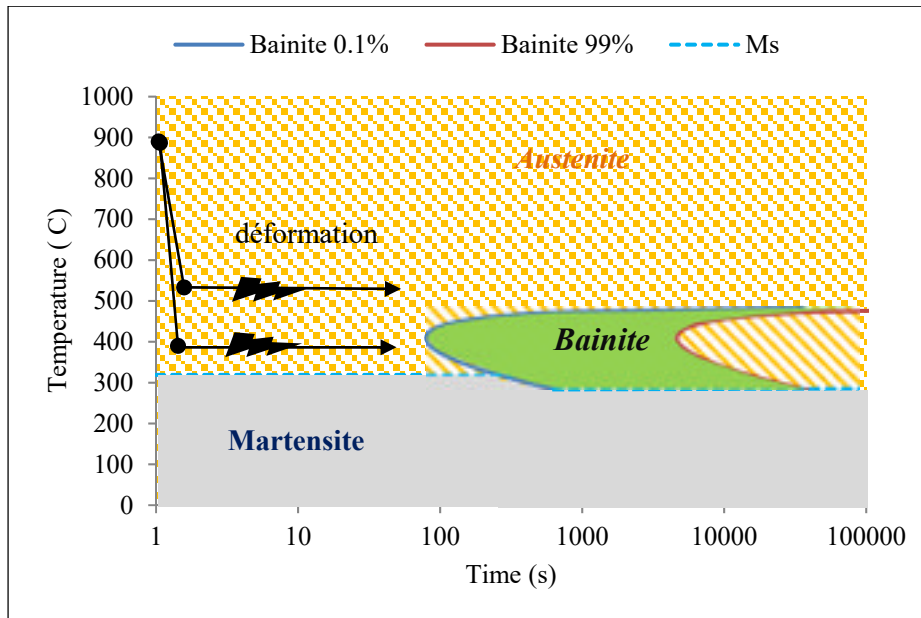


Figure 3-7. Cycle utilisé pour tester le comportement de l'austénite aux basses températures.

Plusieurs auteurs estiment que durant le procédé de trempe les vitesses de déformation mises en jeu restent dans le domaine quasi statique (Casotto, Pascon, Habraken, & Bruschi, 2005; Löwisch & Dalgic, 2006; Optasanu, 2013; Q. Wang, 2014). La vitesse de déformation de 10^{-3} a été choisie pour l'ensemble des essais réalisés.

Un extensomètre a été attaché aux échantillons pour pouvoir mesurer avec précision les petites variations de déformation (Figure 3-8.a), ceci est très utile pour les mesures du module de Young, et la limite d'élasticité en fonction de la température.

La loi de Swift a été utilisée pour modéliser les courbes expérimentales de contrainte-déformation.

Les résultats des tests sont illustrés dans la Figure 6-9 les sections 6.3.3.2.

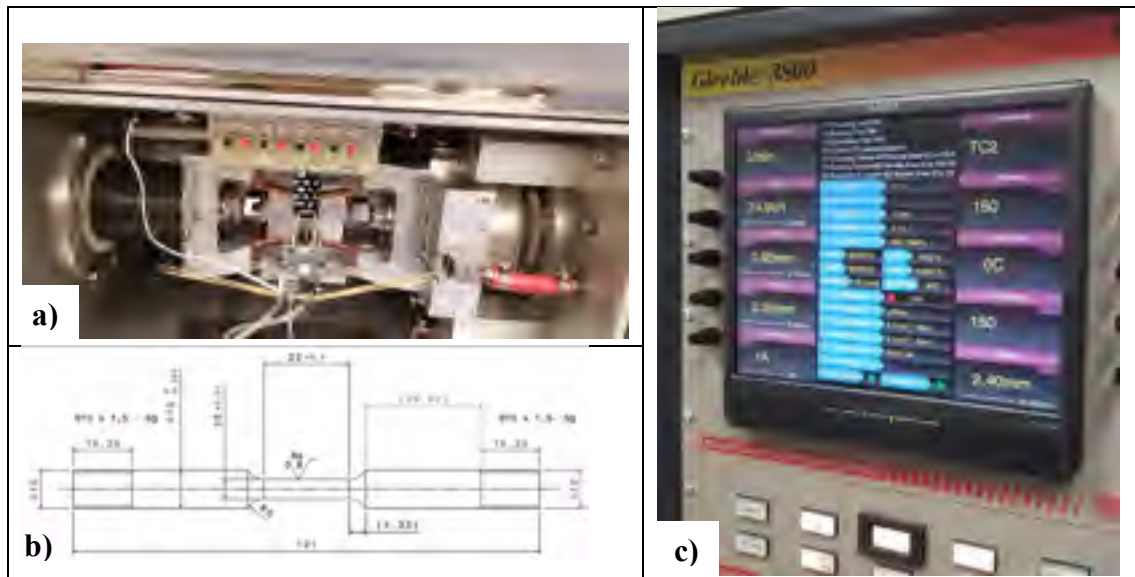


Figure 3-8. Essai de traction à chaud : **a)** procédure d'installation d'un échantillon avec extensomètre. **b)** spécification des échantillons utilisés
c) Interface de la machine Gleeble ® 3800 TM

3.3 Mesures de températures durant la trempe

Une brame aux dimensions suivantes 0.65 m × 0.88 m × 1.04 m (Figure 3-9) a été instrumentée par plusieurs thermocouples de type k (voir section 5.3.1) pour mesurer l'évolution de la température durant le cycle de trempe à différents endroits de la brame.

Pour limiter les pertes thermiques dues à l'introduction de cavités durant le perçage de trous, des techniques avancées sont utilisées pour pouvoir réaliser des trous à faible diamètre, de telle sorte que le diamètre maximum ne dépasse $\phi = 6$ mm (1/4") pour le trou le plus profond au centre (~ 322.5 mm).

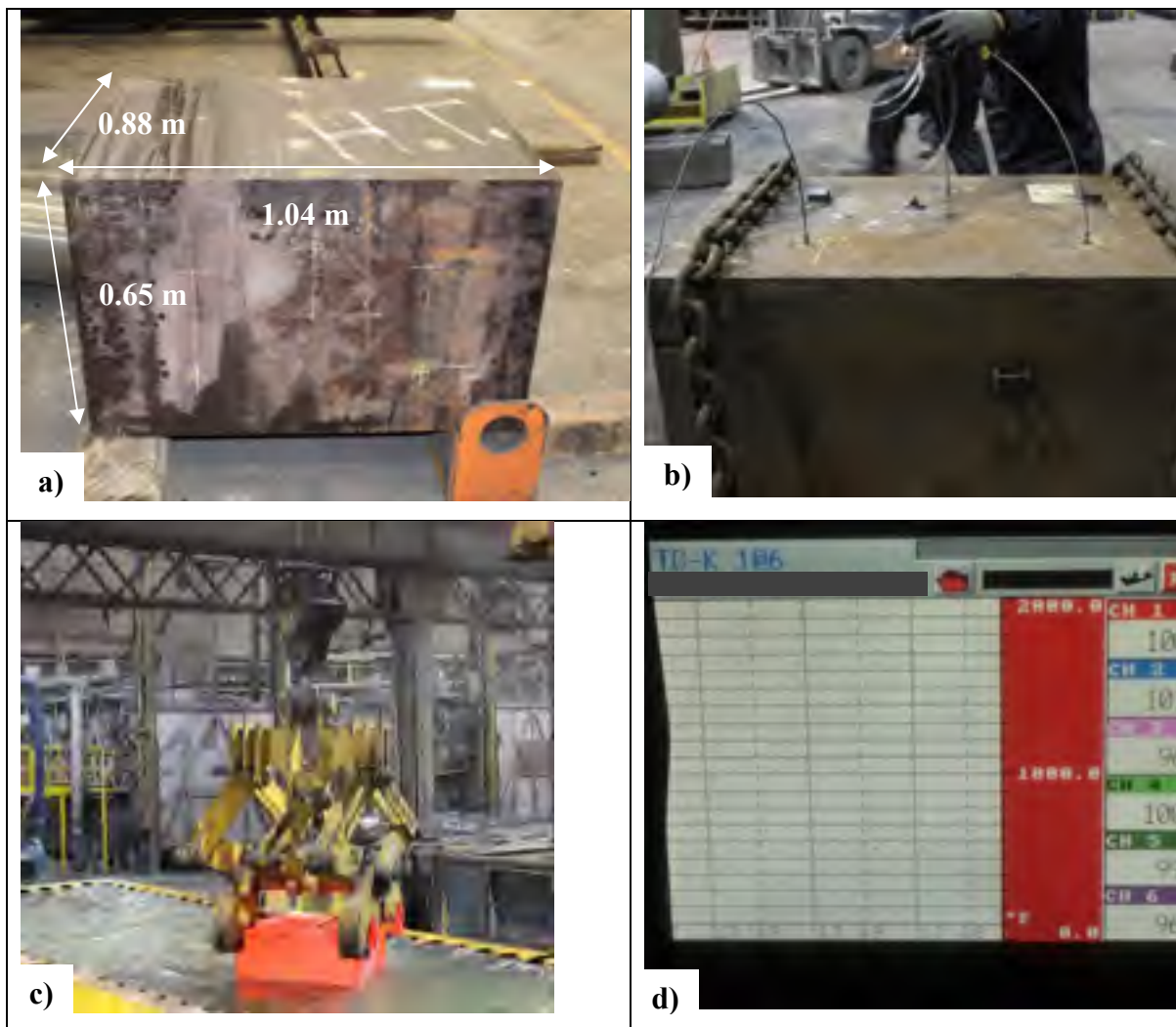


Figure 3-9. Procédures d'instrumentations de thermocouples. **a)** dimensions de la brame **b)** positionnement de thermocouples **c)** trempe de la brame **d)** enregistreur de température

Un enregistreur de température à 18 canaux a été utilisé pour pouvoir enregistrer la température des thermocouples.

Il faut mentionner que l'enregistrement de la température a été maintenu durant tout le cycle du traitement thermique : austénitisation puis trempe, ce qui génère des fichiers très volumineux à analyser.

Plus de détails sont discutés dans les sections 5.3.1 et 5.5.1.

3.4 Mesure 3D de la géométrie de la brame expérimentale

La mesure tridimensionnelle de la géométrie de la brame a été réalisée par un scanneur optique manuel portable de type 3D HandyScan (CreaForm / Exascan). Ce scanneur est capable de mesurer avec précision la géométrie de la brame expérimentale vu la haute résolution dont il dispose.

Le scanneur utilisé, est muni d'une technologie Laser (Exascan) couplé avec une caméra de haute résolution. Plusieurs marqueurs (pastilles) sont placés sur le bloc pour servir de points de référence x, y, z.

Le nombre de marqueurs (positionneurs) est décidé en fonction de la sensibilité et de la complexité de la zone à scanner, dans le but de générer une densité du maillage capable de produire une bonne qualité de mesure.

La reconstruction (rétro-ingénierie) du modèle 3D a été réalisée par le logiciel Catia V5 à partir du nuage de points généré préalablement par le scanneur.

Dans la section 6.3.2, des détails sont donnés sur la méthodologie suivie pour la reconstruction de la géométrie externe du bloc afin d'estimer la distorsion induite par la trempe.

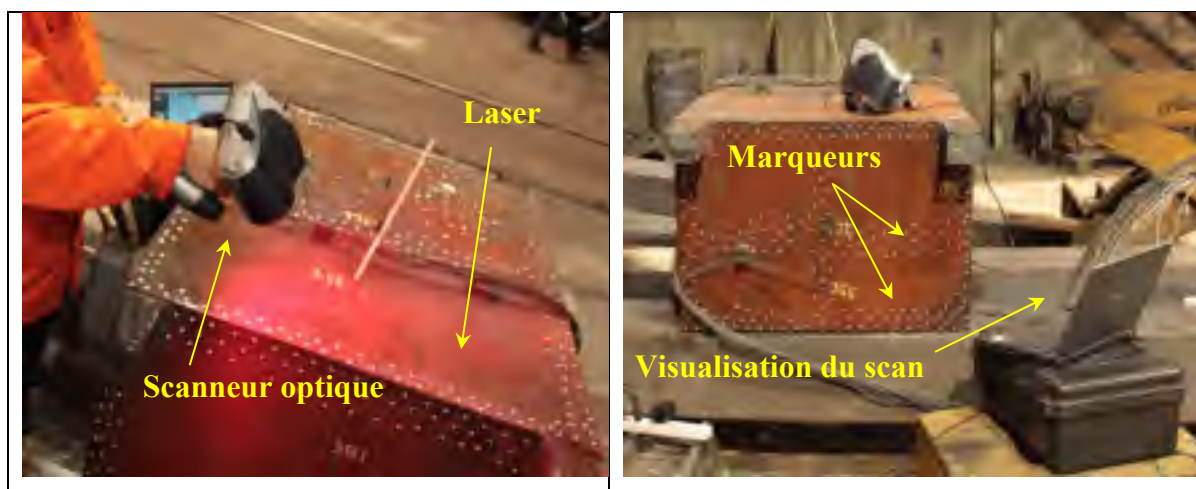


Figure 3-10. Technique utilisée pour la mesure de la géométrie du bloc.

3.5 Techniques métallographiques

3.5.1 Essais réalisés sur le dilatomètre

Afin d'alimenter le modèle éléments finis par des données matériaux fiables, le dilatomètre DIL805 A/D a été utilisé essentiellement pour les besoins suivants :

- Détermination des températures spécifiques : B_s , M_s .
- Détermination des coefficients d'expansion thermique.
- Détermination de l'expansion volumique due au changement de phase.
- Calcul de l'évolution des fractions volumique lors de la trempe (validation).

Néanmoins, la pratique industrielle fait en sorte que les blocs de fortes dimensions après trempe, subissent immédiatement un revenu qui peut aller jusqu'à 2 jours pour réduire le niveau des contraintes résiduelles générées dans la brame (danger d'explosion du bloc à cause de fissurations préalablement initiées), réduire la dureté en surface qui pourra attendre jusqu'à 700 HV. Malheureusement ce revenu, pourra biaiser l'analyse microstructurale établie après trempe, à cause de la précipitation des carbures, décomposition de l'austénite résiduelle...etc. Cependant, pour pouvoir isoler seulement l'étude de l'influence de la trempe sur l'ensemble de la microstructure du bloc, l'évolution de la température de la brame a été introduite au dilatomètre pour reproduire le cycle thermique réel subit par chacun des thermocouples instrumentés dans la brame. Ceci a permis d'étudier l'influence de l'évolution de chaque température de refroidissement sur les cinétiques de transformation de phase et finalement sur la microstructure obtenue après trempe.

Les courbes de dilatations obtenues sont utilisées pour analyser l'évolution des fractions volumique après trempe.

3.5.2 Techniques d'imagerie

Le microscope électronique à balayage (MEB Hitachi TM 3000) a été privilégié pour étudier la microstructure des échantillons et révéler la morphologie de différents microconstituants, ce qui pourra être utilisé comme validation qualitative de la morphologie des phases présentes.

La préparation des échantillons comprend le polissage et l'attaque chimique.

Le polissage est réalisé via une polisseuse automatique jusqu'à obtenir une granulométrie de 1 μ m. L'attaque chimique a été effectuée en utilisant le réactif villela (1 g d'acide picrique, 4 mL HCl, 100 mL d'éthanol) pendant 30s.

3.5.3 Mesure de la dureté

Après traitement thermique, la surface des échantillons a été préparée pour les essais de dureté. La méthode Vickers a été adaptée en utilisant un chargement de 1kgf.

Il faudra noter que la mesure de la dureté concerne uniquement les échantillons dilatométriques ayant subi des refroidissements (naturels) qui reflètent leurs positionnements respectifs dans la brame.

L'empreinte des diagonales a été mesurée par le microscope optique (3D laser Olympus Lext OLS4100). Un minimum de 10 indentations a été utilisé pour mesurer la dureté moyenne pour chaque échantillon.

CHAPITRE 4

ARTICLE 1 : PREDICTION OF HEAT TRANSFER COEFFICIENT DURING QUENCHING OF LARGE SIZE FORGED BLOCKS USING MODELING AND EXPERIMENTAL VALIDATION

Yassine Bouissa ^{a,*}, Davood Shahriari ^a, Henri Champliand ^a, Mohammad Jahazi ^{a,*}

^a Mechanical Engineering Department, École de technologie supérieure, 1100, rue Notre-Dame Ouest, Montréal (QC) Canada, H3C 1K3

Cet article a été publié dans le journal « Case Studies in Thermal Engineering »
en Décembre 2018 (<https://doi.org/10.1016/j.csite.2018.100379>)

L'objectif principal de cet article est le développement d'une nouvelle méthodologie d'optimisation qui a permis d'estimer le coefficient de transfert thermique (HTC) durant la trempe à l'eau d'une brique forgée de taille industrielle. Notamment, l'identification du modèle d'évolution de HTC en fonction de la température de surface s'est avérée primordiale.

L'article présente des résultats expérimentaux validant les résultats de simulation, ce qui a amélioré la compréhension de la problématique du transfert thermique dans le cas de l'application étudiée, mais aussi de mettre en lumière l'effet du couplage du modèle métallurgique sur les profils de températures, ainsi que l'impact de la chaleur latente. Ceci a érigé une sensibilisation pour améliorer le modèle métallurgique pour les travaux futurs.

ABSTRACT

In this study, a new method is developed to predict an accurate convective heat transfer coefficient (HTC) during quenching of large size steel blocks, using a combination of 3D Finite Element (FEM) simulations and a progressive artificial neural network (ANN).

The HTC profile of the first inputs used for FEM simulations were acquired from the literature to calculate the cooling temperature profiles at specific locations. The training of the ANN was

set up between HTC's and their corresponding FEM-calculated temperature. Experimental validation was carried out by instrumenting a large size forged steel block during the quench process. The experimental cooling curves were used for validation of the FEM simulation, as well as for the prediction of new HTC's by simulating the ANN. Results show that the proposed method provides progressively more accurate predictions than the existing ones reported in the literature.

A mean absolute percentage error (*MAPE*) of 1.47% was found between experimental and calculated cooling curves for the predicted HTC, further demonstrating a better prediction ability of the proposed method.

Keywords : Heat transfer coefficient of steel quenching large forged blocks, FEM simulation, Artificial Neural Network, TTT, Phase transformation

Abbreviations : ANN : Artificial neural network, BP : Back-propagation, CCT : Continuous cooling transformation diagrams , FEM : Finite Element Method , HTC : Heat transfer coefficient, JMAK : Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov model , *MAPE* : Mean absolute percentage error , Tansig : Hyperbolic tangent function , TTT : Time temperature transformation diagrams

Nomenclature

a : Activation function

B_s : Bainite transformation start temperature (in °C)

b_j, b_k : Bias of the neuron j, k

C_p : Specific heat ($\text{J.kg}^{-1} . \text{K}^{-1}$)

ΔH^φ : Enthalpy of phase transformation (J.kg^{-1})

e_i, e_i^x : Absolute percentage error at time t_i

f : Volume fraction of each phase

f^φ : Volume fraction of the phase φ

h, HTC : Heat transfer coefficient ($\text{W.m}^{-2} . \text{K}^{-1}$)

h_r : Heat transfer coefficient due to radiation ($\text{W.m}^{-2} . \text{K}^{-1}$)

h_c : Heat transfer coefficient due to convection ($\text{W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$)
 $[HTC]_{k \times m}$: Heat transfer coefficient matrix with k lines and m columns
 HTC^x : HTC column vector, where x is the column position of a matrix
 HTC^{ANN_p} : HTC predicted by ANN, where p is the number of predictions
 HTC_n : Normalized Heat transfer coefficient
 L : Characteristic length (m)
 M_s : Martensite transformation start temperature (in $^{\circ}\text{C}$)
 n, n_i : Exponent of JMAK equation at time t_i
 P^{φ} : Thermo-physical property of the phase φ
 Q : Internal heat source due to latent heat
 R : Correlation coefficient
 t : Time (s)
 T : Temperature (in $^{\circ}\text{C}$)
 T_s : Temperature at the surface (in $^{\circ}\text{C}$)
 T_f : Temperature of fluid near to the surface (in $^{\circ}\text{C}$)
 $[T]_{i \times m}$: Temperature matrix with i lines and m columns
 T_n : Normalized temperature
 T^{exp} : Temperature measured by thermocouple ($^{\circ}\text{C}$)
 T^x : Temperature calculated by FEM, where x is the column position of a matrix
 τ_i : Time step (s)
 t_i^* : Fictitious time (s)
 u_j : Output value of the neuron j
 w_{ji}, w_{kj} : weight matrices

Greek symbols:

α : Constant of Marburger equation
 Ω : Volume domain used for simulation
 Γ : Surface domain used for simulation
 σ : Stefan-Boltzmann constant, $\sigma = 5.670367 \times 10^{-8} \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-4}$
 θ, θ_i : Constant of JMAK model,
 φ : Denotes the present phase (i.e austenite, γ bainite, B or martensite, M).
 λ : Thermal conductivity ($\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$)
 ρ : Density (kg.m^{-3})
 ϵ : Emissivity of oxidized steel
 δ : Value criteria for the *MAPE* convergence

4.1 Introduction

Medium carbon low alloy steels are commonly used as die materials for plastic injection molds in the automotive industry (ASM-International-Handbook-Committee, 1991). The manufacturing process consists of ingots casting, open die forging, and finally, quench and temper operations (Jaouen, Costes, Saad, Lasne, & Ducloux, 2016). Uniform hardness and grain size, along with a bainitic microstructure, are among the most important characteristics required by the industry for these steels. These characteristics are mostly dependent on the efficiency of quenching and temper operations (Beaudet et al., 2012; G.E. Totten, 2006). Large size forging ingots must be produced in order to respond to demand by the automotive and trucking industries for the manufacture of large size plastic injection molded components (ASM-International-Handbook-Committee, 1991). However achieving a uniform hardness, microstructure and grain size through the thickness of a large size forged blocks during quenching and tempering is a very challenging task (Araki, Yuasa, & Tamura 2013; Beaudet et al., 2012).

The challenge is mainly due to the formation of a significant thermal gradient between the surface and the center, associated with the large size of the block. Each point along the block is associated with a specific cooling profile, which in turn, is able to trigger a precise sequence of phase transformations from austenite to different products, such as martensite, bainite, pearlite or ferrite, depending on the steel composition. As a result, the phase mixture may vary from one point to another, and consequently, the mechanical properties of the material (Hardness, Yield and Ultimate Tensile Strength) are expected to vary from the surface to the core. High residual stresses are then generated in the block to balance the heterogeneity caused by the thermal gradient and non-uniform phase transformations. These stresses induce distortions that could even initiate cracks in severe cases (Cheng et al., 2006; G. Y. Liu et al., 2016). It is therefore very important to understand and quantify the impact of various quenching parameters on the evolution of hardness, residual stresses and metallurgical structure (Totten et al., 2002).

Nevertheless, the traditional trial and error method is questionable, given the variability of the products (dimensions, steel composition, property requirements) and quenching conditions (austenitization temperature, quenching bath temperature, bath turbulence, positioning in the bath, etc.). Therefore, the quantification of quenching process parameters at industrial levels requires the development of reliable simulation tools that would integrate the coupling between thermal, metallurgical, and mechanical fields during the quench process (Şimşir, 2008b).

The most important process parameter that influences the quench severity is the heat transfer coefficient (HTC), which estimates the heat extraction rate at the surface. An inaccurate estimation of HTC may lead to significant uncertainties in microstructure prediction or residual stress levels after quenching (Şimşir, 2008b), due to the strong interactions between the temperature, microstructure, and mechanical properties. Similarly, an accurate determination of the material properties for each phase (i.e., austenite, bainite, martensite, etc.) at different temperatures is necessary, but very challenging and time consuming (Evcil, Mustak, & Şimşir, 2016). Generally, a constant HTC and material properties that are only temperature-dependent (i.e., that do not consider the influence of steel composition) are most commonly used (Bhadeshia, 2001; Jung, Kang, & Lee, 2012; Perzynski et al., 2016; Porto de Oliveira et al., 2010). HTC is often formulated as surface temperature-dependent in describing the wetting phases during water quenching (i.e., vapor blanket, boiling, convection) (Hans M. Tensi, 2006; Hasan, Peet, Jalil, & Bhadeshia, 2011). Although such simplifications may be reasonable when small parts are studied (Ferguson, Li, & Freborg, 2014; H. Li, Zhao, He, & Mu, 2008; Singer, 2014; Sugianto, Narazaki, Kogawara, & Shirayori, 2009), their application to large size components may lead to significant inaccuracies in temperature prediction inside the block (Evcil et al., 2016). However, little data is available in the case of large size forged blocks, and most results that have been obtained are based on simulations with limited or no experimental validation during the quench process.

Several techniques and methods are used for HTC estimation during quenching. For instance, in small specimens, characterized by low Biot numbers ($Bi = \frac{hL}{\lambda} < 0.1$), it is usually assumed that the excitation due to the quench medium provides a uniform thermal field in the entire volume of the part (i.e., the surface and core react similarly) (Cengel, 2002; Hasan et al., 2011). For this reason, the lumped capacitance model has been considered as a direct method for HTC

calculation. The above assumption, however, is not applicable when quenching large size blocks which are characterized by non-uniform thermal fields. Attempts have been made to use a modified lumped capacitance method to estimate the HTC of large size shafts; however, significant differences between the experimental and simulated temperature profiles were observed (Boniardi, Guagliano, Casaroli, Andreotti, & Ballerini, 2014).

Inverse thermal analysis has usually been considered as a suitable approach to determine HTC during cooling. In this procedure, the link between HTC and the calculated temperature could be established by several techniques such as finite difference, finite element or analytical methods. HTC is estimated indirectly during quenching by considering an optimization process in which the temperature cost function (sum of squared errors) between the calculated temperature and the measured one must be minimized (Wood R, 2006). However, the application of the inverse method in the determination of HTC in the case of cooling has been limited to medium size or axi-symmetrical 2D models, mostly due to the associated computational costs (Felde, Szénási, Kenéz, Wei, & Colas, 2015a; H. Li, Zhao, He, et al., 2008). Publications on the application of 3D FEM combined with inverse methods in HTC determination are very limited, and often do not consider the effect of phase transformations (Huiping et al., 2006; H. Li, Zhao, He, et al., 2008; Malinowski, Telejko, Hadała, Cebo-Rudnicka, & Szajding, 2014b).

In this investigation, a new methodology for the accurate determination of HTC during quenching of a large size steel block is presented. The methodology is based on the design of a progressive neural network between pre-existing HTC data and their corresponding calculated cooling curves using 3D FEM simulations in specific locations inside the block. A step-by-step approach was used to determine the most accurate estimation of HTC by minimizing errors between simulations and experimental measurements. The validity of the proposed model was assessed through the instrumentation of a large size ingot and temperature measurements during the quench process.

4.2 Coupled fields in numerical modeling of the quenching process

Steel quenching is a complex multi-physics problem during which, driven by heat transfer, phase transformations and mechanical interactions simultaneously takes place inside the material (Caner Şimşir & C Hakan Gür, 2010). The occurrence of phase transformation in steel, from austenite to martensite, bainite, or pearlite, releases a significant amount of heat (latent heat) that must be taken into account (Perzynski et al., 2016). However, the presence of significant thermal gradients during water quenching, particularly in the case of large size ingots, results in a variety of phase transformations (i.e., different amount of latent heats) at different locations of the ingot. Therefore, a metallurgical constitutive model is needed to predict the generated latent heat as an internal heat source during phase transformation. The final stress state of the part must therefore also incorporate the contribution from phase transformation in addition to that from the thermal gradient. Figure 4-1 shows schematically the coupling between the temperature, stress and phase transformation that occurs during the steel quenching process.

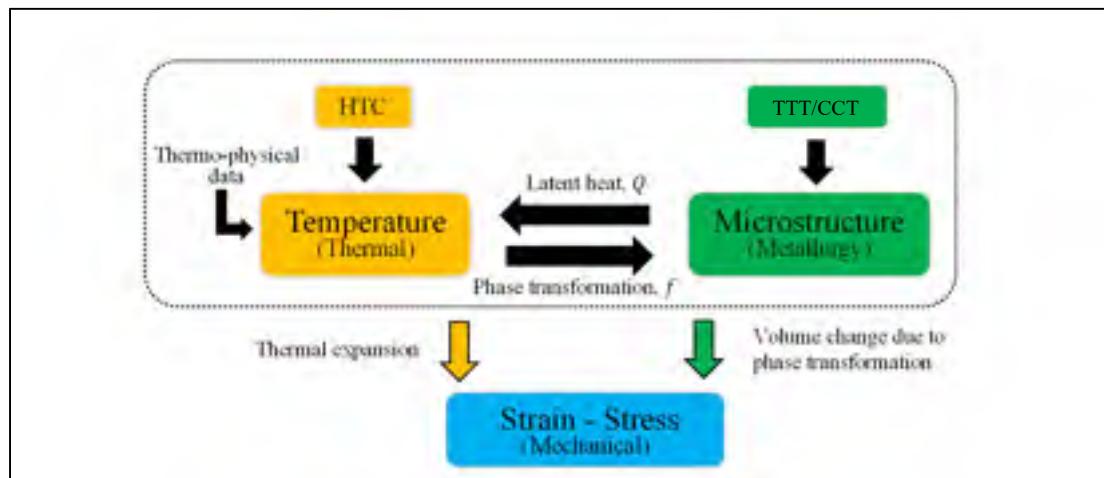


Figure 4-1. Coupling between thermal, mechanical and microstructural fields in quench modelling.

The current quench problem was modeled by FEM using the quench module of Forge® NxT 1.1 software (FORGE®NxT). The code takes into account the coupling between thermal, metallurgical and mechanical phenomena, as described in Figure 4-1. In the present study, only the coupling between the thermal and metallurgical fields were considered, as the focus of the

paper is on the determination of an accurate HTC, and not on the generation of residual stresses. The constitutive equations used to solve thermal and phase transformation models are detailed in sections 4.3 and 4.4. It should be noted that the heat generation resulting from the plastic deformation due to quenching is not considered in the present numerical model due to its relatively minor effect on the overall heat balance of the large size ingot (Caner Şimşir & C Hakan Gür, 2010).

4.3 The thermal model

The thermal field could be modeled using the Fourier heat conduction equation of the transient problem as follows (Şimşir, 2008a):

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}(\lambda \nabla T) + Q \quad (4-1)$$

with ρ , C_p and λ density being the specific heat and thermal conductivity, respectively, and where Q is the internal heat source due to the latent heat released after decomposition of the volume fraction of austenite (f_φ) to another φ -phase (φ represents austenite (γ), bainite (B) or martensite (M)).

This heat could be expressed as:

$$Q = \rho \cdot \Delta H^\varphi \cdot \dot{f}^\varphi = \rho \cdot \Delta H^\varphi \cdot \frac{df^\varphi}{dt} \quad (4-2)$$

The boundary conditions used for Eq. (4-1) are:

$$T(x, y, z, t = 0) = T(x, y, z) ; x, y, z \in \Omega \quad (4-3)$$

Where

$T(x, y, z, t = 0)$ is the initial temperature of the block before quenching, and

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial n} = q ; (x, y, z) \in \Gamma \quad (4-4)$$

The term q is related to the heat transfer mechanism (e.g., convective, radiation) that governs the energy flow.

At the cooling stage, the total HTC describes the sum of the convective and radiative heat transfer coefficients at the surface of the workpiece (Cengel, 2002). Thus, Eq. (4-4) can be written as:

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial n} = HTC(T_s - T_f) = (h_c(T) + h_r(T))(T_s - T_f) \quad (4-5)$$

where

$$h_r(T) = \sigma \cdot \epsilon \cdot (T_s^2 + T_f^2)(T_s + T_f) \quad (4-6)$$

The HTC used in this study was applied on all the surfaces of the block as a boundary condition. Details regarding the HTC values are provided in sections 4.5.4 and 4.6.1, respectively. The emissivity of steel was set to $\epsilon = 0.8$, corresponding to an oxidized surface of a carbon steel during austenitization (ASM-International-Handbook-Committee, 1991).

4.4 The phase transformation model

Water quenching of the large size steel block introduces a significant range of cooling rates between the surface and the core (Božidar Liščić, 2006). As a result, a gradient of microstructure from full martensite to full bainite is formed in the investigated large size forged ingots, as previously reported experimentally (Song, Gu, Pan, & Hu, 2004). Thus, a thermo-physical property, P of the material, such as the thermal conductivity, density and specific heat during the quenching process, change as a function of the volume fraction, f^φ and the thermo-physical property P^φ , of each individual phase φ .

The additivity rule is generally used to quantify the contribution of each phase φ to different thermo-physical properties of the material at temperature T (S. H. Kang & Y. T. Im, 2007; Saunders, Guo, Li, Miodownik, & Schillé, 2003):

$$P = \sum P^\varphi f^\varphi \quad (4-7)$$

In case of phase transformation under isothermal conditions, the calculation of the decomposed volume fraction of austenite is described by the John-Mehl-Avrami equation, considering the diffusion phenomenon (Şimşir, 2008a):

$$f = 1 - \exp\{-\theta t^n\} \quad (4-8)$$

In the present analysis, the nucleation and growth of a new phase during quenching occurs under non-isothermal conditions. Phase transformation during continuous cooling was divided into the sum of a finite number of isothermal steps using the Scheil's additivity rule (Cardinaux, 2008):

$$\sum \frac{\Delta t}{\tau_i(T)} = 1 \quad (4-9)$$

Two variables, fictitious time, t_i^* , and fictitious volume fraction of transformed phase, f_i^* , were used to obtain the real transformed fraction of each phase. They are represented by the following equations:

$$t_i^* = \left[\frac{-\ln(1-f_{i-1})}{\theta_i} \right]^{1/n_i} \quad (4-10)$$

t_i^* represents the total time required at temperature T_i to form a volume fraction of the new phase equivalent to the summative quantities of the transformed phases until T_i .

The time interval, Δt , at each temperature step is:

$$t_i = \Delta t + t_i^* \quad (4-11)$$

Therefore, the amount of fictitious the transformed phase is given by:

$$f_i^* = 1 - \exp\{-\theta_i(t_i^* + \Delta t)^{n_i}\} \quad (4-12)$$

Hence, the real transformed fraction at the end of each time step is defined by:

$$f_i = f_i^* (f_{i-1}^Y + f_{i-1}) f_{max} \quad (4-13)$$

where f_{max} is the maximum possible amount of the new fraction, and f_{i-1}^Y and f_{i-1} are respectively the untransformed austenite and new phase transformed fraction at the time step $i - 1$.

For martensitic transformation, the Koistinen-Marburger equation was employed in the numerical modelling as follows (Şimşir, 2008a):

$$f^M = 1 - \exp\{-\alpha(M_s - T)\} \quad (4-14)$$

4.5 Material and methods

4.5.1 Experimental setup and procedures

The instrumentation of the forged block and the quench bath followed specific procedures to ensure that the experimental conditions are consistent with the simulation conditions, as described below:

4.5.1.1 Block Instrumentation:

A large size block measuring $2566 \times 1220 \times 508 \text{ mm}^3$ was austenitized at 871°C in a gas-fired furnace and then quenched and maintained in agitating water at 20°C for 2.5 hours. The forging and quenching processes were conducted at Finkl Steel-Sorel Forge, Sorel, Quebec, Canada. Cooling curves were obtained during the quenching process by embedding two K-type thermocouples (TC₁ & TC₂). The standard error associated to the thermocouples measurement in the experienced range of temperature was estimated to be $\pm 0.75\%$.

The chemical composition of the forged medium carbon low alloy steel ingot used in the present investigation was provided in Table 4-2.

Figure 4-2 illustrates the size of the block and the positions of TC₁ and TC₂ and their corresponding sensors in the FEM model. The data extracted from the thermocouples were implemented in the ANN model to predict HTC and study the effectiveness of the FEM simulation. Details regarding the progressive ANN will be presented in section 4.5.5.

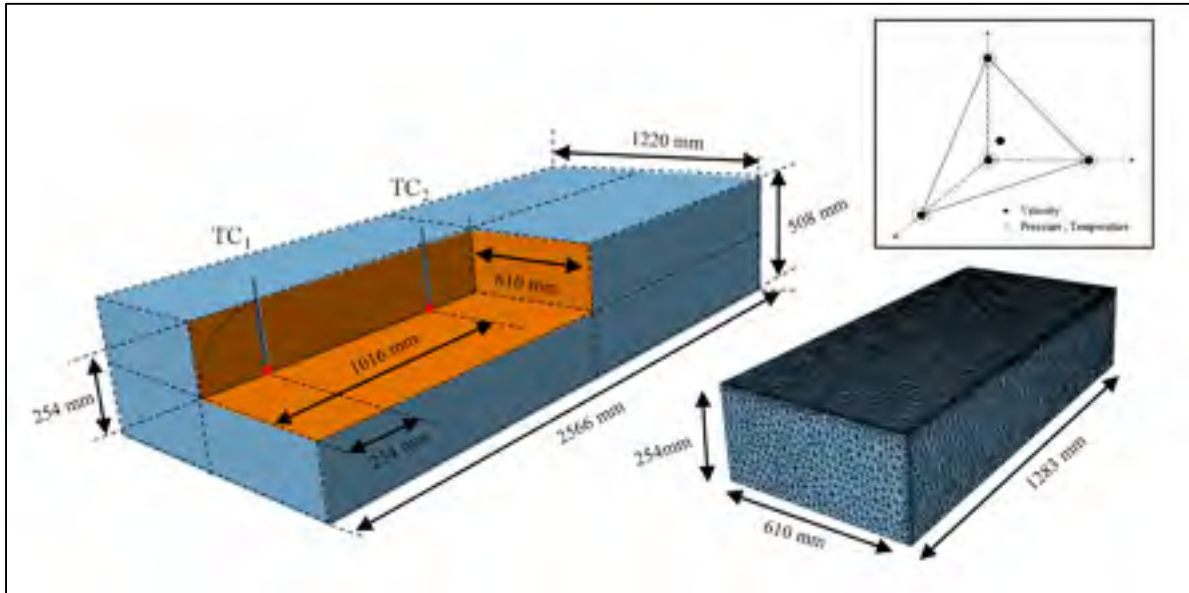


Figure 4-2. Geometry of the quenched block, position of the thermocouples, meshing and the tetrahedral elements used for FEM simulation.

4.5.1.2 Quench bath Instrumentation

The quench bath was equipped with pumps to maintain constant water contact by providing high recirculation over the block (forced convection). To assess the interfacial heat transfer between the block and the quenchant, two supplementary thermocouples were used to record the evolution of the inlet and the outlet water temperatures in the quench bath. T_{Mean} was the average temperature between the inlet and outlet thermocouples, which was used as an input temperature, T_f , in FEM simulations. Table 4-1 shows the evolution of the inlet, outlet and the calculated mean temperature, which represents the medium temperature.

Table 4-1. Evolution of the quench bath temperature during the process.

<i>Time (s)</i>	0	300	600	900	1200	1800	3300	4500	5700	7200	9300
$T_{Inlet} (^{\circ}C)$	20	20	20	20	20	20	20	20	20	20	20
$T_{Outlet} (^{\circ}C)$	38.4	46.8	49.7	50.8	51.0	50.1	44.9	39.8	36.0	34.2	32.6
$T_{Mean}=T_f (^{\circ}C)$	29.2	33.4	34.8	35.4	35.5	35.0	32.4	29.9	28.0	27.1	26.3

4.5.2 Material data set

4.5.2.1 TTT/CCT diagrams

Time-Temperature-Transformation (TTT) and Continuous-Cooling-Transformation (CCT) diagrams provide critical information with regard to phase transformation occurring under isothermal (TTT) or non-isothermal (CCT) conditions (Božidar Liščić, 2006) which are used as input data in the simulation of the quenching process (Buchmayr & Kirkaldy, 1990; P.-z. Cao, Liu, & Wu, 2013; Smoljan, Smokvina, Hanza, Tomašić, & Iljkić, 2007).

In the present investigation, JMatPro® software (Saunders et al., 2003) was utilized for the generation of the TTT and CCT diagrams of the investigated steel. It should be noted that such an approach has successfully been used in the case of highly alloyed steel (Schillé, Guo, Saunders, & Miodownik, 2011). However, for further validation, the predicted CCT diagram was compared with the one previously determined experimentally by some of the authors in this work (Chentouf, Jahazi, Lapierre-Boire, & Godin, 2014), and the results are reported in Figure 4-3.

It can be seen that there is good agreement, particularly for B_S and M_S between the experimentally observed CCT diagram and the calculated one. The above comparison confirms the reliability of the calculated TTT by JMatPro®, which will be used as input for the FEM analysis.

Table 4-2. Typical chemical analysis of the investigated steel - % weight.

C	Mn	Si	Ni	Cr	Mo	Other
0.33	1.00	0.40	0.50	1.85	0.50	Micro-alloying

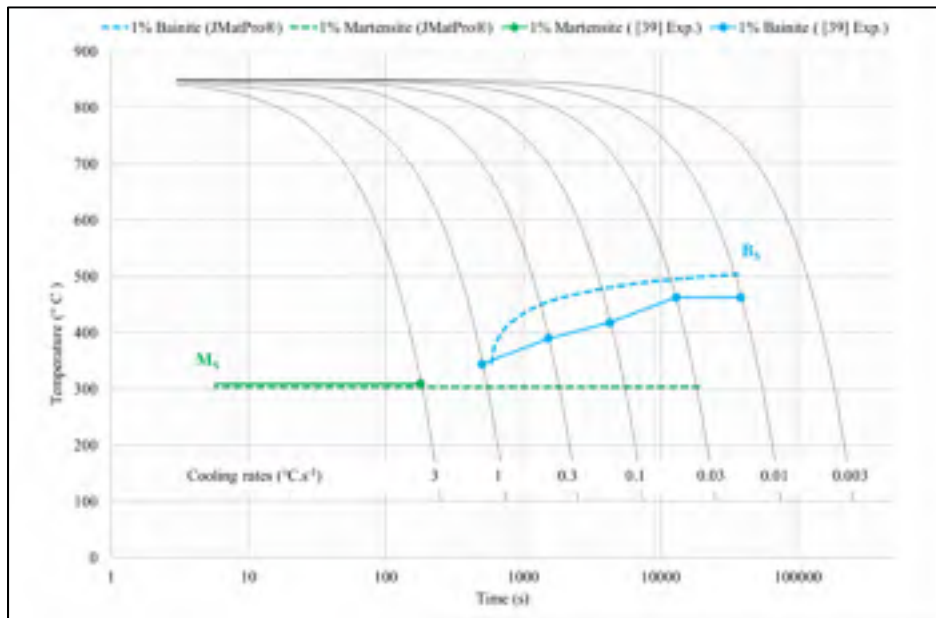


Figure 4-3. Comparison between experimental CCT determined from (Chentouf et al., 2014) and the simulated one using JMatPro®.

4.5.2.2 Thermo-physical properties

A combination of data from the literature and JMatPro® was also used for estimating the thermo-physical properties. This approach has already been used by several other authors (Z. Guo, Saunders, Schillé, & Miodownik, 2009; Mustak, Evcil, & Şimşir, 2016; Saunders et al., 2003), and is considered accurate enough over the temperature range of interest that covers the quench process, especially for thermal conductivity $\lambda(T)$, specific heat $C_p(T)$ and density $\rho(T)$. The latent heat released during martensitic transformation was also calculated by JMatPro®, and considered equal to that corresponding to bainitic transformation

($\Delta H^B = \Delta H^M$) based on Piekarska's studies (W. Piekarska, 2015; Wiesława Piekarska & Kubiak, 2012).

4.5.3 FEM model specifications

Initially, the 3D model of the workpiece was built using Catia V5R21 software. The symmetrical shape of the block allowed the use of one eighth (1/8) of the model. The model was then imported into Forge[®] NxT 1.1 code for meshing. The P1+/P1 linear tetrahedral mesh elements with four integration points, for the temperature-pressure was implemented to discretize the 3D model. The independence of the grid was tested by varying progressively the grid size until reaching an optimized number of nodes (18210) and elements (86664) that ensure both precision and convergence in an acceptable calculation time. Figure 4-2 shows the 3D FEM model and the mesh type used for the simulations. It should be noted that the time step during the FEM simulations was controlled automatically by the software using implicit schemes (Crank Nicolson's scheme for initialization, followed by Dupont's scheme) (Cardinaux, 2008). The above approaches allowed a better stability of the calculation and reduced the impact of temperature oscillations due to thermal shock during quenching, as detailed in (Aliaga, 2000; Cardinaux, 2008).

Table 4-3 below summarizes all the inputs used for FEM simulations.

Table 4-3. FEM Simulation input parameters.

Material parameters	Process parameters
TTT/CCT: Acquired from JMatPro [®] (Calibrated with experimental data in Figure 4-3)	Geometry: $2566 \times 1220 \times 508 \text{ mm}^3$ using one-eighth (1/8) symmetrical model (Figure 4-2)
Thermo-physical properties: $\rho(T), \lambda(T), Cp(T)$ (JMatPro [®])	Initial temperature = 871 °C (Austenitization temperature)
Latent heat (JMatPro [®]) $\Delta H_B = \Delta H_M$	The medium temperature: averaged from experimental measurement (Table 4-1)
The emissivity of steel: $\epsilon = 0.8$	HTC^{l-5} : acquired from the literature (Figure 4-4(b)) HTC^{ANNI-6} : acquired from ANN predictions (Figure 4-6)

4.5.4 Neural network specifications

In order to optimize the HTC parameter related to the quenching process of the large size steel block, an ANN approach was implemented under MATLAB using the Neural Network ToolBox (Beale, Hagan, & Demuth, 1992). The structure of the network, the activation function and the learning algorithm are the main requirements which should be implemented in an ANN.

The output data of the ANN were digitized from five HTC profiles reported in the literature in the works of Li, H. et al. (2008) on quenching of a steel similar to that investigated in the present study (H. Li, Zhao, He, et al., 2008). As shown in Figure 4 (b), the data were chosen, to cover the largest possible range of HTC fluctuations in order to allow a better training of the data, thereby increasing the accuracy and reliability of the predictions.

On the other hand, each HTC pattern was introduced as a boundary condition in the FEM code to calculate the temperature evolution for each 300s time interval during the total quenching time (9300s) of the block. In particular, the temperature profile T_i at TC_l for each time step was considered as an input for the ANN (Figure 4-4(a)).

To present the dimensionless temperature and heat transfer coefficient, the input and the output samples were automatically normalized by MATLAB between -1 and 1 using the following equations:

$$T_n = \frac{2(T-T_{min})}{(T_{max}-T_{min})} - 1 \quad (4-15)$$

$$HTC_n = \frac{2(HTC-HTC_{min})}{(HTC_{max}-HTC_{min})} - 1 \quad (4-16)$$

A back-propagation (BP) learning algorithm, between HTC_k data and T_i data simulated by FEM at TC_l , was selected for data training, as can be seen in Figure 4-4 (c). One hidden layer

was set in ANN architecture with eight neurons, which, after several trials, proved to be efficient for training.

The weights w_{ji} , w_{kj} and the bias b_j , b_k of the neural network indicate how the network alters the association of the neurons.

At the level of the hidden layer, the above variables generate a trigger value u_j toward the node j (Azizi & Ahmadloo, 2016), using the following equation:

$$u_j = \sum_{i=1}^{N_i} w_{ji} \cdot T_i + b_j \quad (4-17)$$

In this work, the use of the hyperbolic tangent as an activation function for hidden and output layers provided better performances. The “tansig” transfer function at the output of the hidden layer is given by:

$$a(u_j) = \frac{e^{u_j} - e^{-u_j}}{e^{u_j} + e^{-u_j}} \quad (4-18)$$

The activation function is also applied to each node of the output layer by the following equation:

$$HTC_k = a\left(\sum_{j=1}^{n_h} w_{kj} \cdot a(u_j) + b_k\right) \quad (4-19)$$

The Levenberg-Marquardt algorithm (TRAINLM), which is known to be a fast converging algorithm and one that has already been used for calculating HTC, was selected for (Ilker & ARAT, 2014; Soundararajan, Ramesh, Sivasankaran, & Sathishkumar, 2015) training. The training of the ANN network was considered efficient when a correlation coefficient above 0.95 was obtained ($R \geq 0.95$). A script was written in MATLAB, in order to maintain an automatic training until the required value of R was achieved.

The correlation coefficient during training, validation and testing was defined as follows:

$$R = \frac{\sum_1^{N_o} (HTC_k^{target} - \overline{HTC_k^{target}}) \sum_1^{N_o} (HTC_k^{output} - \overline{HTC_k^{output}})}{\sqrt{\sum_1^{N_o} (HTC_k^{target} - \overline{HTC_k^{target}})^2 \cdot \sum_1^{N_o} (HTC_k^{output} - \overline{HTC_k^{output}})^2}} \quad (4-20)$$

The experimental cooling temperature T^{exp} recorded at TC_I was used for the simulation of the network after being trained. HTC^{ANNp} denotes the predicted HTC using ANN simulations, where p represents the number of predictions. The HTC^{ANNp} was then smoothed with MATLAB to adjust the prediction irregularities at certain temperature zones before having it added to the previous trained network.

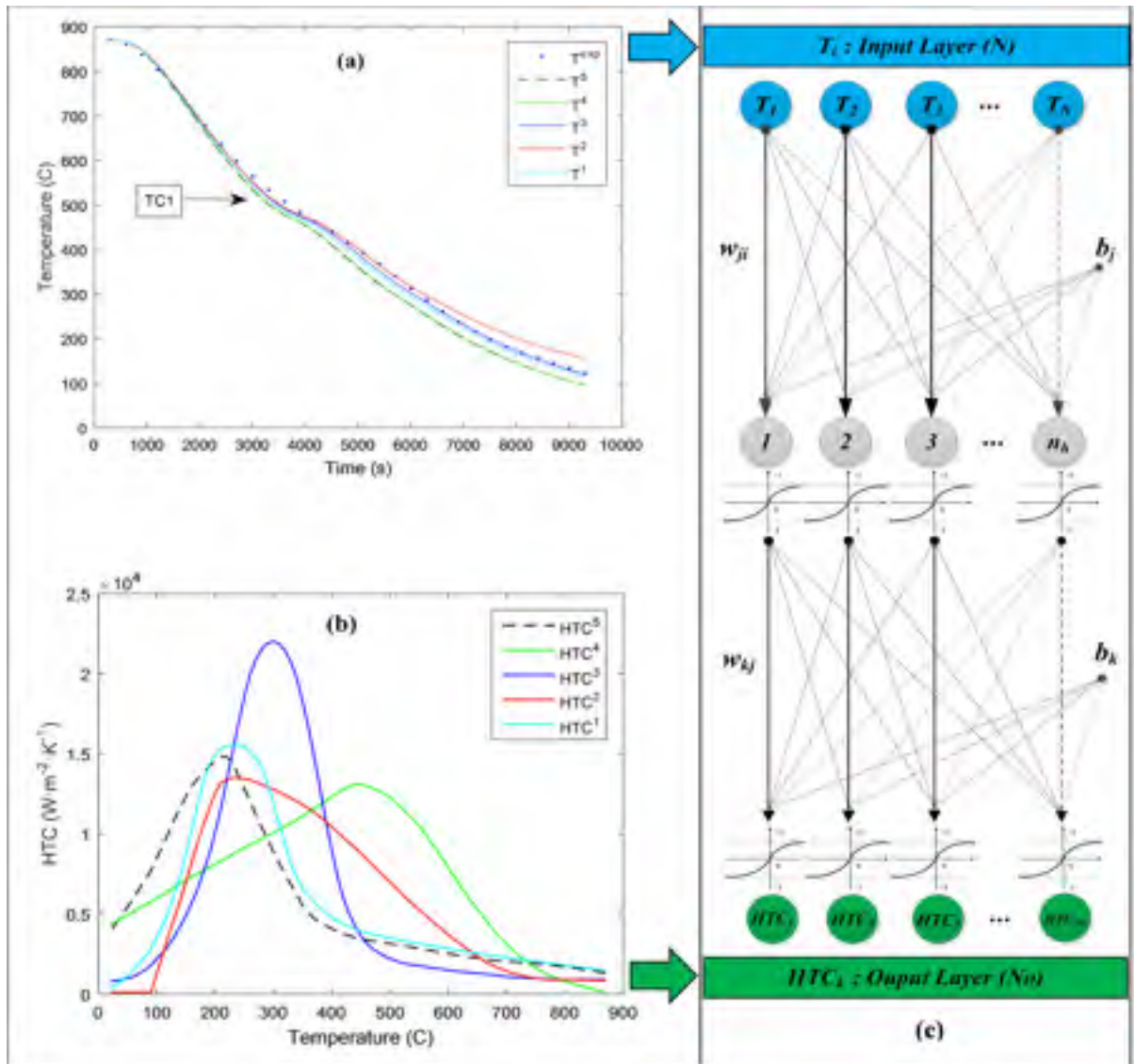


Figure 4-4. **(a)** Predicted cooling curves (solid lines) obtained by FEM using HTC^1 to 5 and experimental temperature profile (dotted lines) recorded by the thermocouple located in the near surface (TC₁). **(b)** HTCs digitalized from the works of (H. Li, Zhao, He, et al., 2008) used as output for ANN training. **(c)** Schematic of the back-propagation ANN training used in the present study.

The effectiveness of prediction due to any HTC^x was indirectly evaluated by using the mean absolute percentage error (MAPE) between the T^{exp} and its corresponding T^x . The MAPE for any calculated T^x is expressed as:

$$MAPE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{T_i^{exp} - T_i^x}{T_i^{exp}} \right| = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e_i \quad (4-21)$$

where e_i is the absolute percentage error between T_i^{exp} and T_i^x for each time step i , with $\Delta t_i = 300s$. The coefficient N is the same as defined in Figure 4-4(c).

4.5.5 Configuration of the ANN with FEM model for HTC optimization

The five selected $HTC^{1 \text{ to } 5}$ and their corresponding FEM simulations $T^{1 \text{ to } 5}$ at TC₁ sensor was used for the initialization of the ANN in MATLAB (left block in the flow chart of Figure 4-5). Specifically, the matrices $[T]_{i \times m}$ and $[HTC]_{k \times m}$ (with $m=5$) were used as input and output layers of the proposed ANN model (*ANN Training BLOCK* in the flow chart of Figure 4-5), respectively.

Once the ANN training is completed, the ANN simulation step takes place using the experimental temperature, T^{exp} , as input (the *ANN Simulation BLOCK* in the flow chart of Figure 4-5). The HTC predictions based on ANN simulations are only considered acceptable when the *MAPE* is smaller than the minimum specified value, δ . As long as the *MAPE* does not meet the specified criteria, both the predicted HTC^{ANN_p} (ANN simulations) and T^{ANN_p} (FEM simulations) are added simultaneously to the previous network dataset for retraining. After each prediction, the network grows progressively by feeding the input matrix $[T]_{i \times m}$ and the output matrix $[HTC]_{k \times m}$ respectively with new columns T^{ANN_p} and HTC^{ANN_p} to transform the new dataset to $[T]_{i \times m+1}$ and $[HTC]_{k \times m+1}$ for a new training. The flow chart used for HTC prediction is illustrated in Figure 4-5.

The ANN_p notation is used mainly to distinguish between the predicted and the initially trained HTC drawn from the literature; nevertheless, the two categories could be linked as follows: ($HTC^{ANN_1} = HTC^6$, $HTC^{ANN_2} = HTC^7$...). The ranking of the HTC^{ANN_p} accuracy is managed mainly by *MAPE* minimization, with the tracking of the maximum error $Max(e_i)$ indicating the magnitude and the location of the errors.

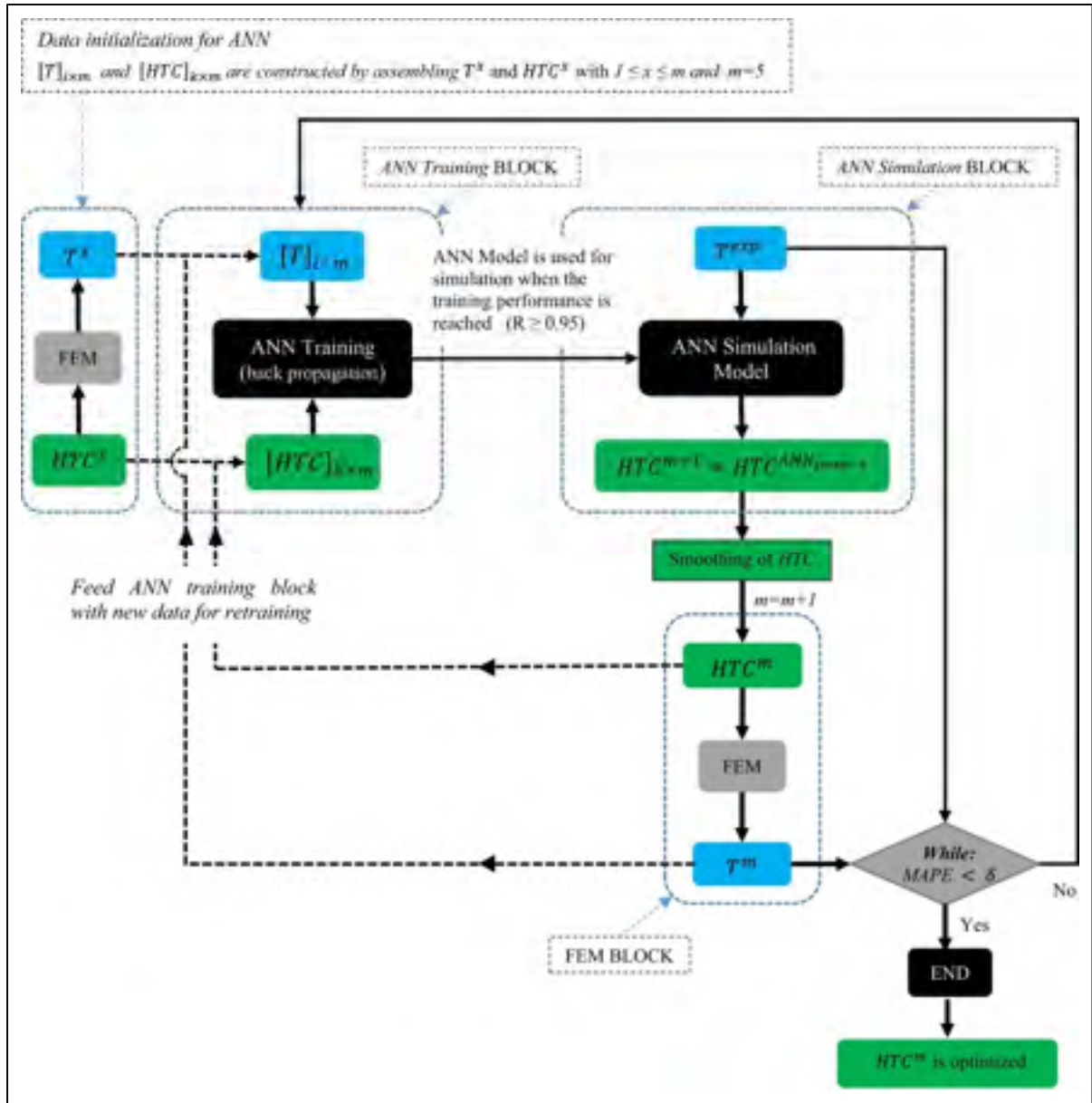


Figure 4-5. Flow chart of HTC prediction using ANN combined with FEM.

4.6 Results and discussion

4.6.1 ANN predicted HTC Profile

For each prediction of HTC^{ANNp} , obtained using ANN simulation, the performance of the trained network was tested using the correlation coefficient 'R'. The initial datasets were

limited (5 HTC profiles) and dispersed (differences in HTC profiles), which made it difficult to identify the patterns between data from the first two trained networks (under fitting). However, after the third training, the progressing ANN showed excellent performance.

Figure 4-6 shows that the first two predicted HTC^{ANN1} and HTC^{ANN2} present different shapes from $HTC^{1 \text{ to } 5}$ used for the initial training. It should be noted that starting from the third prediction, the shape of HTC^{ANN3} is converging for a common shape like as indicated for HTC^{ANN4} , HTC^{ANN5} and HTC^{ANN6} , with the maximum HTC value being located at around 320°C.

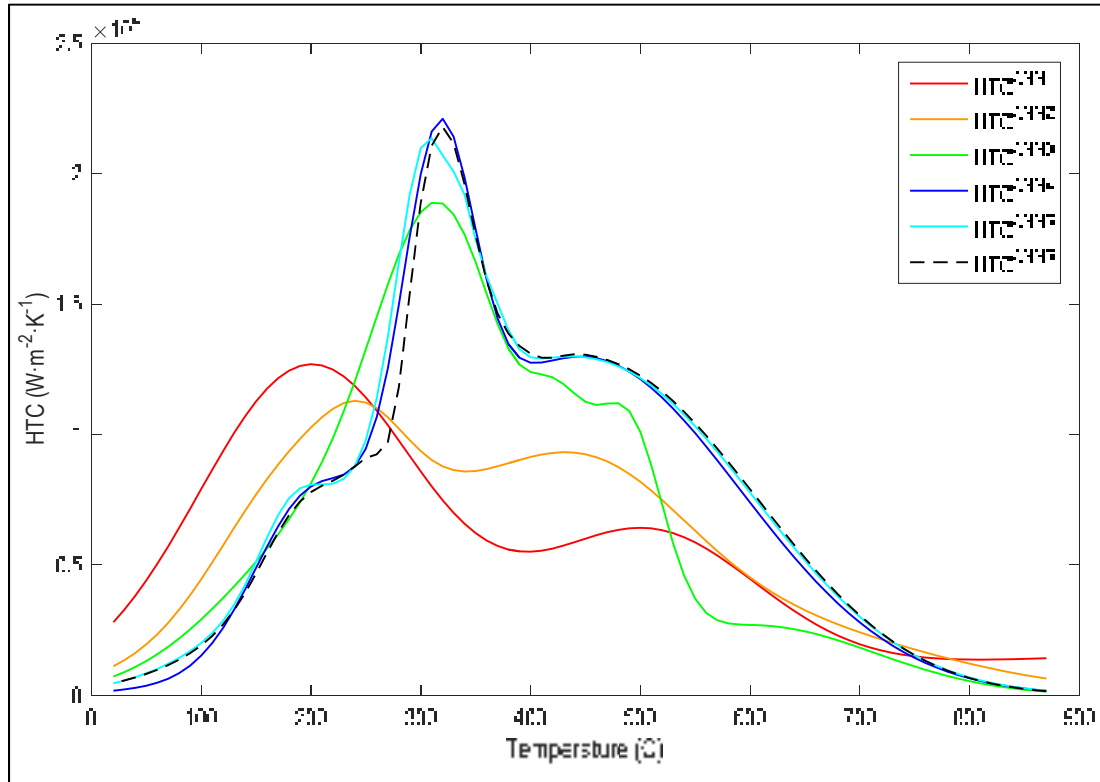


Figure 4-6. HTCs predicted by ANN.

4.6.2 Temperature prediction using HTCs predicted via ANN

As it can be seen in Figure 4-7, the temperature values of the cooling curves at TC₁ are lower than those at TC₂. This is related to the position of TC₁ which is located at a shorter distance from the cooled surfaces of the block as compared to TC₂, which is located in the center region of the block (see Figure 4-2). The center region is only affected by the cooling of the top and

bottom surfaces (assumption of an infinite rectangular parallelepiped) as a consequence of the thermal inertia due to the large length (2.56 m) of the block, as opposed to TC₁, which is affected by several surfaces. Accordingly, the *MAPE* was evaluated at the level of TC₁ to cover and average the effect of convection for all surfaces of the block. Figure 4-7 also shows that the cooling curves, $T^{ANN1\ to\ 6}$, calculated using $HTC^{ANN1\ to\ 6}$ get progressively closer to the target temperature, T^{exp} , especially for T^{ANN5} and T^{ANN6} , which show the best fits.

Further analysis of Figure 4-7 indicated that, both experimental and simulated cooling profiles show a change in the slope at around bainite start temperature, B_s ; however, the change is more significant for TC₂ thermocouple. This change is mostly related to the latent heat generated as a result of bainitic transformation. The larger difference observed for TC₂ is due to the higher transformed proportion of bainite (i.e. higher heat generation) in the center compared to the near-surface region where TC₁ is located. The large size of the block is another contributing factor to a higher temperature increase at the center, as the generated heat will take longer to be evacuated compared to the surface regions. It must be noted that accurate estimation of the latent heat of transformation has been a challenge for scientists and sometimes important differences between the predicted and measured values are reported as in the works of (Boniardi et al., 2014) and (Klein & Rossin, 1999).

In the present work, the latent heat value obtained from the database of the JMatPro® software appears to be overestimated. An Attempt was made to use the assumption considered by Piekarska (W. Piekarska, 2015; Wiesława Piekarska & Kubiak, 2012) to improve latent heat prediction; however, the overestimation for TC₂ was still visible, as indicated in Figure 4-7. A comprehensive experimental study is needed to accurately estimate the latent heat of phase transformation during cooling and will further increase the quality of the predictions; however, such study was not in the scope of the present investigation.

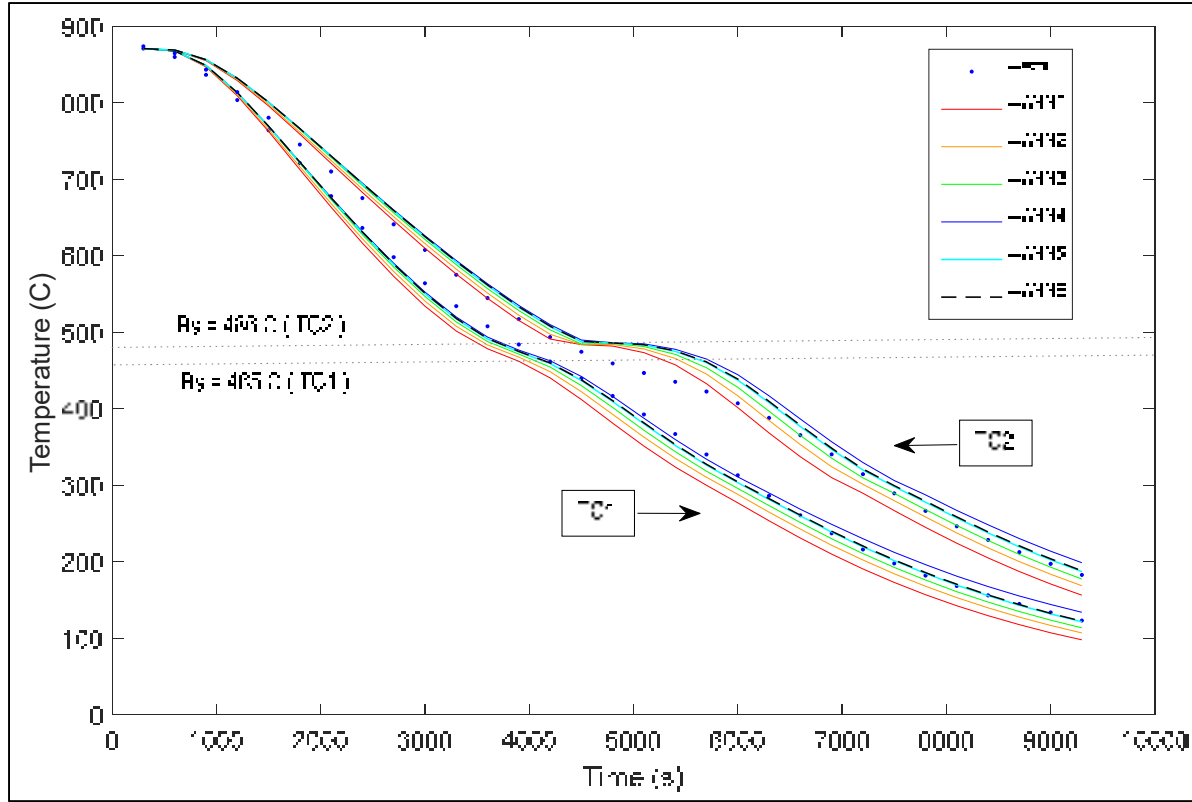


Figure 4-7. FEM of cooling curves using predicted HTCs.

4.6.3 Prediction accuracy and error analysis

The analysis of the prediction effectiveness based on the predicted HTCs in Table 4 indicates that both the *MAPE* and the maximum error were improved after each ANN simulation (i.e. after each prediction). T^{ANN6} presents the best performance for all predictions, with a *MAPE* value of 1.47% and a maximum error of 3.78%. Accordingly, it can be said that HTC^{ANN5} and HTC^{ANN6} perform almost equally. However, it can be seen that the *MAPE* improved by only 0.08% from T^{ANN5} to T^{ANN6} , indicating that the maximum effectiveness of prediction was already reached by HTC^{ANN5} . Moreover, as shown in Table 4, because after HTC^{ANN5} it is difficult to further reduce the error (*MAPE* reducing from 1.55% to 1.47%); therefore HTC^{ANN6} could be considered as redundant. This over-fitting explains why the subsequent training predicts the same common shape, with only minor differences.

The character of the predicted datasets via ANN are supposed to cover the “unknown” real HTC curve of the studied quench process, with less dispersion ($MAPE < 10\%$). Feeding the ANN with that kind of data increases the quality of the datasets and helps to make the network training process easier (Klein & Rossin, 1999).

It must be noted that the accuracy of the predictions is also intimately dependent on the quality of the experimental inputs (T^{exp}). Generally, during quenching of large steel components, factors related to the material inhomogeneity and/or the instrumentation process itself, may affect the uncertainty of the experimental measurements. For example; a local change in chemical composition, due to the occurrence of macro-segregation, may affect the metallurgical field (Hunkel & Nadolski, 2016) and therefore result in slight deviations in the thermal field. Considering the large size of the component, obtaining the precise location of the thermocouples in deep drilled holes or an estimation of the disturbance of the thermal field introduced by drilled cavities (D. I. Li & Wells, 2005) are challenges that cannot be easily overcome from a technical point of view. Such uncertainties may also play a role in the differences observed between the experimental measurements and simulation results.

Table 4-4. Analysis of FEM effectiveness using the predicted $HTC^{ANN 1-6}$.

	e^{ANN1}	e^{ANN2}	e^{ANN3}	e^{ANN4}	e^{ANN5}	e^{ANN6}
Max (e_i)	20.57%	13.13%	7.74%	8.69%	4.12%	3.78%
MAPE	8.53%	5.56%	3.36%	2.97%	1.55%	1.47%

4.7 Conclusions

The following conclusion can be drawn from the present study:

1) A new approach using a combination of a progressive ANN and FEM was used to improve HTC prediction in the water quench process of large size forged steel blocks. Experimental measurements, by instrumentation of the large size blocks, were carried out to provide data for the ANN, as well as to validate FEM results.

- 2) The shape of the $HTC^{ANN\ 4\ to\ 6}$ predicted by ANN (including HTC's with less than 3.0% *MAPE*) shows the establishment of a recurrent pattern that is similar in the water quench field, and it could be described by the wetting kinetics process during water quenching.
- 3) The minimum average deviation between the experimental and FEM-calculated temperature was 1.47%, indicating that the optimal HTC was predicted. It is believed that the progressive ANN increased step by step the quality of data preparation for the coming trainings, which improves significantly the accuracy of prediction in this study.

ACKNOWLEDGMENTS

This project was carried out in collaboration with Finkl steel-Sorel through a MITACS IT03151 Grant whose support is acknowledged. The authors are also very grateful to Finkl Steel, especially the R&D and Engineering Departments, for providing the large size block, as well as the instrumentation and measurements used in the present research.

CHAPITRE 5

ARTICLE 2 : MICROSTRUCTURE BASED FEM MODELING OF PHASE TRANSFORMATION DURING QUENCHING OF LARGE SIZE STEEL FORGINGS

Y. Bouissa^{1*}, M. Zorgani¹, D. Shahriari¹, H. Champlaud¹, J-B. Morin², M. Jahazi^{1*}

¹ Department of Mechanical Engineering, École de technologie supérieure, 1100 Notre-Dame Street West, Montreal, QC, Canada H3C 1K3

² Finkl Steel Inc., 100 McCarthy, Saint-Joseph-de-Sorel, QC, Canada, J3R 3M8

Cet article a été soumis pour publication au journal « Metallurgical And Materials Transactions A » en Mars 2020.

L'objectif principal de cet article est de proposer un modèle métallurgique amélioré capable de représenter la nuance de l'acier considéré, pour les différentes conditions de refroidissement qui approchent la trempe d'une brame forgée de taille industrielle à une multitude d'endroits. Une optimisation du diagramme TTT a été décrite dans cet article pour servir cet objectif. Cependant, la prise de conscience de l'influence de la température sur le modèle métallurgique a incité à la validation expérimentale du modèle thermique à plusieurs endroits de la brame, par l'amélioration systématique des propriétés thermophysiques (confirmation expérimentale) pour isoler au maximum l'analyse des réponses métallurgiques. Finalement, la validation du modèle métallurgique a été réalisée à différentes zones par l'adoption de différentes procédures expérimentales qui ont été détaillées dans l'article.

L'article a permis finalement d'étudier et d'améliorer la prédiction de la transformation de phase dans le cas d'une brame forgée surtout pour des épaisseurs profondes (inversion de la décomposition de phase), et de réaliser que cette transformation se réalise d'une façon difficile à anticiper.

ABSTRACT

The current investigation encompasses the development of a microstructure-based 3D finite element model (FEM) of water quenching process of large size high strength steel forgings with accurate predictions of the volume fraction of phases. The approach is based on modified TTT/CCT curves that consider two martensite start temperature values as a function of cooling rate. An experimental procedure consisting in the validation of the FEM simulations was conducted using high-resolution dilatometry, optical and scanning electron microscopy, and instrumentation of a large size steel block with several thermocouples at different locations. Results showed a very good agreement between the temperature predictions of the 3D FEM model and those obtained from direct measurement of instrumented forged block with an average error of about 1% in the quarter region. The volume fraction of phases and hardness distribution across the block were also predicted by the proposed 3D FEM model. The numerical results revealed bainitic volume fractions of about 74% at the center of the block and about 91% in the quarter region. These predictions were also confirmed by dilatometry test and metallographic examination of the microstructure. Micro hardness measurements through the thickness of the forged block were compared with those predicted by the FEM and very good agreements were obtained, further confirming the validity of the simulations. The proposed procedure in this research improves the quality of predictions by increasing the reliability of material parameters such as TTT optimization and accurate determination of thermo-physical parameters.

Keywords: Prediction of microstructure, FEM, quench modelling, large forgings, high strength steels.

5.1 Introduction

Pre-hardened large size forgings are generally used as plastic injection dies (molds) for the production of bumpers and other large size components in transportation industries (cars, trucks, trains, etc.) (Firrao et al., 2007). The production cycle starts by steel making in electric

arc furnaces followed by bottom pour casting of ingots that could weigh between 40 to 50 metric tons. The ingot is then deformed in different forging steps (upsetting, cogging, etc.) in order to break down the cast microstructure, refine the grain size, increase microstructure homogeneity and obtain the desired shape (Chadha et al., 2016). A Quench and Temper (Q&T) heat treatment process is used after forging to achieve the targeted mechanical properties. Intensive quench in water produces the martensite phase in surface and at a certain depth and providing elevated hardness and residual compressive stresses at the surface, which reduce the probability of non-conformities and increase the fatigue life cycle (Aronov, Kobasko, & Powell, 2005). Among the above manufacturing steps, the (Q&T) heat treatment process is the highest in importance as it determines the final microstructure and hence the mechanical properties. Moreover, the heat treatment process is very costly due to the long holding times, sometimes up to 100 hours, at high temperatures during austenitization (840°C - 880°C) before quenching and tempering (550°C - 600°C). Hence, an optimized heat treatment process should provide uniform microstructure for a minimum holding time.

In recent years, the demand for manufacturing of ever larger size molds has been continuously increasing, and achieving uniformity of mechanical properties and microstructure through the thickness of massive components has become a major technical challenge while achieving such objectives for small size components is well controlled and practiced by industry. (Araki et al., 2013). For instance, despite the fact that the new generation of mold steels are characterized with very good hardenability; however, increased cross-section of the forgings affects the cooling rate at the center, regardless of the quench medium (Beaudet et al., 2012; N. I. Kobasko et al., 2007; Narazaki et al., 2002). Therefore, controlling the microstructure after quenching through the entire volume is problematic. Further complexity is added when considering that the quench phenomenon is a highly non-linear problem, where thermal, mechanical, and metallurgical fields are coupled in such a way that may influence the evolution of the microstructure and mechanical properties (Maradit, 2010).

In addition, considering the large size of the forgings, it is clear that the traditional trial and error approach could not be used, and advanced predictive tools are needed for rapid evaluation of the influence of Q & T conditions on microstructure and mechanical properties. FEM

modelling of the quench process could be employed as an excellent tool that enables predicting temperature and microstructure evolution, especially when the calculation of phase transformation is integrated (Jung et al., 2012; Caner Şimşir & C Hakan Gür, 2010). However, as any modelling approach, it is critically important that the input data is accurate and validated to ensure the reliability of the predictions (Zhanli Guo, Saunders, Miodownik, & Schillé, 2013).

One of the most important input data in quench modelling is the precision of the TTT (Time-Temperature-Transformation) (K. Babu & Kumar, 2014) and CCT (Continuous-Cooling-Transformation) diagrams that must reflect the most accurate possible behavior (i.e. phase transformations) of the actual material (Zhanli Guo, Saunders, Miodownik, & Schille, 2009). The quench process is inherently non-isothermal, and therefore the non-isothermal phase transformation kinetics are usually extracted from the isothermal ones (TTT) using the Scheil's additivity rule (Braz Fernandes et al., 1985). Inverse methodologies have also been proposed. They consist in extracting kinetic parameters from an experimental CCT to model isothermal kinetics and ultimately predicts phase transformation using a TTT diagram that is consistent with the experimental CCT diagram (Geijselaers, 2003). Besides, the common method used to model TTT diagram is based on thermodynamic approach in which the steel chemical composition and the grain size are introduced in Kirkaldy's equations (Buchmayr & Kirkaldy, 1990). However, as reported by Li et al , this approach has some limitations for medium and high-alloyed steels in terms of hardenability underestimation mainly due to the reaction kinetics model used for austenite decomposition in the original Kirkaldy model (M. V. Li, D. V. Niebuhr, L. L. Meekisho, & D. G. Atteridge, 1998b). To overcome these limitations, and extend the range of steel chemical composition, a modified Kirkaldy's model combined with empirical equations has been proposed to model TTT curves and implemented in JMatPro[®] software (Zhanli Guo, Nigel Saunders, Peter Miodownik, & Jean-Philippe Schillé, 2009; N. Saunders, 2004). In another development, Peterli et al. proposed an optimization approach for the TTT curves based on initial generation of TTT diagrams using a module in Forge[®] Nxt.1.1 software that improved the hardness prediction (Peterli, Truong, Manopulo, & Hora, 2016).

Another important aspect in quench modelling is the accurate determination of the martensite start temperature, M_s , in the TTT diagram. M_s is often, modelled as constant during quench (Bhadeshia, 2001). However, in reality, it is not constant as reported in many experimental studies. Specifically, a decrease of M_s has been observed under low cooling rates in low alloy steels especially when martensitic transformation follows the bainitic one, which is the case for medium carbon steels used for mold applications (ASM-International-Handbook-Committee, 1991; Davis, 1998). Such consideration, as reported by Jung et al., could increase the accuracy of the FEM prediction of the volume fraction of phases after the quench (Jung et al., 2012).

To increase the reliability of the FEM model at industrial level, experimental validations are needed at the same scale, or very close to it, due to the fact that the quench phenomenon cannot be easily scalable (Şimşir, 2008a). For instance, the validation of temperature evolution needs a full instrumentation with thermocouples at different locations inside the component, which brings technical challenges because of the large size of the block. That is probably the reason for limited availability of data in the literature on instrumentation of large steel components during the quenching process (Boniardi et al., 2014; Bouissa, Shahriari, Champlaud, & Jahazi, 2019). Furthermore, for metallurgical validation purposes, the microstructure must be examined after heat treatment. This requires a partial or full destructive approach to extract samples through the thickness of the block and examination of a large number of samples, which is costly and very time consuming.

The current investigation has been defined in this context and encompasses the development of a microstructure-based 3D FEM model of quenching process at large scale. The validation of FEM simulations is conducted using different experimental techniques (high resolution dilatometry tests, optical and electron microscopy) and temperature measurements at the industrial level. The proposed procedure in this research improves the quality of predictions by increasing the reliability of material parameters such as TTT optimization (by considering two M_s values), and determination of accurate thermo-physical parameters.

5.2 Mathematical framework for quench modeling

A comprehensive modelling of steel quenching ideally requires consideration of the couplings between metallurgical, thermal, and mechanical fields. It must be noted that in the present work, the focus was on the existing coupling between the thermal and metallurgical fields to predict the volume fraction of phases and hardness through the block. The influence of the mechanical field on temperature and phase transformation was not considered in the proposed FEM model. The heat treatment module of the Forge[®] NxT 1.1 FEM software (FORGE[®]NxT) was used, as will be described in more details in the following sections.

5.2.1 Temperature evolution model

The heat equation was used to model the heat transfer during quench

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}(\lambda \nabla T) + \dot{q} \quad (5-1)$$

ρ , C_p , λ and $\dot{q}$ represent density, specific heat, thermal conduction, and the thermal source, respectively.

$$\dot{q} = \Delta H_k \cdot \frac{df_k}{dt} \quad (5-2)$$

Where ΔH_k and f_k represent the latent heat and the volume fraction of phase k, respectively. At the surface of the block, the boundary conditions of the heat transfer could be written as follows:

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial n} = h(T_s - T_f) \quad (5-3)$$

Heat transfer coefficient (HTC) is one of the most critical parameters in any heat treatment process, particularly during quenching, as it affects the evolution of the thermal field during quench, due to its variation with the surface temperature. Figure 5-1 illustrates the evolution of the HTC with temperature used in the present work for water quench. This pattern was derived based on the works reported in reference (Bouissa et al., 2019) which have experimental conditions close to those used in the present work. On the other hand, the

subsequent air cooling that interrupts water quench (Figure 5-2) was extracted from reference (Dung-An Wang, 2013).

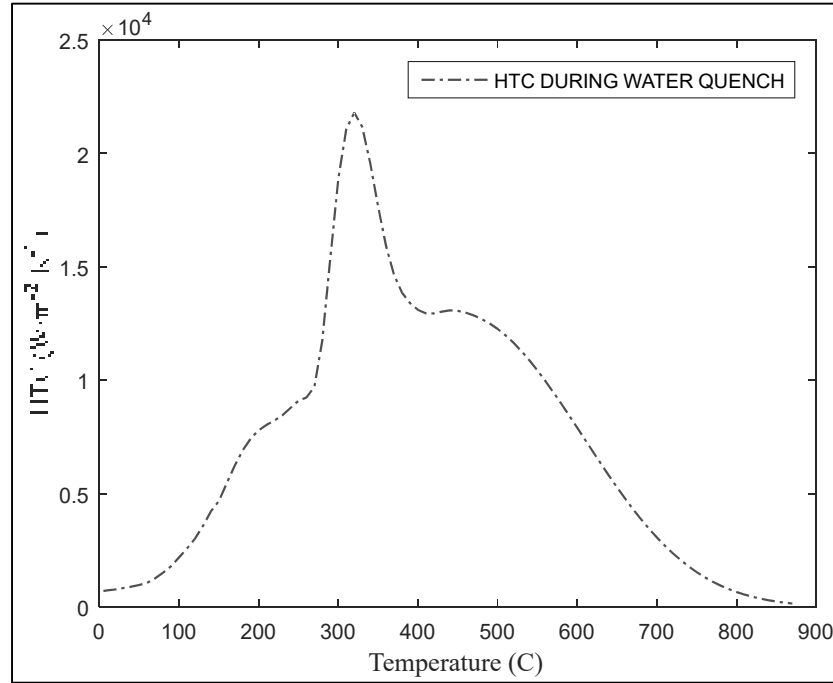


Figure 5-1. HTC during water quench (Bouissa et al., 2019)

5.2.2 Multi-Phase transformational model

Both non-diffusive and diffusional phase transformation processes were considered for modelling the evolution of phase volume fractions during the entire quench process. Specifically, martensitic phase transformation was modelled based on the Koistinen and Marburger (K-M) equation:

$$f_M = 1 - e^{-\Omega(M_s - T)} \quad (5-4)$$

Where Ω , represents the coefficient of the K-M equation.

In the present study the coefficient Ω was considered equal to 0.026 based on the experimental results of one of the present authors on a similar steel grade (Emna Ben Fredj, Nanesa, Shahriari, Morin, & Jahazi, 2017). For the diffusion controlled phase transformations, under

isothermal conditions, the kinetics of phase transformation could be modelled with Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov (JMAK) equation, as follows (Braz Fernandes et al., 1985):

$$f = 1 - e^{-kt^n} \quad (5-5)$$

where k and n are the parameters related to the nucleation rate and grain growth conditions (Wei, 2008).

In order to transpose the calculation of the kinetics of phase transformation made for isothermal state to anisothermal one, the Scheil's principle was used to calculate the contribution of each elementary portion of the incubation time by decomposing the anisothermal process into a finite subdivision of isothermal states. The Scheil's sum, S , was used to determine the complete incubation time of a non-isothermal cooling process using the isothermal diagram when S reaches the unity (Braz Fernandes et al., 1985).

$$S = \sum \frac{\Delta t_i}{\tau_{i(TTT)}(T_i)} = 1 \quad (5-6)$$

Under these conditions, the volume fraction of the non-isothermal cooling at time step t_i , could be expressed as :

$$f_{i+1} = f_{max}(f_i^Y + f_i)(1 - e^{-k(\tau_{i+1} + \Delta t_i)^{n(T_i)}}) \quad (5-7)$$

where f_{max} , f_i , f_i^Y and $\tau_{i(TTT)}$ represent the maximum volume fraction at the actual time step Δt_i , the transformed fraction of austenite and at the previous time step, the actual transformed volume phase fraction at the previous time and the time needed to reach f_i , isothermally (incubation time at T_i) respectively.

The parameters n and k of JMAK equation could be calculated at temperature T_i using equations (5-8) and (5-9) :

$$n(T_i) = \ln \left(\frac{\ln \left(\frac{1 - \frac{0.1}{f_{max}(T_i)}}{\ln \left(1 - \frac{0.9}{f_{max}(T_i)} \right)} \right)}{\ln \left(\frac{t_{0.1}(T) - t_{start}(T_i)}{t_{0.9}(T) - t_{start}(T_i)} \right)} \right) \quad (5-8)$$

$$k(T) = - \frac{\ln\left(1 - \frac{0.1}{f^{max}(T_i)}\right)}{(t_{0.1}(T_i) - t_{start}(T_i))^{n(T_i)}} \quad (5-9)$$

5.2.3 Hardness Model

A large number of empirical relations are available in the literature for predicting hardness evolution of each phase. In the present work, the equations proposed by Maynier (Kakhki, Kermanpur, & Golozar, 2009; Trzaska, 2013) were used to calculate the hardness of each phase as the chemical elements included in the equation are also present in the investigated steel.

$$HV_M = 127 + 949C + 27Si + 8Ni + 16Cr + 21\log V_r \quad (5-10)$$

$$HV_B = -323 + 185C + 330Si + 135Mn + 65Ni + 144Cr + 191Mo + (89 + 53C - 55Si - 22Mn - 10Ni - 20Cr - 33Mo)\log V_r \quad (5-11)$$

$$HV_{F,P} = 42 + 223C + 53Si + 30Mn + 12.6Ni + (10 - 19Si + 8Cr + 4Ni + 130V)\log V_r \quad (5-12)$$

In the above equation, V_r represents the cooling rate in ($^{\circ}\text{C}/\text{h}$) at 700°C and HV_M , HV_B and $HV_{F,P}$, represent the hardness of martensite, bainite and ferrite/pearlite, respectively.

Considering a linear additive rule, the total hardness could be obtained by adding the product of volume fraction of each phase by its corresponding hardness value, as presented in equation (5-13) :

$$HV_{TOT} = (f_F + f_P)HV_{F,P} + f_B HV_B + f_M HV_M \quad (5-13)$$

5.3 Methodology

5.3.1 Experimental set up

An industrial steel block, 645 mm × 868 mm × 1037 mm, was instrumented by four thermocouples (TCs) in different positions inside the block (Figure 5-3) to record temperature evolution during the quench process. The thermal cycle started with austenitization at 871 °C, and holding for about 48 hours followed by quenching in a water tank at 6 °C for approximately 150 min and then air cooled at 20 °C during 90 min. The thermal cycle was ended by tempering at 565 °C for about 48 hours. Figure 5-2, displays schematically the different steps used for the heat treatment process of the block.

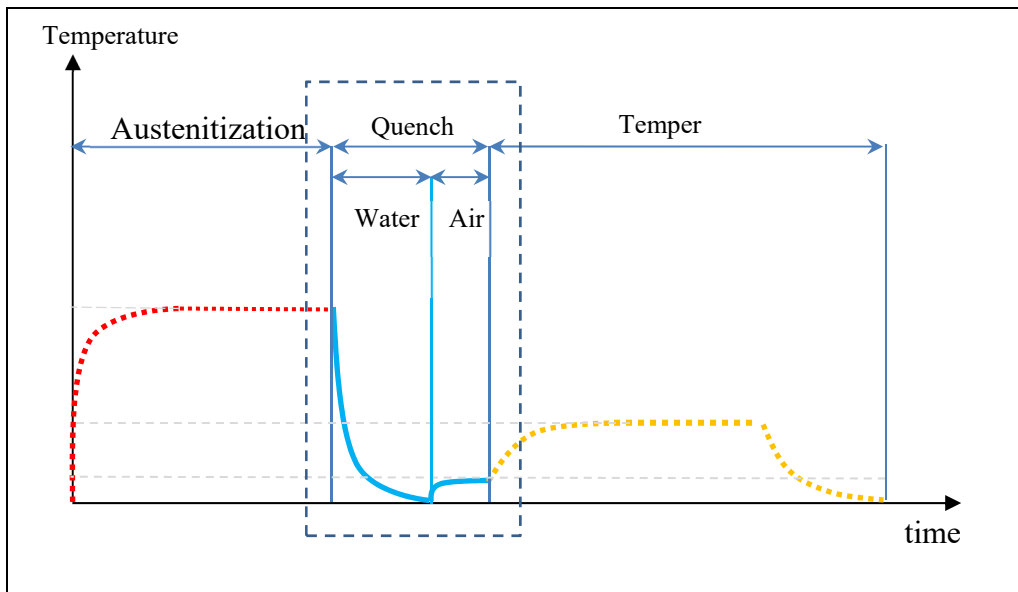


Figure 5-2. Thermal Cycle applied to the instrumented block.

5.3.2 Setup of the FEM Model

The quenching module is an incorporated feature in Forge® NxT 1.1 FEM software that is able to support the phase transformation calculation during the FEM modelling of the quench process based on Sheil's additivity rule. Figure 5-3 presents the dimensions of the block and the mesh model used for FEM simulation, as well as the precise positions of the thermocouples.

The position of the numerical sensors corresponds to the locations of TC positions. They were set up in a one eighth symmetrical model in order to track and compare the temperature recorded by the TCs. The block was meshed using 522 496 tetrahedral P1+/P1 mesh element (Cardinaux, 2008).

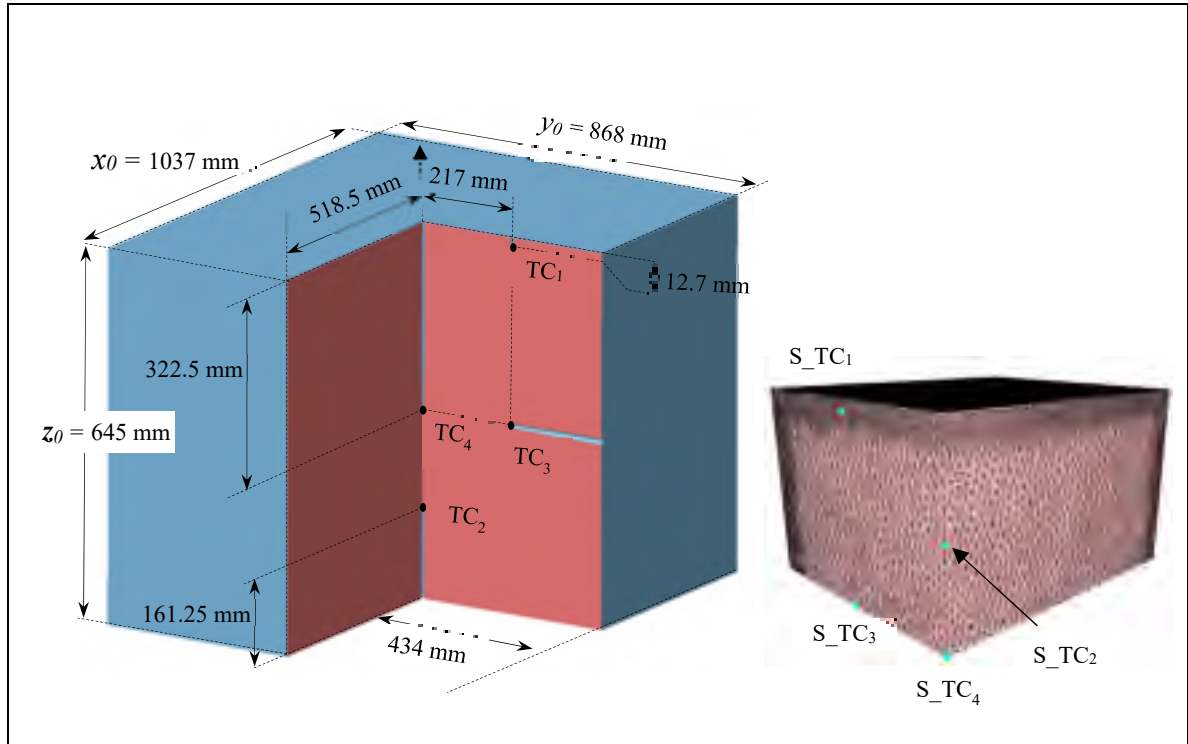


Figure 5-3. The block dimensions, including FEM Model geometry and TC positioning.

5.3.3 Material data input

5.3.3.1 Thermo-physical properties

As mentioned, whenever possible the thermo-physical properties of the investigated steel were determined experimentally. In the absence of the experimental data, JMatPro® software (Java-based Material Properties) (Z. Guo et al., 2009; Mustak et al., 2016; Saunders et al., 2003) was used to obtain the thermo-physical properties for each phase using the chemical composition of the investigated steel : 0.34 C , 0.85 Mn , 0.39 Si , 0.48 Ni , 1.92 Cr , 0.53 Mo (Wt. %).

A comparison between the experimentally measured thermal conductivity values and specific heat, using the laser flash technique at elevated temperature on a bainitic specimen, and JMatPro® based calculated values is shown in Figure 5-4(a, c) where a good agreement can be seen. It should be mentioned that, the austenite phase is present starting from 830 °C, and then the calculation of the thermo-physical parameters must consequently consider the change in density due to the volume change. The other properties that were acquired from literature are: the thermal conductivity of austenite (Cochet et al., 2017) and the latent heat generation due to bainitic (Kulawik & Bokota, 2011) and martensitic (Mustak et al., 2016) transformations.

Considering the difficulty related to experimental determination of the physical properties for all present phases, the good agreement between the experimental properties and the calculated ones (bainite), could be considered as a good justification for using the properties calculated by JMatPro® when the needed data are unavailable. On this basis, the input data presented in Figure 5-4 (in solid lines) were then implemented into the FEM software for the modelling purposes.

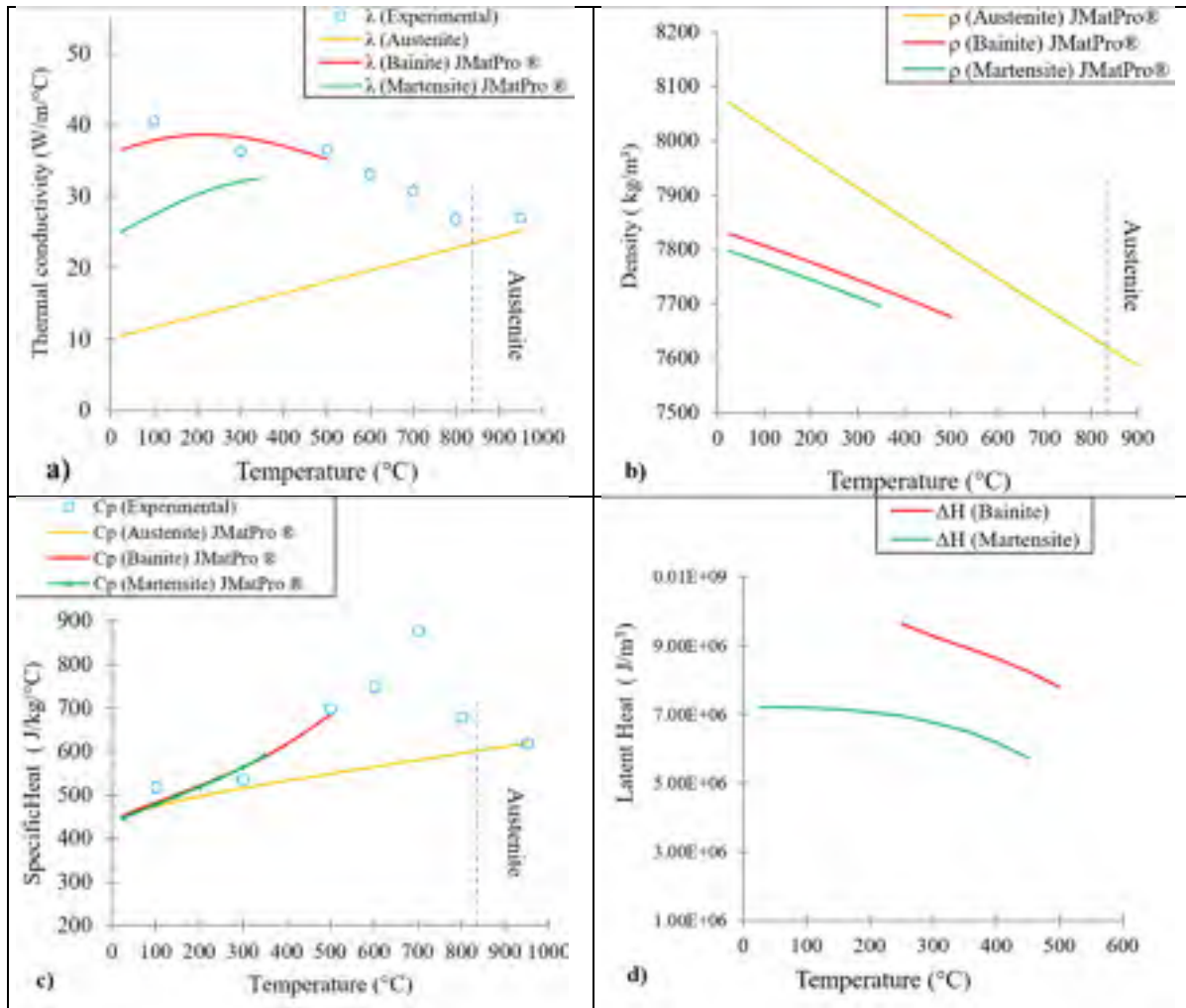


Figure 5-4. Thermo-physical properties per single phase used for FEM modelling:
a) Thermal conductivity, **b)** Density, **c)** Specific heat, **d)** Latent Heat.

5.3.3.2 TTT - CCT optimization

The TTT diagram was initially calculated by JMatPro® using the above mentioned chemical composition. However, the diagram needs to match the experimentally determined specific temperatures for phase transformation and steel hardenability determined in the CCT diagram. As shown in Figure 5-5, an optimization approach was conducted to determine the TTT diagram corresponding to a CCT diagram which is characterized by a specified constant critical cooling rate, C_R , that is believed to be consistent with the observed steel hardenability.

The TTT diagram was generated with an arbitrary incubation time, t_{bs} (Figure 5-6.a), then shifted vertically (temperature axis) to be consistent with the new calculated bainite start temperature, B_s , as well as with the martensite temperature start, M_s , using Kirkaldy and Haynes equations, respectively (Cardinaux, 2008).

$$B_s = 656 - 57.7C - 35Mn - 75Si - 15.3Ni - 34Cr - 41.2Mo \quad (5-14)$$

$$M_s = 561 - 747C - 33Mn - 17Cr - 17Ni - 21Mo + 10Co - 7.5Si \quad (5-15)$$

An in-house Matlab® code was developed in order to calculate the evolution of the Scheil's sum, S , for a given critical cooling rate, C_R , using the bainite start curve, $B_{S(TTT)}$ of the TTT curve. After each iteration, the incubation time, $t_{bs} = t_{bs} + t_x$ was updated by incrementing t_x in order to calibrate the new TTT diagram generated by JMatPro®. Finally, the TTT diagram for a determined incubation time, t_{bs} was considered optimized when $S = 1$ and $T = M_s$. The $B_{S(CCT)}$ curve (from A to B in Figure 5-6.b) corresponding to the optimized ($B_{S(TTT)}$) was reconstructed, by substituting C_R with different constant cooling rates (from 0.03 to 1.33 °C/s) for each calculation when Scheil's sum reached the unity ($S=1$). It must be noted that the M_s temperature is generally considered constant for TTT/CCT diagram (Bhadeshia, 2001). However, as observed in the works of many authors who used a similar steel grade (Beaudet, 2009; Chentouf et al., 2014), M_s decrease can also be clearly noticeable starting from a certain cooling rate. In the present work, in order to further increase the accuracy of the determination of the transformation temperatures, the second M_s temperature identified as M_s' , was used in the simulations.

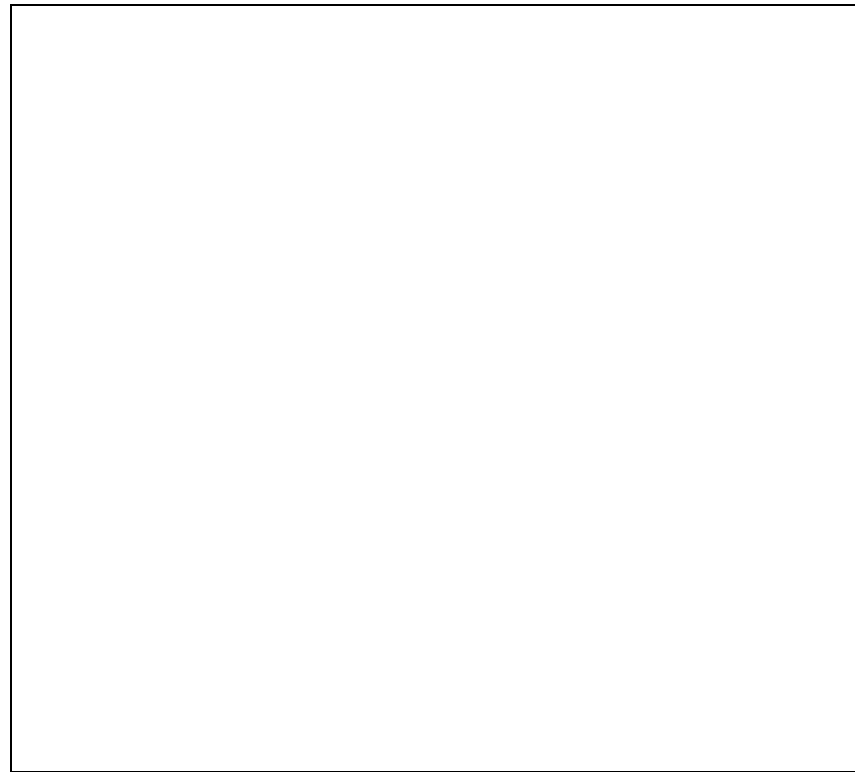
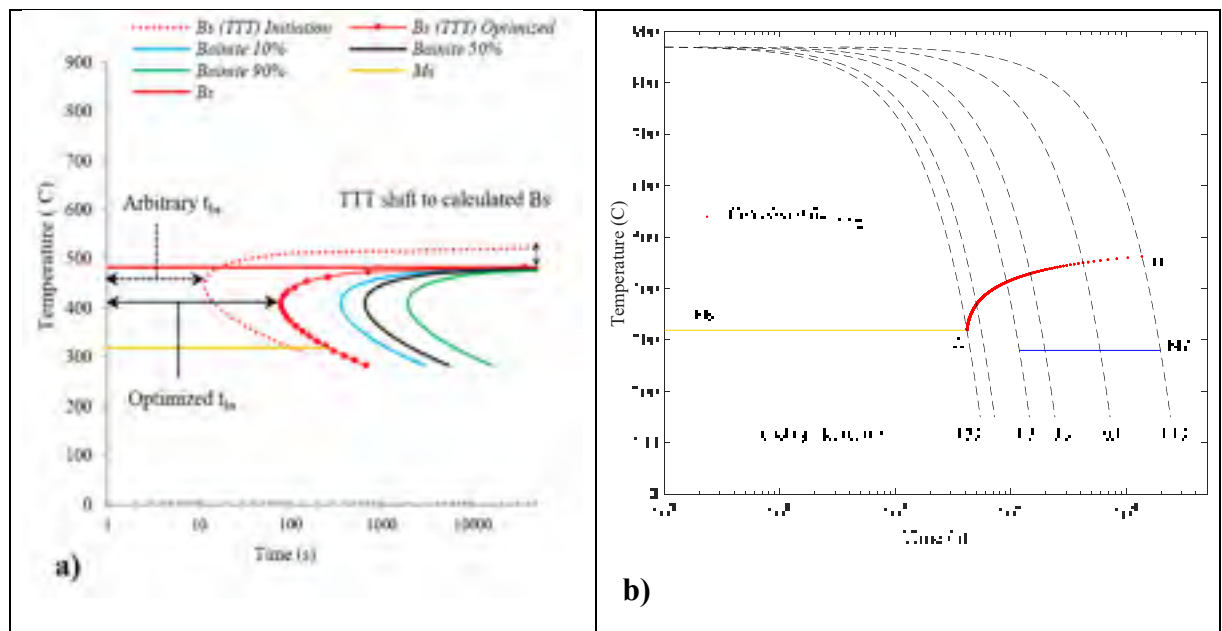


Figure 5-5. Flow chart of TTT optimization.

Figure 5-6. **a)** : Optimized TTT generated initially using JMatPro® ,
b) : Calculated and Optimized CCT.

5.4 Experiments

5.4.1 Thermocouples Instrumentation Techniques

The necessity to place thermocouples at several depths of the block down to the center of the block (as described in Figure 5-3), requires using special tools for drilling profound holes with small diameter. This was done with the aim to reduce as much as possible the thermal loss introduced by the holes cavities due to the lower thermal conductivity compared to the surrounding steel (D. I. Li & Wells, 2005). Sheathed *K-type* thermocouples with $\pm 0.75\%$ precision were placed in the bottom of each hole. The holes were then filled up with iron powder, to reduce the disturbance of the thermal field due to the drilling (Figure 5-7.a) and then sealed with cement to minimize and prevent water infiltration during quench, as illustrated in Figure 5-7.b).

A data logger was used for recording and monitoring the temperature evolution during the entire heat treatment cycle (i.e., austenitization, quench, and tempering).

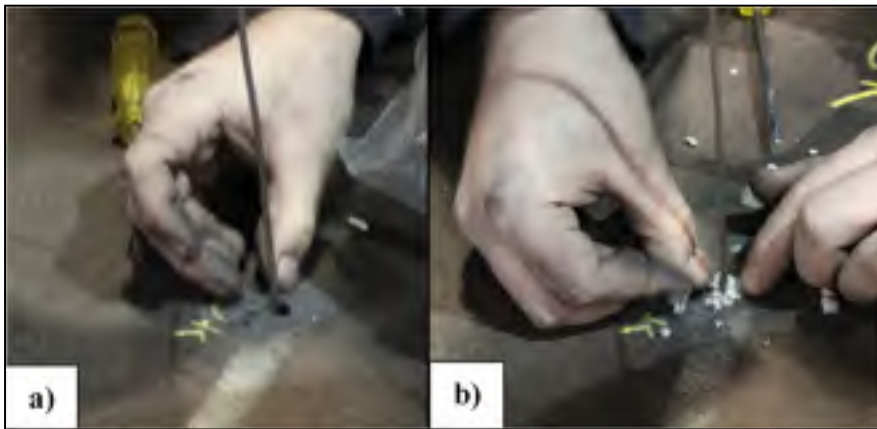


Figure 5-7. Instrumentation techniques: **a)** filling holes with iron powder **b)** sealing holes with cement.

5.4.2 Samples extracted from the instrumented block

After the completion of the heat treatment, a slice with a thickness of about 25 mm was cut from the middle of the block in order to extract samples from different positions, as shown in Figure 5-8 (center, quarters and surface). The extracted samples were prepared for SEM image analysis using standard metallography techniques.

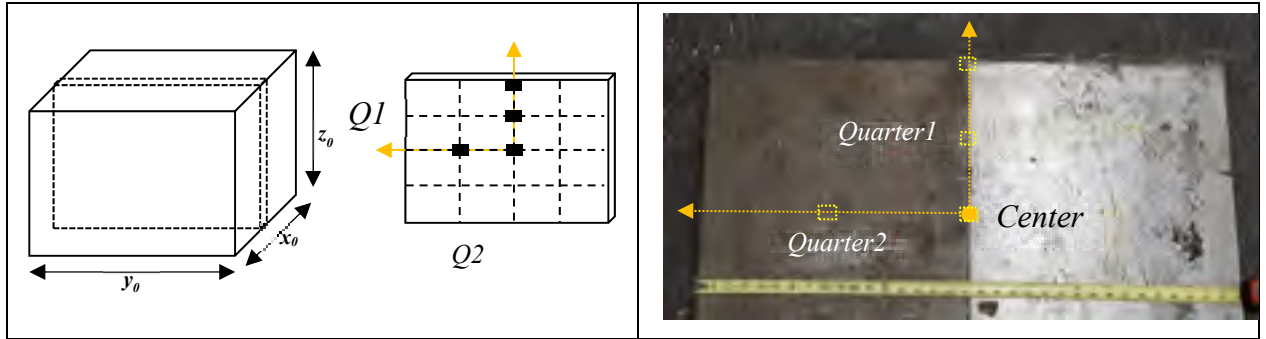


Figure 5-8. Slice cut from the block indicating the position of sample extraction.

5.4.3 Dilatometry experiments

Dilatometry tests were designed using the high-resolution DIL805A/D dilatometer to physically simulate the experimental thermal cycle experienced by each thermocouple position inside the block during the quench process (thermocouple positions in Figure 5-3) using cylindrical specimens $\Phi 4 \times 10 \text{ mm}$. After the quench cycle, the samples were cut along longitudinal direction of the block. After polishing, Vilella's reagent (1 g picric acid, 4 mL HCl, 100 mL ethanol) was used for etching the surface and revealing the microstructure which was examined using a scanning electron microscope (Hitachi-TM3000). The micro-hardness tests were performed, on dilatometry samples according to Vickers method with a load of 1kgf. In order to further increase the accuracy of the calculated hardness values, the diagonals of the indentation were measured by the confocal laser microscope (Olympus LEXT) and an average hardness value for each sample was calculated based on a minimum of 10 indentations.

The experimental volume fraction of the transformed phase, f_k^{exp} was calculated from the dilatometry curves by considering the phase volume fraction calculated conventionally by the lever rule method, f_L and the maximum phase volume fraction that could be transformed, f_{max} (Caballero, Santofimia, Garcia-Mateo, & García de Andrés, 2004; Quidort & Brechet, 2002) in equation (5-16).

$$f_k^{exp} = f_{max} \cdot f_L = f_{max} \cdot \frac{L(T) - L_\gamma(T)}{L_\gamma(T) - L_k(T)} \quad (5-16)$$

where (T) , $L_\gamma(T)$ and $L_k(T)$ represents the sample length, the calculated length assuming a complete austenitic structure and the calculated length assuming a complete transformation to the phase, k (bainite or martensite), respectively.

5.5 Results and discussion

5.5.1 Thermal results

Figure 5-9 depicts the evolution of both measured and predicted temperatures at thermocouples and its corresponding sensors positions inside the block during the quench. A good agreement can be seen between the experimental measurements and numerically predicted temperatures. The thermal model shows its best performance for TC₂ and TC₃ (S_TC₂ and S_TC₃ / Q₁ and Q₂) positions where the temperature predictions are able to precisely catch the slope changes of the experimental results. The agreement at this level indicates especially the capability of the optimized TTT curves to enhance the predictions of the phase transformation model (K. Babu & Kumar, 2014) (e.g., the characteristic temperature, B_s). The difference between measured and calculated temperatures at TC₁, near to the surface at the beginning of the quench, could be related to the assumption of homogeneous cooling rates (HTC) for the block. At the center of the block, TC₄ also fits well with the experimental data, where the small plateau appears, corresponding to the effect of the latent heat generation. Simulations also show good agreement for the air quench part. At the start of the air-cooling stage, the heat contained in the center region moves towards the surface through conduction heat transfer. This is due to the low severity of air cooling that is not able to maintain the same temperature difference between the center and the surface compared to water. As it can be seen, under these conditions, the surface temperature was raised to the auto-tempering range of martensite. Considering that for lower cooling rates the M_s temperature is lower (M_s'); the bainitic transformation could still continue at lower temperatures. As a result, when a constant M_s is assumed, the sequence of phase transformation is affected, and the predicted thermal fields are disturbed.

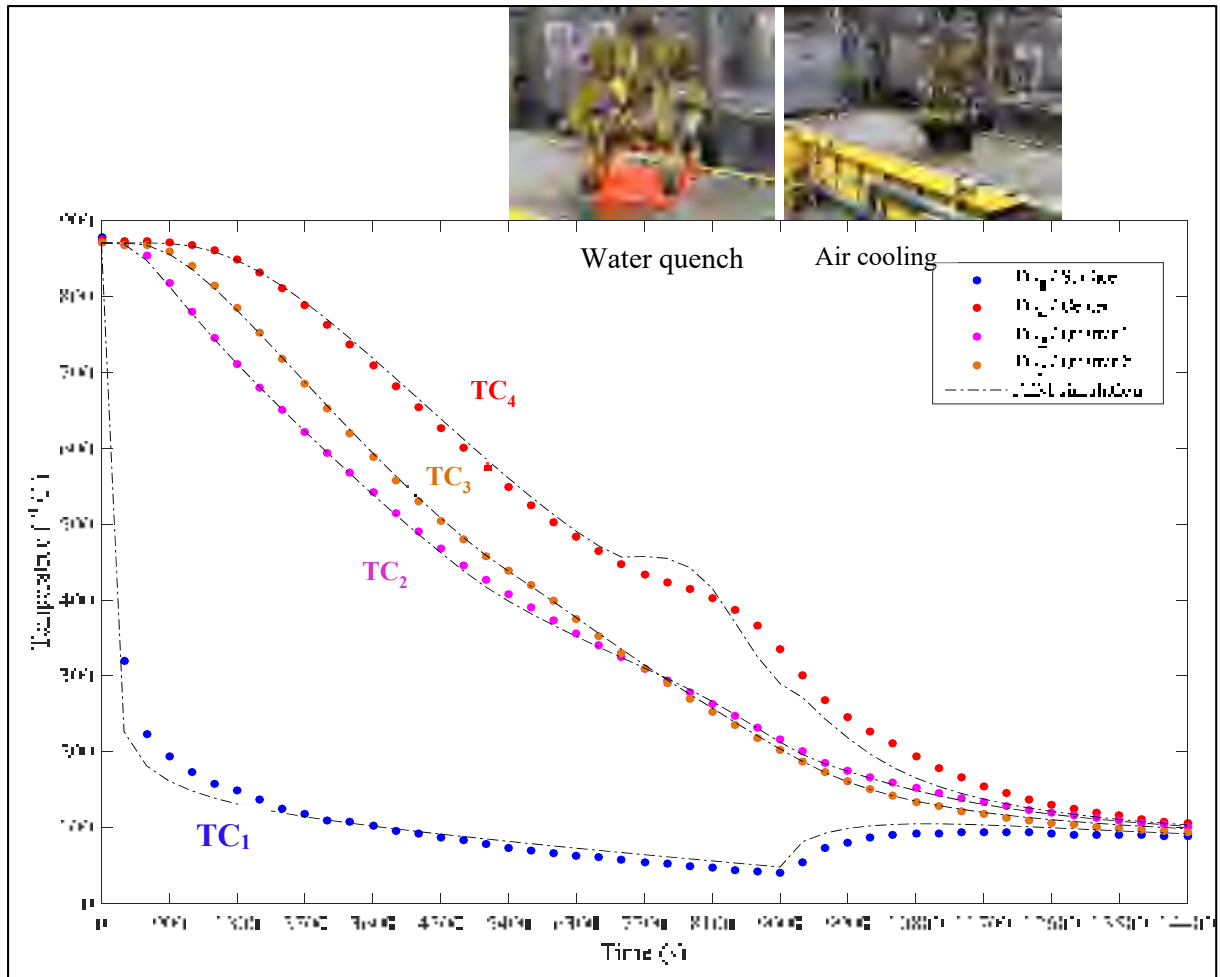


Figure 5-9. Temperature evolution during the quench process: experimental in dotted line and simulation in dashed line.

5.5.2 Evolution of volume fraction of phases

5.5.2.1 FEM results

Figure 5-10 depicts the state of phase transformation for the block after quenching. The maximum amount of transformed bainite was located in the quarter region of the block, as shown in Figure 5-10.a) while martensite was mainly located in the surface region (Figure 5-10.b). The analysis of phase decomposition profile is shown in Figure 5-10.c) along y and z directions starting from the block's center, where it can be seen that the maximum volume fraction of bainite (~ 91%) was located in the thickness direction (z), near to the quarter region

(at around (0, 0, 136 mm) coordinate). Analysis of the results in Figure 5-10.c) further shows that the bainite volume fraction in the y direction did not exceed (84%) ((0, 191mm, 0) coordinate) and its maximum value in the center region was about 74%. The above finding behavior is in agreement with those reported by Cao, et al. (P. Cao, Liu, & Wu, 2012) on the FEM modelling of heat treatment of large-scale hydraulic steel gate track; however the authors did not discuss the underlying mechanisms for the observed behaviors.

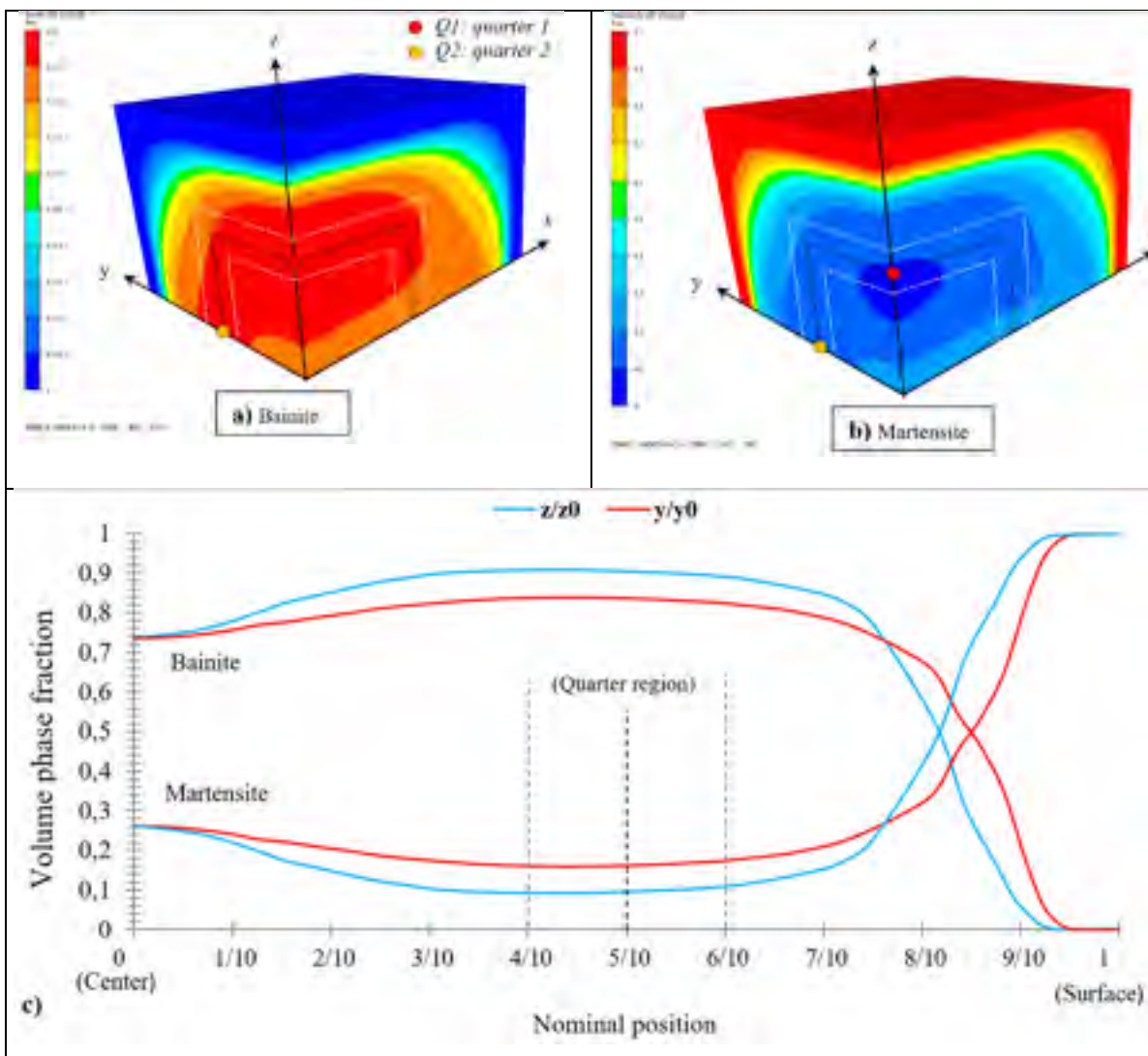


Figure 5-10. Distribution of bainite and martensite after quenching.

- a)** 3D distribution of bainite, **b)** 3D distribution of martensite,
c) Distribution of bainite and martensite along z and y axes.

Figure 5-11 shows that the evolution of the phase volume fraction at the S_TC1 sensor (Figure 5-11.a) leads only to martensitic transformation. For instance, the microstructure was fully martensitic at least for 13 mm below the surface which could be explained by the steel hardenability (after 10 min quenching 90% of martensite was formed). In contrast, at the center (Figure 5-11.d) / S_TC4), the bainitic transformation started around 6900s after the start of the cooling to reach its maximum (74%) near to 9000s. At this point, the remaining amount of austenite (26%) starts to transform to martensite for a total transformation process time for the bainite of about 36.5 min. For the two quarter locations (S_TC2 and S_TC3 /Figure 5-11 b) and c)) the time for bainite formation was longer (52 and 40 mins, respectively) and as a result, more bainitic transformation occurred in these regions.

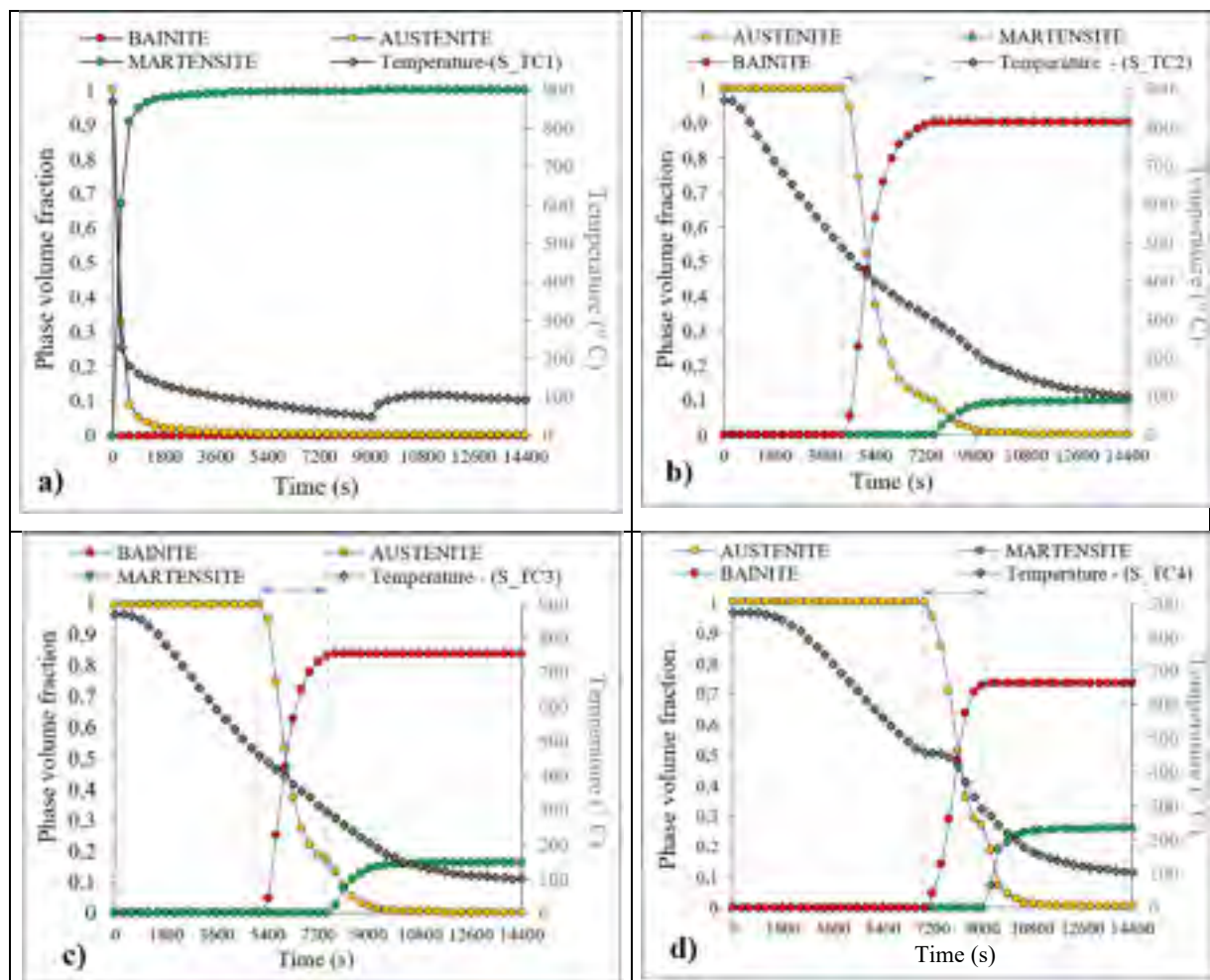


Figure 5-11. Evolution of phase transformation for the following positions: **a)** Surface **b)** Quarter 1 **c)** Quarter 2 and **d)** Center.

Numerical simulations were performed in Forge® NxT 1.1 software, using a user variable parameter designed to calculate the time interval between the B_s and the M_s' temperatures $\Delta t_{B_s-M_s'}$, as a reference to the duration of the incubation time in the bainitic region (B. Liščić & Totten, 2013). The results are reported in Figure 5-12 and show that the $\Delta t_{B_s-M_s'}$ reaches a maximal value of 3627s (60.5 min) around the quarter region, which is close to the value reported in Figure 5-11 for S-TC₂ (52min). Even by assuming a constant value of B_s (instead of $B_s(CTT)$), it is interesting to note that the calculated $\Delta t_{B_s-M_s'}$ shows a similar pattern to the distribution of bainitic volume fraction after quench, indicating a possible correlation between $\Delta t_{B_s-M_s'}$ and bainitic phase transformation.

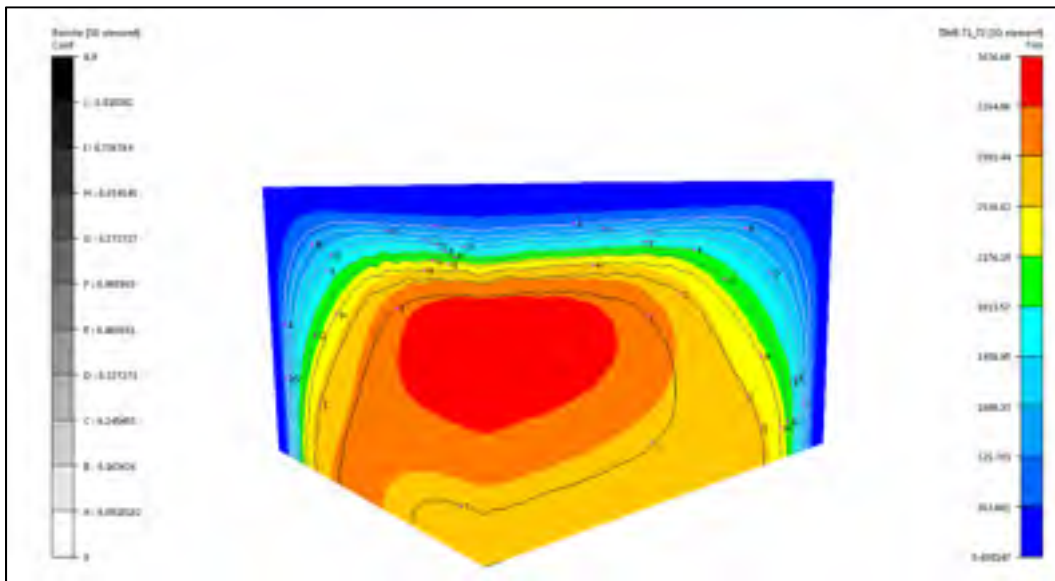


Figure 5-12. Calculation of the time duration between B_s and M_s' .

Figure 5-13 illustrates the evolution of cooling rate during the quench for different locations in the block. It can be seen that during the first 1050 seconds after the start of the quench process, the cooling rate is very fast (up to 0.125 °C/s) at the level of TC₂ (quarter 1) in comparison to the TC₃ (Quarter 2) and TC₄ (Center) regions. However, for the time interval between 4500 and 9000s, the cooling rate in the TC₂ region becomes in fact the lowest one, except for a sudden inversion near the 7200s for TC₄. The observed inversion in the cooling rate could be due to the changes in the heat transfer conditions as a function of the geometrical position inside the block (high extraction heat flux in the center than in the quarter), which

consequently influences the cooling rates pattern (B. Liščić & Totten, 2013). In addition, the occurrence of large amount of bainitic transformation in the quarter region releases significant amount of latent heat that could bring additional modifications to the thermal field by introducing additional thermal energy and resulting in a temperature recovery in this region (thermal arrest), as also reported by others (Arimoto, Jin, Tamura, Funatani, & Tajima, 2004). The heat transfer conditions of the quarter region make it the most propitious one for bainitic transformation that views the maximum range of incubation time with the minimum cooling rates.

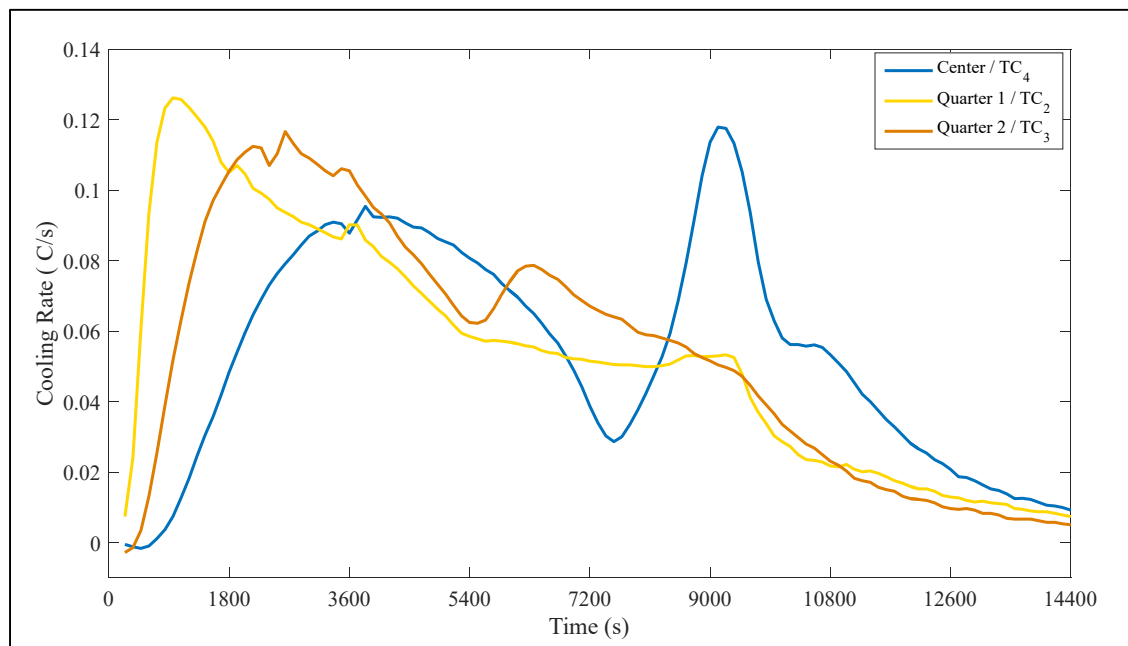


Figure 5-13 . Evolution of the experimental cooling rate with time.

5.5.2.2 Analysis of the dilatometry experiments

In order to reproduce the thermal cycles experienced by the block at the instrumented locations, i.e., TC₂, TC₃, TC₄, a series of dilatometry experiments were carried out using the cooling rates corresponding to the sample's position in the real block. The measured cooling patterns presented in Figure 5-9 were used for the dilatometry tests.

The dilatometry results are represented in Figure 5-14.a where it can be seen that no transformation took place during cooling from the austenitization temperature until bainite transformation started. Thus, the relative length change obtained in the dilatometry curves could be directly correlated to the amount of transformed bainite and that higher linear dilation values represent higher bainitic volume fraction, as also reported by other authors (Zhou, Xu, Wang, Xue, & Hu, 2015). In addition, the complete transformation strain, $\varepsilon^{tr}(T)$ was calculated separately for each test, by considering only the calculated thermal strain of fully bainite and austenite as a function of temperature (dotted lines in Figure 5-14.b). The results show that the maximum volume change was related to the Quarter 1 region.

By considering as reference the maximum relative length change of TC₂ during cooling, the maximum volume fraction of bainite, f_{max} that was achieved at the end of quench was determined to be equal to 0.9. This choice was also supported by hardness levels of a fully bainitic steel with a similar composition to ours by other researchers (Beaudet, 2009; Emna Ben Fredj, 2019). Detailed hardness analysis of the samples will be presented in the following section 5.3. It must be noted that a corrective coefficient $c(T) = \frac{\varepsilon^{tr}(T)}{\varepsilon_{(Ref)}^{tr}(T)}$, was multiplied to equation (5-16) to take into account the mismatch between the complete transformation strain (complete volume change at temperature T) for the considered test, $\varepsilon^{tr}(T)$, and the TC₂ relative length change reference, $\varepsilon_{(Ref)}^{tr}(T)$.

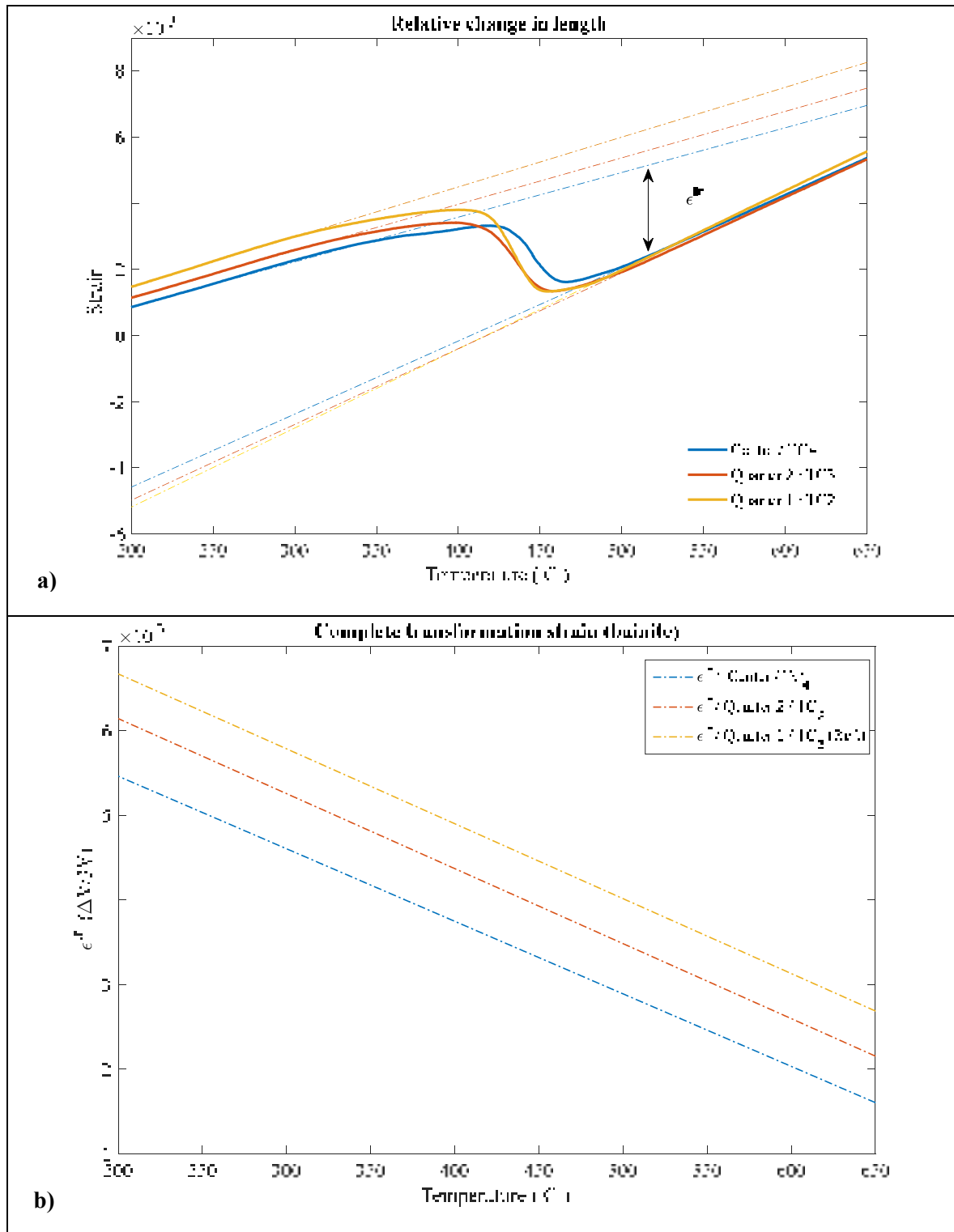


Figure 5-14. **a)** The Relative change in length for different cooling conditions from the dilatometry tests, **b)** The Calculated complete transformation strain (TC2 / Quarter 1: near the bottom, TC3 / Quarter 2: near side, and TC4 is at the center).

Figure 5-15 shows that a good match exists between the evolution of calculated bainite volume fractions and the simulated ones, the discrepancies observed in the temperature range between 400°C and 450° could be related to the difference in shape between the true TTT diagram and the predicted one (with a perfect C shape) that may affect the calculation of the volume phase fraction (K. Babu & Kumar, 2014). For example, the calculated transformed bainite at the center reaches above 73% compared to the two quarters. At the TC₂ location (Quarter 1), the maximum calculated experimental volume fraction of bainite was estimated to be 90%. This value was 83% at the TC₃ location (quarter 2). This difference could also be explained by the difference in the bainitic transformation temperature between the two quarter regions. It has been reported that the bainite transformation is more sluggish at higher temperature than at lower temperatures and as a result, the volume fraction of bainite decreases as the bainitic temperature increases (Bhadeshia, 2001; Goulas, Mecozzi, & Sietsma, 2016; Stark, Smith, & Bhadeshia, 1990).

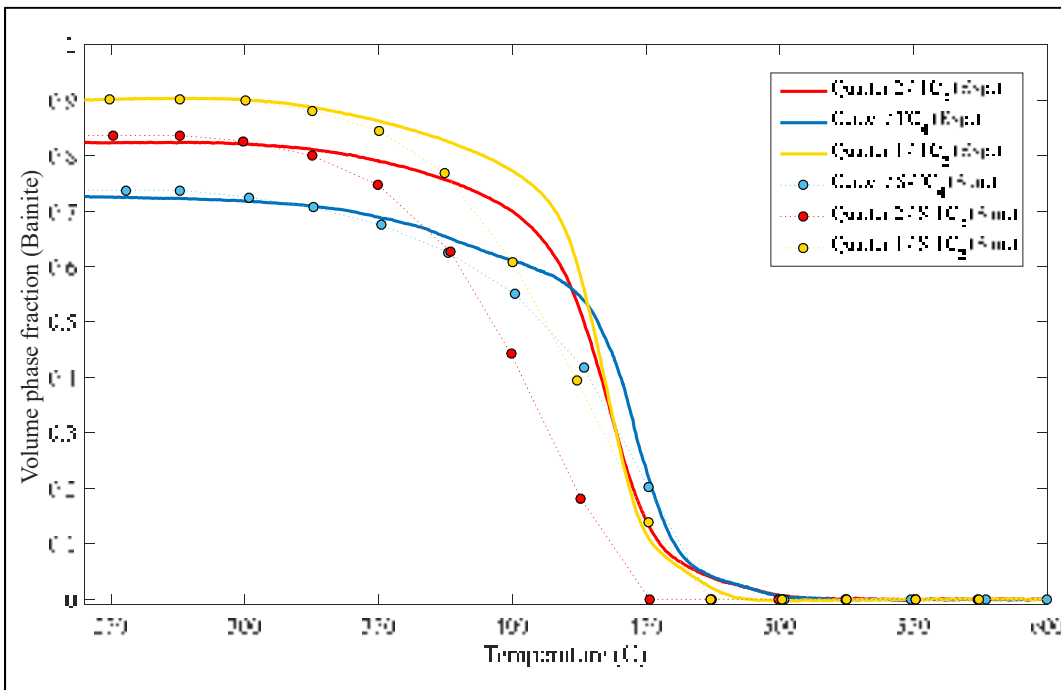


Figure 5-15. Evolution of the volume fraction of bainite obtained from dilatometry experiments.

5.5.2.3 Microstructural validation

In order to further validate and confirm the phase volume fractions obtained using dilatometry experiments and FEM predictions, ideally the microstructure of the *as quenched* block should be examined. However, due to safety issues, it was not possible to cut the large size block in its *as quenched* condition, and the block had to go through a tempering cycle. As a result, the observed microstructures of the actual block are those of tempered condition. These microstructures are shown in Figure 5-16 .b, d and f and correspond to samples cut from the surface, quarter 1 and center regions of the quench and tempered block (Figure 5-8). Even though the tempering process modifies the microstructure; however, it provides very good indications of the characteristics of the *as-quenched* state. In the present work, in order to overcome this limitation and replicate, as much as possible, the as quenched block microstructure, the micrographs representing the dilatometry samples reported in section 5.4.3, are also presented in Figure 5-16 . (a, c and e).

Examination of the microstructures in the quarter regions (TC₂ and TC₃ - Figure 5-16 . c and e) show mainly a bainitic matrix with very small islands of martensite / retained austenite (M/A) constituents.

The M/A constituents being larger at center than in the quarter, indicating less bainite at the center. This lower amount of bainite at the center results in the presence of carbon-depleted residual austenite areas that will transform to martensite during cooling to ambient temperature as also reported by Leijie Zhao et al. and Grajcar et al. in other medium steel carbon (Grajcar, Skrzypczyk, & Kozłowska, 2018; Leijie Zhao, 2019).

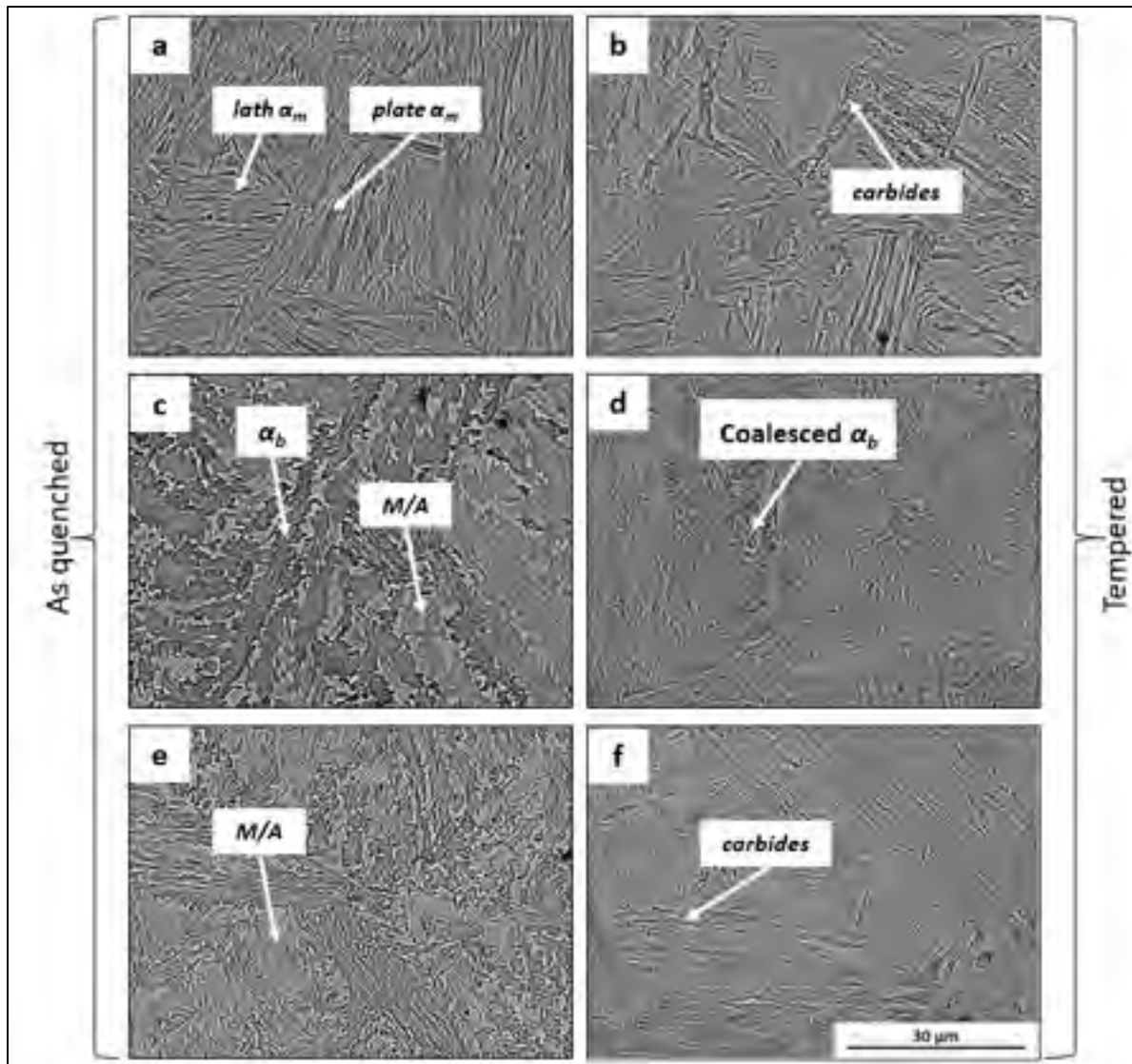


Figure 5-16 . SEM images of microstructure obtained after quenching and tempering heat treatments for different block positions. At the surface (a, b), quarter1 (c, d), and center (e, f). α_b , α_m , and M/A stand for bainite, martensite and martensite/austenite phases respectively.

5.5.3 Hardness map

The dilatometry samples used for microstructure examination were also used to measure the hardness after quench in order to validate the hardness prediction of the FEM model using the material model implemented in the Forge® NxT 1.1 database for each single phase, as well

as, the hardness material model calculated using Maynier model based on equations (5-10) to (5-12).

A comparison between experimental measurements of hardness using the dilatometry samples and the simulation results at the end of quench is shown in Figure 5-17. A very good agreement can be seen between the hardness predictions using the two material models and the experiments, though it appears that the material model used in the Forge® NxT 1.1 slightly over predicts the hardness values.

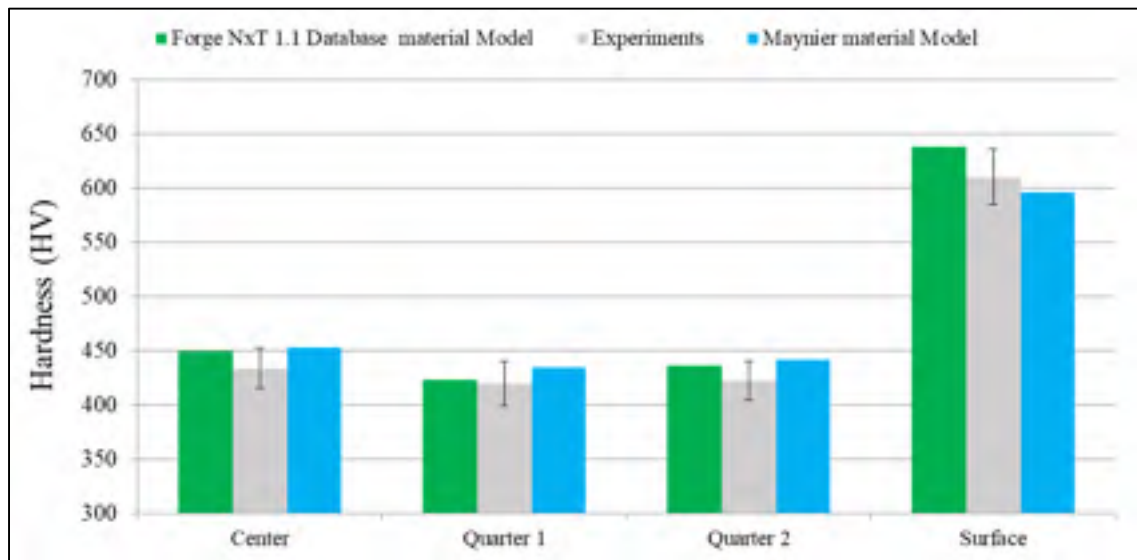


Figure 5-17. Comparison of hardness between experiments and simulation.

The agreement between hardness measurement and FEM results permits to draw a hardness map through the entire block. As indicated in Figure 5-18, the hardness distribution was evaluated at the yz cross section using a Matlab® script. The results depict a very similar trend regarding the iso-hardness contours for the two used models, with slight differences in absolute values. This difference could be due to the fact that the hardness generated by Forge® NxT 1.1 for each micro-constituent was using only temperature dependent data for born phases, except the martensite that was considering a constant hardness value of 638 HV between Ms and room temperature. Instead, the Maynier models consider the chemical composition of the steel combined with the cooling rate at the studied position, which increase the reliability of the prediction.

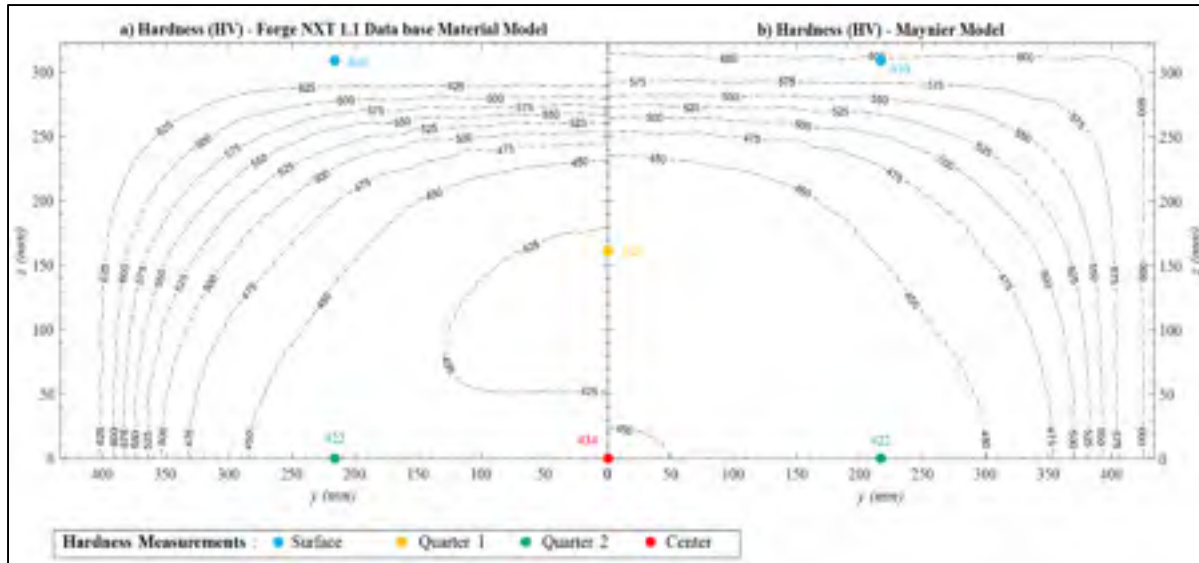


Figure 5-18. Prediction of Hardness distribution along y-z cross section.

5.6 Conclusions

In this investigation, a 3D FEM model was developed to simulate thermal history, phase transformation evolution during the quench process of large size steel forgings, in addition to the final distribution of hardness and phases.

The following conclusions can be drawn from this work:

- The improvement of phase transformational model using optimized (TTT) combined with two Ms values was able to increase in general the accuracy of quench simulation and particularly the prediction of temperature evolution.
- The reliability of the transformational model was validated by the good agreement observed between the experimental phase volume fraction of bainite and the simulated one at the end of quench.
- The highest amount of bainitic transformation was observed in the quarter region, probably due to the heat transfer conditions that generated slower cooling rates in the temperature range of bainite transformation.

- The prediction of hardness using Maynier material model was in good agreement with experimental measurement
- The good agreement between simulation and experiments could be directly linked to the accurate prediction of the thermal field that was strongly coupled with the phase transformational model.

The experimental methodology conducted during this work, as well as the developed 3D FEM model could be transposed to other heat treatment processes that include phase transformation mechanism such as induction heating processes, metal forming at high temperature or welding.

Acknowledgement

The current research was conducted in close collaboration with Finkl Steel-Sorel as an industrial partner. MITACS was supporting a portion of this research collaboration through a grant (IT03151), that is appreciatively acknowledged. Finkl Steel - Sorel, was providing the steel block, as well as all the instrumentation needed in the present research. The authors are very grateful to the logistics provided by the industrial partner and especially the full support of the R&D and Engineering department.

References

CHAPITRE 6

ARTICLE 3 : FEM MODELING AND EXPERIMENTAL VALIDATION OF QUENCH-INDUCED DISTORTIONS OF LARGE SIZE STEEL FORGINGS

Y. Bouissa^{1*}, N. Bohlooli¹, D. Shahriari¹, H. Champlaud¹, J-B. Morin², M. Jahazi^{1*}

¹ Department of Mechanical Engineering, École de technologie supérieure, 1100 Notre-Dame Street West, Montreal, QC, Canada H3C 1K3

² Finkl Steel Inc., 100 McCarthy, Saint-Joseph-de-Sorel, QC , Canada, J3R 3M8

Cet article a été soumis pour publication au journal « Journal of Manufacturing Processes » en Mars 2020

Le présent article a pour objectif principal, la modélisation et la validation expérimentale des distorsions induites par la trempe d'une brique forgée de taille industrielle. La réponse mécanique à la trempe par la distorsion, combine l'implication couplée des effets thermiques et métallurgiques qui sont discutés précédemment et supposés maîtrisés à ce stade (modèles thermique et métallurgique).

La réponse du modèle mécanique est très sensible à la qualité des propriétés thermomécaniques utilisées. Pour répondre à la qualité des données recherchées, la procédure expérimentale suivie pour les déterminer est détaillée dans l'article.

La validation expérimentale des distorsions prédites par le modèle EF a nécessité le développement d'une nouvelle méthodologie expérimentale qui est détaillée dans cet article.

Finalement, l'amplitude et la tendance des distorsions obtenues ont aussi été confirmées par le modèle.

ABSTRACT

Industrial-level water quenching operations generally lead to high residual stresses and distortion, especially for large steel parts, due to the high temperature gradient present. In this work, a 3D Finite Element (FE) model was used to simulate the water quenching process of a large size forged block made of high-strength steel in a bid to predict the induced distortion and residual stresses. The FE model considers the coupling between the thermal, mechanical and metallurgical fields and in addition to that the mechanical properties related to each phase at different temperatures were experimentally generated to feed the FE model with reliable material data. Furthermore, an experimental approach was designed to accurately measure the shape change after quenching. The results indicated that the FE model was able to predict the pattern of the distortion induced by the quench process. Also, the value of the maximum magnitude of thickness reduction was predicted at the center region of the block with a deviation of 0.5 mm.

Keywords: Prediction of distortion, FEM, residual stress, quenches modeling, large forging, distortion measurement.

6.1 Introduction

Quenching and tempering are two mandatory and inevitable steps in the manufacturing cycle of a very large family of forged steel parts (landing gears, large shaft, mold steels, etc.). The purpose of the quench process is to produce, through a phase transformation process, hard phases (martensite and/or bainite) that significantly improve the mechanical properties of the material (Michael, Nikolai, & Joseph, 2005; Yen et al., 2017). Nevertheless, the large size of the steel components imposes considerable thermal inertia during quenching (Biot numbers in excess of 20), resulting in significant temperature gaps between the surface and the core of the component. This inhomogeneity in temperature distribution also triggers uncontrolled residual stresses that could result in distortions in most cases, and even cracks, which could potentially lead to part scrapping (He & Huiping, 2010). In order to anticipate and reduce the distortion

effects after quenching, conventional practices such as designing symmetrical parts or overdimensioning are often used. However, in the case of complex geometries (gears, landing gears, etc.) (Narazaki et al., 2002), these techniques may not always represent practical solutions when it comes to ensuring components' functionalities, or maintaining an adequate product processing cost as a direct consequence of material removal overestimation (extra thickness of the initial material which must be removed at the end of the quench process), which brings additional costs (Koen & Marc, 2017).

Distortion during steel hardening is a nonlinear phenomenon that involves several fields with strong couplings and complex interactions between each of them (de Oliveira, Savi, & Pacheco, 2013; D. Huang, Arimoto, Lee, Lambert, & Narazaki, 2000). As a result, the characteristics and patterns of quench-induced distortion are hard to predict. On the other hand, the non-linear interactions between the involved variables, limit the use of analytical methods for modeling and predicting deformation extent and severity. However, the reliability of distortion predictions depends wholly on accurate quantification of the interactions between temperature and phase transformation since they directly affect the end shape of the part. The latter can only be precisely achieved with a comprehensive understanding of the conjugate consideration of thermal, mechanical, and metallurgical interactions and their relative sequences during the quench process. For example, in the presence of a large range of cooling rates (Thuvander, 2002) (due to part size, shape, quench intensity, hardenability, etc.) different scenarios of phase transformation are expected in the same component (i.e., time history of phase transformations). Therefore, quantifying phase transformation during the quench process is of critical importance because of its impact on distortion characteristics. The strain state during hardening is directly correlated with distortion, and is mainly driven by the thermal expansion and the volume change of the newly formed microstructures as a result of phase transformation (Thuvander, 2002). The strain state is also affected by the transformation-induced plasticity (TRIP) phenomenon, which causes a permanent deformation of the soft austenite phase (parent phase) (Şimşir, 2017). The TRIP strain effect is related to the coexisting mismatch in density between the parent austenite and the newborn harder phase (martensite or bainite) (Vincent et al., 2005) even if the yield stress is not reached (J.-y. Liu et al., 2009). However, experimental determination of the phase transformation plasticity parameter, K ,

remains difficult, especially if it is considered as a temperature-dependent function. The final overall distortion of the quench part is obtained by a superposition of the above effects (He & Huiping, 2010; M. Schwenk, 2014).

In recent years, with the advent of high performance computing capabilities, numerical approaches such as Finite Element Modeling (FEM) have been used to analyze different aspects of the quenching process, and some algorithms have been implemented in commercial software (Şimşir, 2014). Nonetheless, given the complexity of this process, as well as a lack of accurate material data (e.g., phase mechanical properties), simplifications have been applied. These simplifications include the non-consideration of the TRIP effect (Cheng et al., 2006; Perzynski et al., 2016), using a 2D analysis approach, or focusing only on the heat transfer aspect (Felde, Szénási, Kenéz, Wei, & Colas, 2015b; H. Li, Zhao, He, et al., 2008). Furthermore, most of the investigations reported in the literature are devoted to laboratory size specimens (Hasan et al., 2011; D. Huang et al., 2000; S.-H. Kang & Y.-T. Im, 2007; S. H. Kang & Y. T. Im, 2007). Predictions made using the above simplifications and small size samples could not accurately anticipate the quench-induced distortion of industrial size components. For example, the size and the shape of the part asymmetrically affect the heat transfer within the part, the phase transformation at different locations, and hence, the distribution of the residual stresses and properties. This can only be circumvented if a 3D modeling approach is used (Narazaki et al., 2002; Şimşir, 2014) and accurate material data (e.g., properties of each phase) are employed (Evcil et al., 2016).

Furthermore, validating simulations at industrial scale requires significant human and material resources to carry out experimental measurements. In addition, it is generally very difficult to determine error sources (Şimşir, 2014). Multiscale validation methods have been used to extrapolate the validation of simulations to different scales when the phenomena at stake are supposed to be separable and scale-independent. However, this strategy is no longer applicable for the quench process, due to the fact that the fields involved are strongly coupled, and their evolution is size-dependent (Şimşir, 2014). Therefore, a direct and reliable method of measurement at the industrial scale is needed. Finally, it must be noted that little information is available in the literature on the experimental validation of shape change after quenching of large steel components (M. Schwenk, 2014). This limitation is mainly due to the difficulty of

accurately tracking the distortion when surfaces are damaged or roughened by oxidation. Thus, several studies that used the FEM to predict the distortion did not present any experimental validations (Boniardi et al., 2014; Cheng et al., 2006; S. H. Kang & Y. T. Im, 2007; Koen & Marc, 2017; G. Y. Liu et al., 2016).

The present paper encompasses a comprehensive methodology for 3D FEM modeling of large size steel forgings during the quenching process, validated by experimental measurement of the quench-induced distortions. Considering the limited availability of thermomechanical material data for this family of steels (mold steels) and particularly the investigated one, the majority of the needed properties for FEM modeling was produced experimentally using the GleebleTM 3800 thermo-mechanical simulator and a high-resolution dilatometer (DIL-805A/D) in order to reduce as much as possible the impact of material uncertainties on simulations. The approach proposed to measure distortions after quenching is detailed, as very little is also available in the measurement of quenched induced distortion in large size components.

6.2 Simulation of Quenching

Figure 6-1 shows the main fields of the modeling and their mutual interactions that need to be considered for a comprehensive simulation of the quench process (FORGE®NxT):

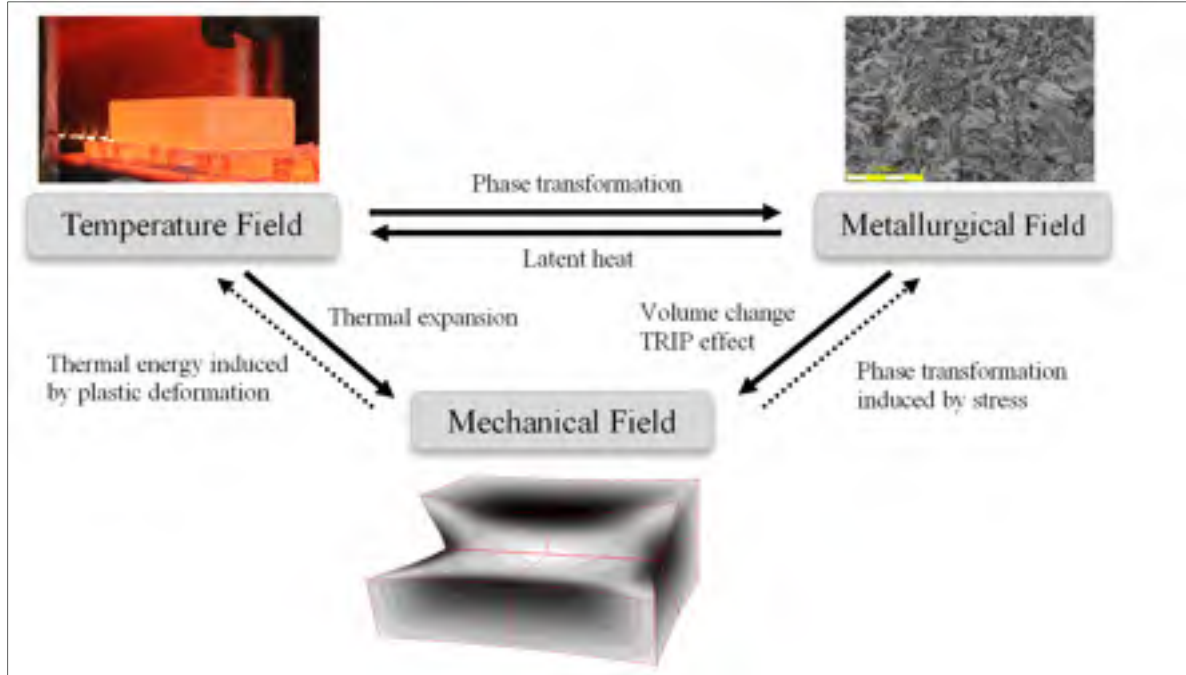


Figure 6-1. Description of the existing interactions between the involved fields during quench modeling.

In the following section, a summary of the mathematical formulation that describes the evolution of each field, and constitutes the basis for the simulation, is provided.

Considering the fact that the plastic deformations created during the quench are limited (2 to 3%), the thermal energy generation induced by plastic deformation was neglected (Şimşir, 2009). Furthermore, the effect of stress that triggers phase transformation was not considered in the present investigation.

6.2.1 Temperature field

The heat transfer during quenching was modeled using the heat equation:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) + \dot{q} \quad (6-1)$$

where ρ , C_p , λ and $\dot{q}$ are density, heat capacity, thermal conductivity and the internal thermal energy released due to phase transformation, respectively.

The internal thermal energy $\dot{q}$ could be expressed as a function of the latent heat, ΔH_k , and the volume phase fraction, ξ_k , as follows:

$$\dot{q} = \sum \Delta H_k \cdot \frac{d\xi_k}{dt} \quad (6-2)$$

Under this condition, the heat transfer coefficient becomes (Božidar Liščić, 2006):

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial n} = h(T_s - T_a) = (h_{convection} + h_{radiation})(T_s - T_a) \quad (6-3)$$

The heat transfer due to radiation could be expressed as follows:

$$h_{radiation} = \sigma \cdot \epsilon \cdot (T_s^2 + T_a^2)(T_s + T_a) \quad (6-4)$$

where σ , ϵ , T_s and T_a are Stefan-Boltzmann constant, emissivity coefficient, surface temperature and ambient temperature, respectively. It must be noted that the heat transfer coefficient during water quenching is considered as the most significant parameter for the calculation of the thermal field due to the fact that it varies as a function of temperature (Hasan et al., 2011). In the present work, the heat transfer coefficient during water quenching, as illustrated in Figure 6-2, was adapted from a previous publication by the current authors due to the similarity between the steel grades and forging block thickness (Bouissa et al., 2019), while the one used for air cooling was extracted from the work of Dung-An Wang (2013) (Dung-An Wang, 2013). Finally, in agreement with the literature, the emissivity coefficient value, ϵ , was considered to be 0.6 during air cooling (Dong-li Song 2006).

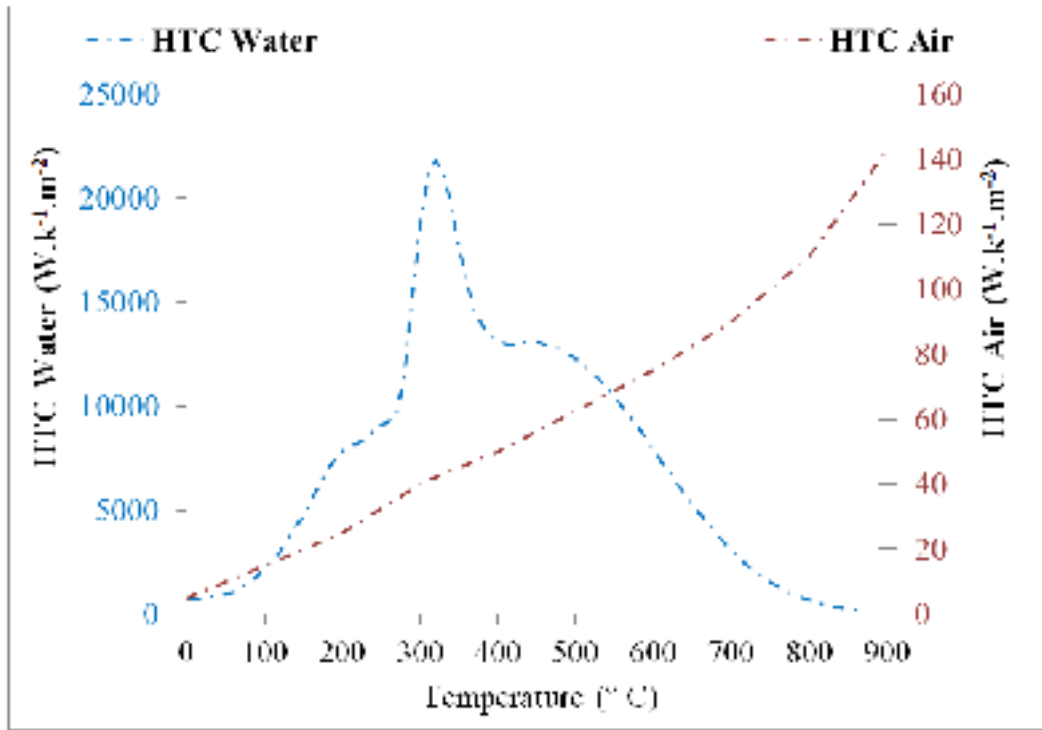


Figure 6-2. Heat transfer coefficient during water (Bouissa et al., 2019) quenching and air cooling (Dung-An Wang, 2013).

6.2.2 Metallurgical field

During the quenching process, the evolution of the volume fraction of transformed phases during continuous cooling could be obtained from the Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov (JMAK) for diffusion controlled transformations (e.g., ferrite- perlite)(Aliaga, 2000; Bouissa et al., 2019; Cardinaux, 2008). For a given temperature T_i at time t_i , JMAK equation could be written as follows:

$$\xi_i = 1 - \exp(-bt_i^{n_i}) \quad (6-5)$$

where b and n represent the constants of the JMAK model.

Any considered cooling temperature curve could be subdivided to several elementary isothermal states (T_i, t_i). The incubation time in the is considered satisfied when the unity is reached by Scheil's sum, S , as follows:

$$S = \sum_{i=1}^n \frac{\Delta t_i}{\tau_i} = 1 \quad (6-6)$$

Where $\Delta t_i, \tau_i$ represents, the time step and the incubation time at time t_i , respectively. The phase volume fraction for the fictitious time t_i^* could be written as follows:

$$\xi_i^* = 1 - \exp\{-b_{i+1}(t_i^*)^{n_{i+1}}\} \quad (6-7)$$

Where the fictitious time could be calculated by the following equation:

$$t_i^* = \left(\frac{-\ln(1-\xi_i)}{b_{i+1}} \right)^{\frac{1}{n_{i+1}}} \quad (6-8)$$

And finally, the transformed volume phase fraction at time t_{i+1} , be calculated using equation (6-9):

$$\xi_{i+1} = (\xi_i' + \xi_i) \xi_{max} \xi_i^* \quad (6-9)$$

For the time step t_i , ξ_i' represent the volume phase fraction of austenite and ξ_{max} the maximum volume phase fraction that could be transformed.

In case where the phase transformation is displacive (martensite), the Koistinen-Marburger model (Cardinaux, 2008) could describe the volume phase fraction evolution, as follows:

$$\xi_m = 1 - \exp(-\alpha(M_s - T)) \quad (6-10)$$

Where α represent the constant of Marburger, and M_s , the martensite start temperature.

It should be noted that in the present work, a linear phase mixture rule, as described in equation (6-11), was used to obtain macro-level material properties (S. H. Kang & Y. T. Im, 2007; Saunders et al., 2003).

$$P = \sum P_k \xi_k \quad (6-11)$$

In the above equation, P represents the material property at the macro level, and P_k , that of each micro-constituent.

6.2.3 Mechanical field

6.2.3.1 Strain model

The shape changes during steel hardening are directly linked to the history of generated strains (M. Schwenk, 2014). The volume change could be correlated to the spherical strain tensor, while the distortion could be correlated to the deviatoric part (Guzzetta, 2013). The total strain induced in the material as a result of quenching could be represented by the sum of five strain components:

$$d\{\varepsilon\} = d\{\varepsilon_e\} + d\{\varepsilon_{th}\} + d\{\varepsilon_{tp}\} + d\{\varepsilon_{tr}\} + d\{\varepsilon_p\} \quad (6-12)$$

where $d\{\varepsilon\}, d\{\varepsilon_e\}, d\{\varepsilon_{th}\}, d\{\varepsilon_{tp}\}, d\{\varepsilon_{tr}\}$ and $d\{\varepsilon_p\}$ represent the total, elastic, thermal, phase transformational, and transformation plasticity, and plastic increments of deformation, respectively.

Equations ((6-13) - (6-15)) describe the formulation of the thermal (Tong, Gu, & Yang, 2018), phase transformation (Şimşir, 2008b) and plastic strain increment, as reported in (Aliaga, 2000).

Thermal strain increment

$$d\{\varepsilon_{th}\} = \sum_{k=1}^p \xi_k \alpha_k dT \quad (6-13)$$

Where α_k is the thermal expansion coefficient of the phase k.

Phase transformation strain increment

$$d\{\varepsilon_{tp}\} = \sum_{k=1}^{p-1} \frac{1}{3} \Delta_k d\xi_k \quad (6-14)$$

Where Δ_k is the structural dilation due to phase transformation

Plastic strain increment

$$d\{\varepsilon_p\} = d\lambda \frac{\partial f}{\partial \{\sigma\}} \quad (6-15)$$

$$f = \sqrt{\frac{3}{2} \{S\} \{S\}^T} - \sigma_Y = \bar{\sigma} - \sigma_Y = 0 \quad (6-16)$$

In the above equations, f represents the potential plastic function in the stress space, $d\lambda$ is the constant plastic multiplier, σ_Y the yield stress, and $\bar{\sigma}$ is the equivalent stress.

Transformation-Induced Plasticity (TRIP)

The mathematical form of the strain rate due to TRIP is given by (Şimşir, 2008a):

$$d\{\varepsilon_{tr}\} = \frac{3}{2} K_k \{S\} 2(1 - \xi_k) d\xi_k \quad (6-17)$$

where K_k is a constant due to the transformation-induced plasticity (TRIP) and $\{S\}$ the stress tensor deviator.

Plastic Memory Loss Due To Phase Transformations

It must be noted that the new formed phases do not necessarily inherit the strain hardening history (memory of deformation) experienced by the initial phase (austenite) (Vincent et al., 2005). Depending on whether the new phase undergoes a full ($\gamma_k = 1$) or partial ($0 < \gamma_k < 1$) strain hardening recovery, the inherited average strain at time $t + \Delta t$ could be described as follows (Cardinaux, 2008) :

$$\bar{\varepsilon}_k(t + \Delta t) = (1 - \gamma_k) \frac{\xi_k(t) \bar{\varepsilon}_k(t) + (\xi_k(t) + \Delta \xi_k) \Delta \bar{\varepsilon}}{\xi_k(t) + \Delta \xi_k} + \gamma_k \bar{\varepsilon}(t + \Delta t) \quad (6-18)$$

where γ_k is the memory coefficient of the phase k.

6.2.3.2 Stress model

The inverse generalized Hook's law for elastic behavior could be expressed as follows:

$$\{\varepsilon_e\} = [D_e^{-1}(T)]\{\sigma\} \quad (6-19)$$

Derivation of equation (6-19), results in:

$$d\{\varepsilon_e\} = \frac{\partial [D_e^{-1}(T)]}{\partial T} dT \{\sigma\} + [D_e^{-1}(T)] d\{\sigma\} \quad (6-20)$$

Multiplying equation (6-20) by the elastic matrix $[D_e(T)]$, leads to:

$$[D_e(T)] d\{\varepsilon_e\} = [D_e(T)] \frac{\partial [D_e^{-1}(T)]}{\partial T} dT \{\sigma\} + [D_e(T)] [D_e^{-1}(T)] d\{\sigma\} \quad (6-21)$$

with:

$$d\{\sigma\} = [D_e(T)](d\{\varepsilon_e\} - \frac{\partial[D_e^{-1}(T)]}{\partial T}\{\sigma\}dT) = [D_e(T)](d\{\varepsilon_e\} - d\{\varepsilon_0\}) \quad (6-22)$$

and

$$d\{\varepsilon_0\} = \frac{\partial[D_e^{-1}(T)]}{\partial T}\{\sigma\}dT \quad (6-23)$$

$d\bar{\varepsilon}_p$ represent the increment of the equivalent plastic strain

$$d\{\varepsilon_p\} = d\bar{\varepsilon}_p \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \{\sigma\}} = d\lambda \frac{\partial f}{\partial \{\sigma\}} \quad (6-24)$$

Considering that $\sigma_Y(\int d\bar{\varepsilon}_p, T)$, the total differential form of the equation (6-16) could be written as:

$$\left(\frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \{\sigma\}}\right)^T d\{\sigma\} = \frac{\partial \sigma_Y}{\partial \bar{\varepsilon}_p} d\bar{\varepsilon}_p + \frac{\partial \sigma_Y}{\partial T} dT \quad (6-25)$$

$$d\bar{\varepsilon}_p = \frac{\left(\frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \{\sigma\}}\right)^T [D_e(T)](d\{\varepsilon\} - d\{\varepsilon_{th}\} - d\{\varepsilon_{tp}\} - d\{\varepsilon_{tr}\} - d\{\varepsilon_0\}) - \frac{\partial \sigma_Y}{\partial T} dT}{\frac{\partial \sigma_Y}{\partial \bar{\varepsilon}_p} + \left(\frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \{\sigma\}}\right)^T [D_e(T)] \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \{\sigma\}}} \quad (6-26)$$

Finally, the stress increment could be expressed as follows:

$$d\{\sigma\} = \begin{cases} [D_e(T)](d\{\varepsilon\} - d\{\varepsilon_{th}\} - d\{\varepsilon_{tp}\} - d\{\varepsilon_{tr}\} - d\{\varepsilon_0\}) & , \bar{\sigma} < \sigma_Y \\ [D_{ep}(T)](d\{\varepsilon\} - d\{\varepsilon_{th}\} - d\{\varepsilon_{tp}\} - d\{\varepsilon_{tr}\} - d\{\varepsilon_0\}) + d\{\sigma_0\} & , \bar{\sigma} = \sigma_Y \end{cases} \quad (6-27)$$

where the elastic-plastic matrix could be written as follows:

$$[D_{ep}(T)] = [D_e(T)] - \frac{[D_e(T)] \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \{\sigma\}} \left(\frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \{\sigma\}}\right)^T [D_e(T)]}{\frac{\partial \sigma_Y}{\partial \bar{\varepsilon}_p} + \left(\frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \{\sigma\}}\right)^T [D_e(T)] \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \{\sigma\}}} \quad (6-28)$$

and

$$d\{\sigma_0\} = \frac{[D_e(T)] \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \{\sigma\}} \frac{\partial \sigma_Y}{\partial T} dT}{\frac{\partial \sigma_Y}{\partial \bar{\varepsilon}_p} + \left(\frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \{\sigma\}} \right)^T [D_e(T)] \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \{\sigma\}}} \quad (6-29)$$

It should be mentioned that an elasto-plastic model was used in the current study (Şimşir, 2009). The equations used to describe the stress model are based on the works of (H. Li, Zhao, & He, 2008; Tong, Gu, & Totten, 2018; Tong, Gu, & Yang, 2018). The above equations further highlight the complex couplings between the stress and strain during quenching.

6.3 Methodology

6.3.1 Experimental setup

A 645×868×1037 mm³ steel block with the composition shown in Table 6-1 was machined in order to track volume changes after the quench and temper heat treatment cycle.

Table 6-1. Chemical composition of steel block (wt / %).

% C	% Mn	% Si	% Ni	% Cr	% Mo	% Cu
0.28 - 0.40	0.60 - 1.00	0.20 - 0.80	0.45 - 0.65	1.4 - 2	0.35 - 0.55	0 - 0.25

The flow chart of the heat treatment process, presented in Figure 6-3, was specifically designed for the experimental block.

The block was austenitized at 871 °C and quenched in water (6 °C) for around 2.5 h, followed by air cooling (20 °C) for 1.5 h. The quenched block was then tempered at 565 °C to reduce the level of the residual stresses produced during quenching. While the tempering could very slightly affect the quench-induced distortions, the dimensional changes are, however, considered relatively negligible in this case, considering the large size of the block (Evcil et al., 2016).

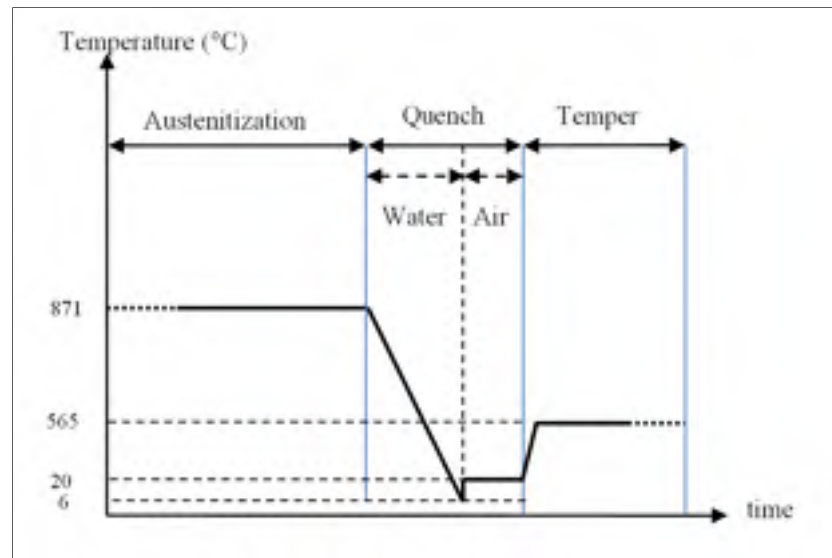


Figure 6-3. Heat treatment cycle.

6.3.2 Geometrical modeling

6.3.2.1 3D Surface measurement

Dimensional measurements were conducted to precisely model the surface of the block before and after heat treatment. The digitization of the 3D discrete point positions (x,y,z) was obtained using a 3D scanner (Creaform Handyscan 3D / EXAscan model - Figure 6-4), and based on a triangulation approach (Barbero & Ureta, 2011). The measurement process consisted in projecting a pattern of laser lines on the object to be scanned. The reflected light coming from the object was then collected by a CCD camera for real-time data processing (Barbero & Ureta, 2011). The triangulation process was tracked using the positional markers, which were taped onto the block in order to create an irregular triangle mesh. In this approach, the density and positions of the markers depend principally on the size of the block and the area to be scanned; for example, edges and corners (Tóth & Živčák, 2014).

The small arms in Figure 6-4 (indicated 'e' in the figure) were added to the block to allow easier visibility during the lifting operations after austenitization.

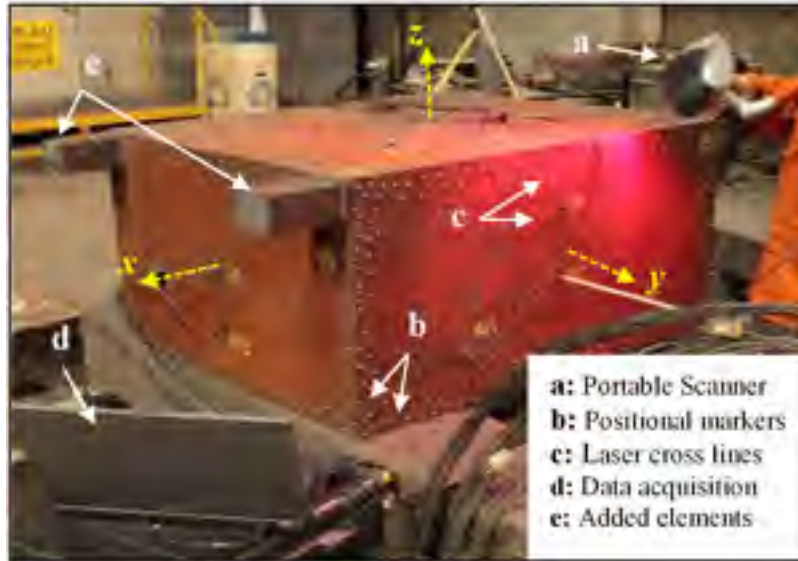


Figure 6-4. Measurement scanning procedure.

6.3.2.2 3D surface reconstruction and solid modeling

6.3.2.3 Reconstruction of 3D surfaces

The data files generated by the 3D scanners were imported in the Catia V5 DSE (Digitized Shape Editor) module to analyze and test the quality of the points distribution (Barbero & Ureta, 2011) and to remove unneeded parts such as wires, fixtures, etc. (Figure 6-5.a).

The main steps used to obtain the final 3D body are illustrated in Figure 6-5.. Specifically, different functions and modules were used in Catia V to reconstruct 3D surfaces from the points cloud. The maximum deviation of the modeled surfaces within the selected points was less than 1 mm. The final reconstructed shape was obtained by assembling the six surfaces of the block (Figure 6-5. b). The external surface was then converted into a solid body.

The three principal axes of inertia was determined by Catia V5 for before and after quench volumes of the reconstructed block (Figure 6-5..b). The inertia axis system was considered as a new common reference using the following equations (Peraire & Widnall, 2008):

$$I_{xx} = \rho \int (y^2 + z^2) \cdot dV, \quad I_{yy} = \rho \int (x^2 + z^2) \cdot dV, \quad I_{zz} = \rho \int (x^2 + y^2) \cdot dV \quad (6-30)$$

6.3.2.4 Design of the nominal cuboid used for FEM model

The shape of the part obtained before heat treatment was a non-ideal cuboid shape that was not practical to exploit as geometry input for FEM model that was developed of an ideal cuboid shape (Figure 6-5.b-c) before heat treatment). This 3D part was assumed to be symmetrically subjected to the same hardening effects regarding each principal axis of inertia.

The following procedure was developed to calculate the nominal dimensions (x_0, y_0, z_0) of a cuboid shape that is able to represent the responses of a real 3D block (the reverse engineered block) to temperature and distortion.

The calculation of the nominal a cuboidal block was exploiting an optimization method that minimizes an objective function f_I (residual sum of squares) (see eq. (6-31)) as a function of Inertia momentums ($\frac{\partial f_I}{\partial x_0} = \frac{\partial f_I}{\partial y_0} = \frac{\partial f_I}{\partial z_0} = 0$):

$$f_I = (I_{xx} - I_{xx_0})^2 + (I_{yy} - I_{yy_0})^2 + (I_{zz} - I_{zz_0})^2 \quad (6-31)$$

I_{xx_0} , I_{yy_0} and I_{zz_0} represent the Inertia momentum for the nominal cuboid, and they are expressed as follows:

$$I_{xx_0} = \frac{m_0 \times (y_0^2 + z_0^2)}{12}, \quad I_{yy_0} = \frac{m_0 \times (x_0^2 + z_0^2)}{12}, \quad I_{zz_0} = \frac{m_0 \times (x_0^2 + y_0^2)}{12} \quad (6-32)$$

where

$$m_0 = \rho \cdot V_0 = \rho \cdot (x_0 \times y_0 \times z_0) \quad (6-33)$$

Taking the calculated Inertia axis system of the 3D body after quenching as a common reference, the estimation of the relative shape change after hardening could be compared to the nominal body shape before quenching, assuming that the 3D part was symmetrically subjected to the same hardening effects regarding each principal axis of inertia.

A zoom was required at the upper surface level (z^+ , Figure 6-5.c) of the reconstructed 3D body to illustrate the changes of the 3D surface shape along x-y plane. More specific explanation will be addressed in section 6.4.2.2.

Finally, the optimized 3D nominal cuboidal block (before heat treatment) was imported into the FEM software as a geometrical input. The 3D model obtained after heat treatment will be analyzed to validate FEM results in section 6.4.2.2 .

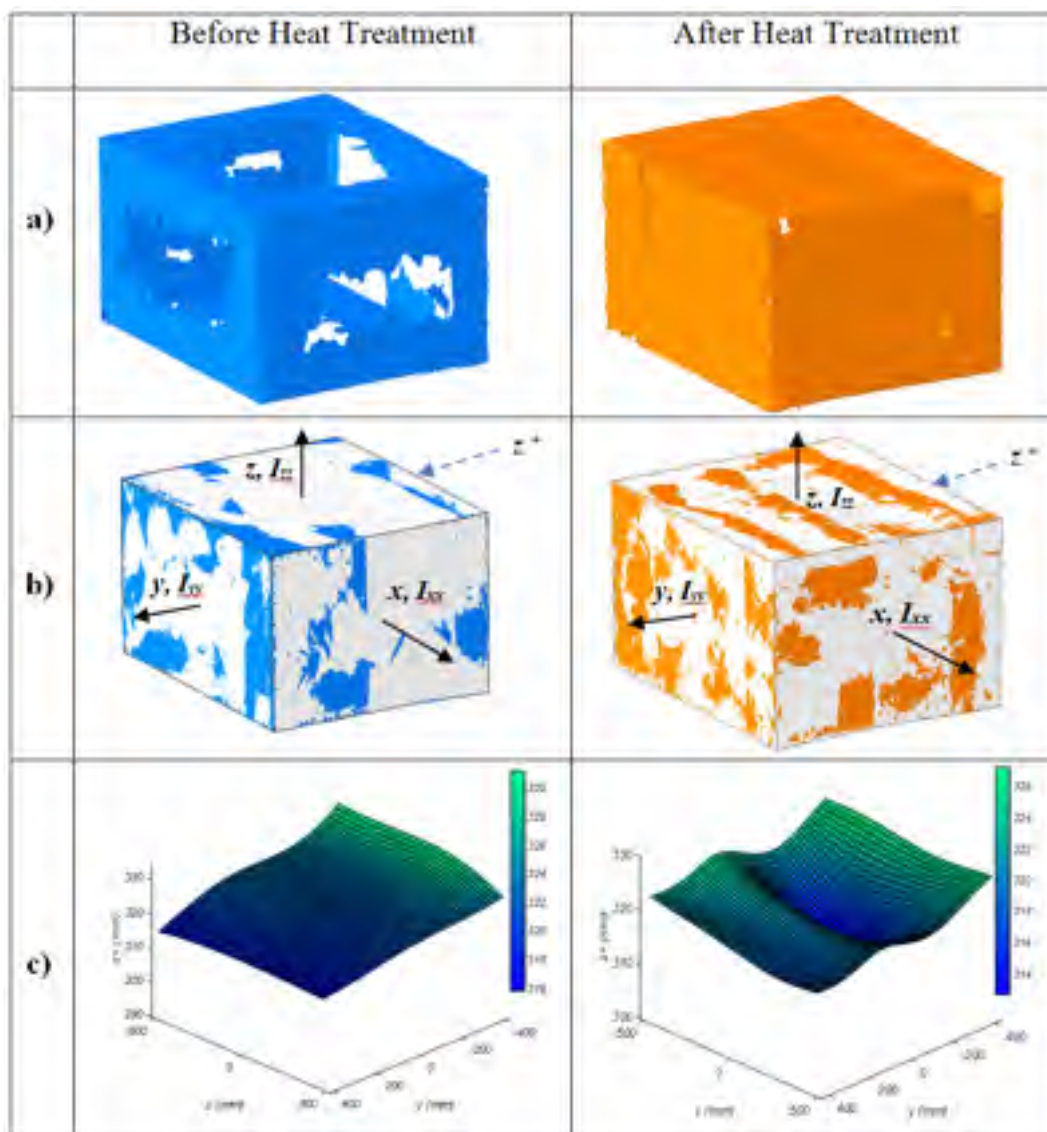


Figure 6-5. Procedure for shape reconstruction and body modeling using Catia V5.

6.3.3 FEM Modeling

Forge® NxT 1.1 was used to model the part during the quench using a 3D model with three planes of symmetry. The meshing was refined by up to 898,242 tetrahedral elements (P1+/P1), which ensured grid independence. Figure 6-6 illustrates the dimensions of the nominal optimized solid model and the specification of the FEM model (1/8).

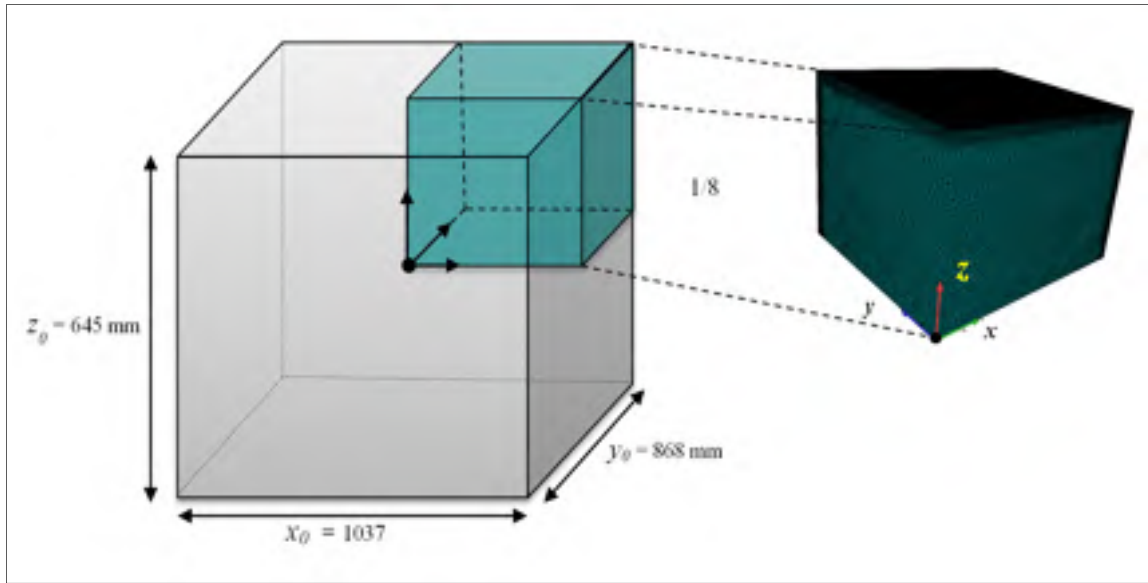


Figure 6-6. Dimensions of the block, and the mesh specifications.

6.3.3.1 Material data:

6.3.3.2 Thermo-mechanical data

It is well known that the reliability of quench-induced distortion prediction in steel, where phase transformation takes place, is strongly dependent on an accurate determination of the mechanical and physical properties of each phase (Şimşir, 2014) (martensite, bainite, etc.). However, such specific data is not always available for the considered alloy, and as a result, only generic material database (e.g., JMatPro®, FEM software data base, literature, etc.) are used. In the present investigation, wherever possible, experimentally measured thermo-mechanical properties are privileged, but if unavailable, the material data generated by JMatPro® were used instead. Furthermore, a high-resolution dilatometer (DIL-805A/D) was used to obtain the thermal expansion coefficients for each phase and the volume changes due to phase transformation, as illustrated in Figure 6-7 for bainitic and martensite transformations.

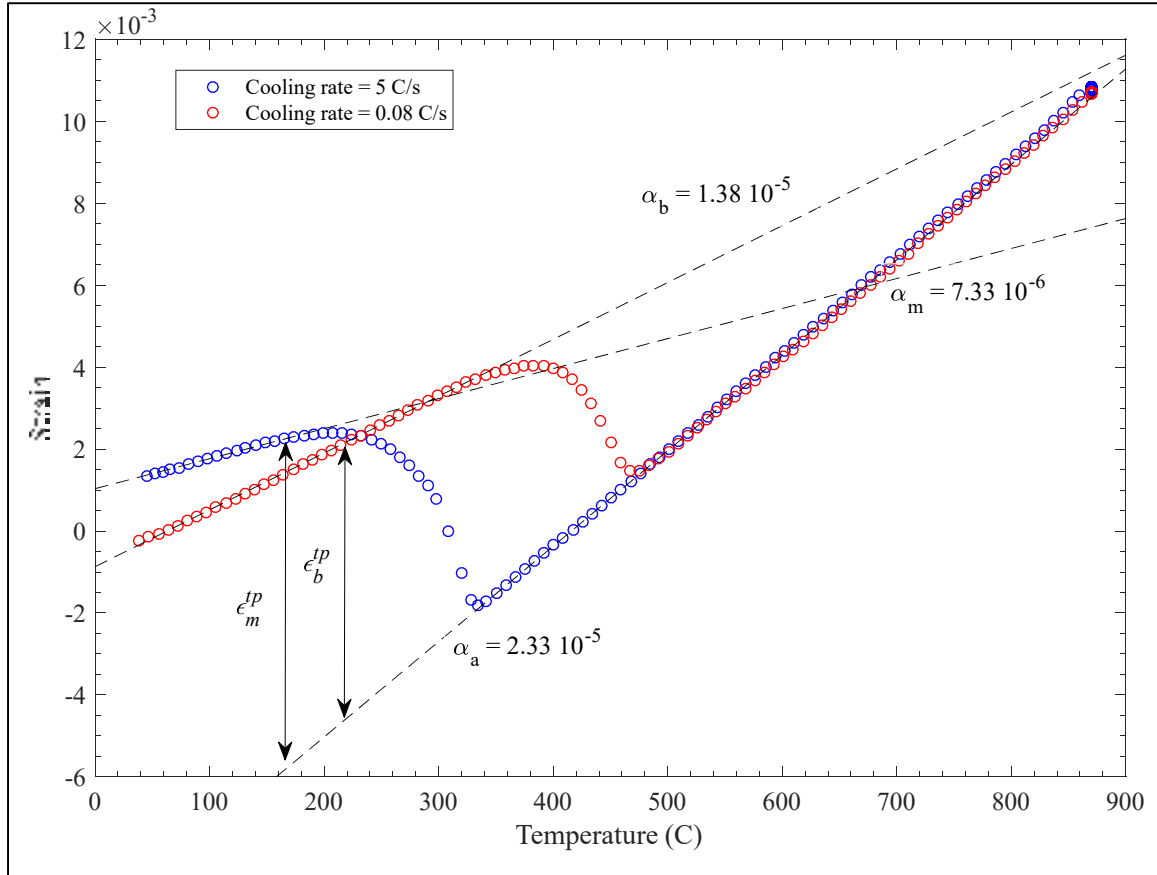


Figure 6-7. Extraction of thermo-mechanical coefficient using dilatometry curves.

In Figure 6-9.c) the strain-stress curves for each phase (i.e., fully austenitic) were produced experimentally at different temperatures using the GleebleTM 3800 thermo-mechanical simulator. The Swift law was used to model the plastic domain for each phase (Choudhary, Samuel, Bhanu Sankara Rao, & Mannan, 2001). The calculation of the flow stress over the entire temperature range of the heat-treatment process was determined using linear interpolation and/or extrapolation. The above approach of using a combination of experimental data, Swift law, and the interpolation to other temperatures will further increase the reliability and consistency of residual stress predictions. Considering that material flow during quenching is governed by a quasi-static regime (Z. X. Li, Zhan, Fan, & Tan, 2017), the strain rate was expected to be low. Therefore, in the present work, a strain rate of 10^{-3} s^{-1} was used for the tensile test experiments. Martensitic and bainitic single-phase samples were produced by heat

treatments (quenching and austempering). The tensile samples were machined based on the ASTM E8 standard Figure 8.b). In order to increase the accuracy of the results obtained, an extensometer was installed in the gage length region of the tensile samples during all tests, as shown in Figure 8.a).

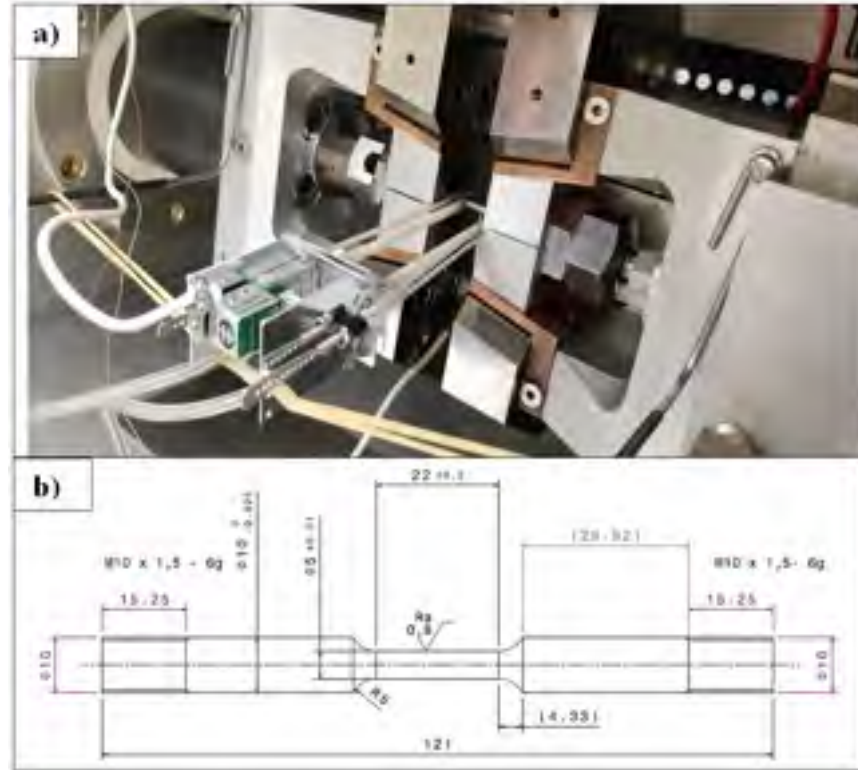


Figure 6-8. Material flow stress determination -
a) Hot tensile testing set-up for Gleeble™ 3800;
b) Dimensions of the tensile test specimens.

For each phase (austenite, bainite and martensite), the Young's modulus was calculated for selected temperatures from the tensile tests, and the following equation was used to model the evolution of the Young's modulus with temperature (Seif et al., 2016):

$$E(T) = E_{T_0} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left(\frac{T - T_0}{e_3} \right)^{e_1} - \frac{1}{2} \left(\frac{T - T_0}{e_4} \right)^{e_2} \right\} \quad (6-34)$$

Where E_{T_0} is Young's modulus at room temperature, T_0 and e_{1-4} are the parameters of equation (6-34).

The measured 0.2% proof stress values for martensite and bainite were compared with those predicted using JMatPro®, and the results are reported in Figure 6-9.b). Considering the very good agreement obtained, JMatPro® predictions were used to estimate the 0.2% proof stress for temperatures for which experimental data were not available in the literature. Furthermore, given the importance of the mechanical properties of the austenitic phase during cooling for distortion prediction, the 0.2% proof stress of austenite was measured at different temperatures representing cooling during quenching, and fitted with the following equation (Seif et al., 2016):

$$\sigma_Y(T) = \sigma_{Y_{T_0}} \left(r_5 + (1 - r_5) \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left(\frac{T - T_0}{r_3} \right)^{r_1} - \frac{1}{2} \left(\frac{T - T_0}{r_4} \right)^{r_2} \right\} \right) \quad (6-35)$$

Where $\sigma_{Y_{T_0}}$ is the 0.2% proof stress at room temperature and r_{1-5} are the parameters of equation (6-35).

The mechanical properties results as a function of temperature for different phases are shown in Figure 6-9.

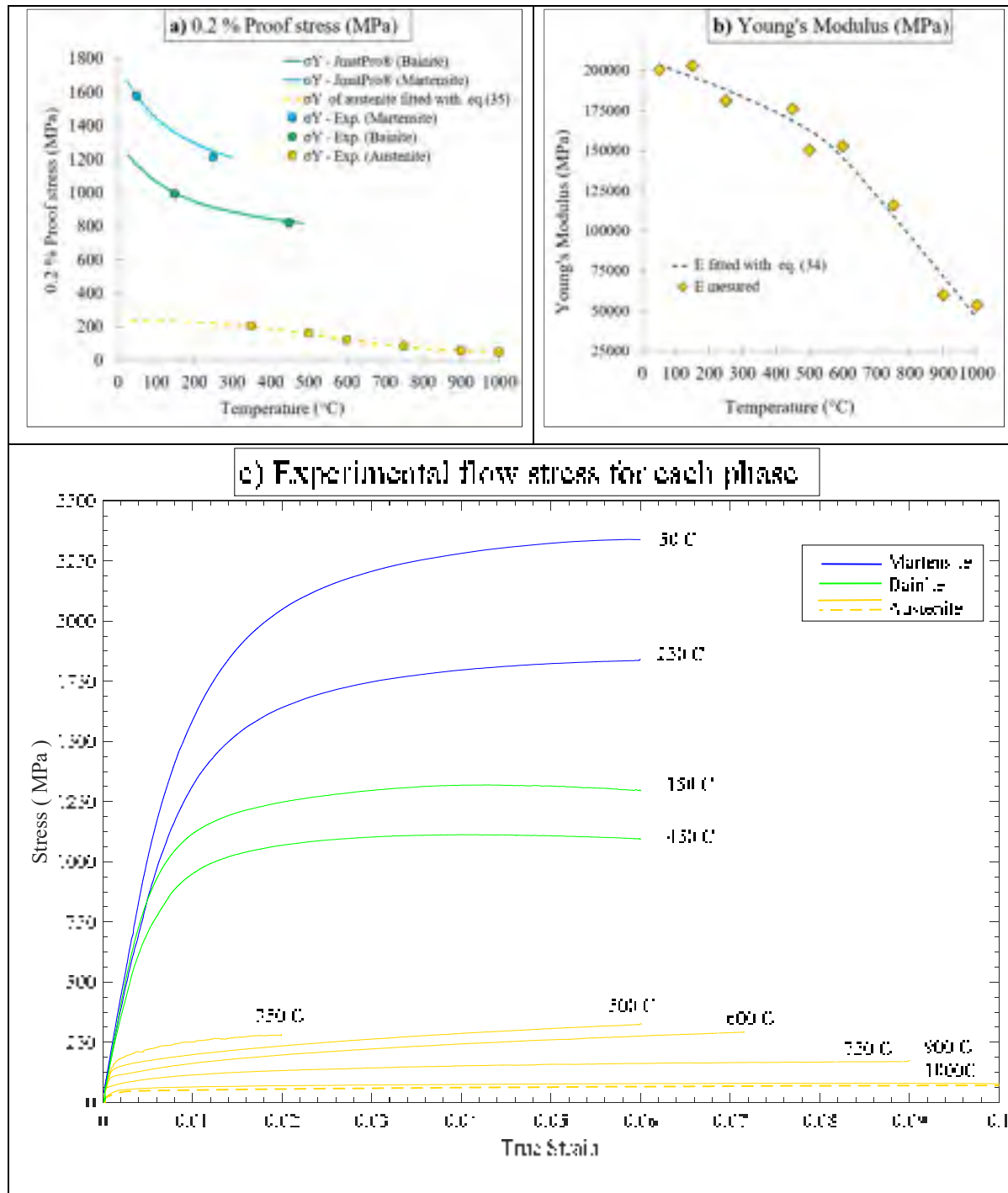


Figure 6-9. Experimental thermomechanical data as a function of temperature.

In agreement with Mustak et al. (Mustak et al., 2016), thermal expansion coefficient, α_k and structural dilatation due to volume change, Δ_k could also be calculated using the material

density change, $\rho_k(T)$ of the phase k as a function of temperature, as reported in equations (6-36) and (6-37), respectively:

$$\alpha_k = \frac{1}{(T - T_0)} \times \left[\sqrt[3]{\frac{\rho_k(T)}{\rho_k(T_0)}} - 1 \right] \quad (6-36)$$

$$\Delta_k = \frac{\Delta V_{a \rightarrow k}(T)}{V_a(T)} = \left[\frac{\rho_a(T) - \rho_k(T)}{\rho_a(T)} \right] \quad (6-37)$$

Where T_0 represents the room temperature and $V_a(T)$ the volume of austenite

The following equation uses the approximation of the Greenwood and Johnson (M. Schwenk, 2014) for the calculation of TRIP coefficient as a function of temperature, $K_k(T)$, including experimental data :

$$K_k(T) = \frac{5}{6} \cdot \frac{\Delta V_{a \rightarrow k}(T)}{V_a(T)} \cdot \frac{1}{\sigma_Y(T)} = \frac{5}{6} \cdot (3 \cdot \varepsilon_k^{tp}(T)) \cdot \frac{1}{\sigma_Y(T)} \quad (6-38)$$

Where $\varepsilon_k^{tp}(T)$ represents the phase transformation strain (Figure 6-7) and $\sigma_Y(T)$ the 0.2% proof stress of austenite, as the softest phase (equation (6-35)- Figure 6-9.a))

6.3.3.3 TTT curves

Figure 6-10 illustrates the TTT (Temperature-Time-Transformation) diagram generated initially by JMatPro®, and then shifted down vertically to fit with the bainite transformation start temperature, Bs. The Bs and Ms temperatures were calculated using Kirkaldy and Haynes equations (Cardinaux, 2008), respectively.

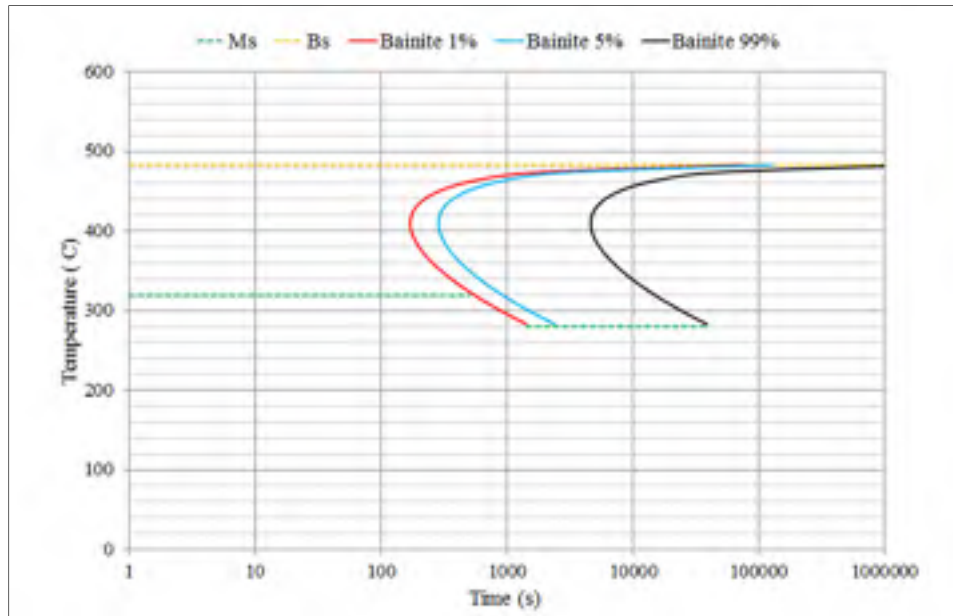


Figure 6-10. TTT generated initially by JMatPro® and modified to fit Bs.

6.3.3.4 Thermo-physical data

The thermo-physical data such as the density, specific heat and thermal conductivity for each phase were generated by the JMatPro® software; the only exception was the thermal conductivity of the austenite, which was acquired from published experimental data on a steel that had a very close chemical composition to the one used in the present study (Cochet et al., 2017).

Finally, the latent heat generation of bainite and martensite was calculated using the methods presented in (Kulawik & Bokota, 2011) and (Mustak et al., 2016), respectively.

6.4 Results and Discussion

6.4.1 Thermal analysis

Figure 6-11 shows the evolution of temperature during the quenching along y and z directions, starting from the center of the block, based on the FEM model predictions. A drastic temperature drop is observed due to the forced convection of water over the block, which results in a flat-top Gaussian temperature distribution (Figure 6-11.a). On the other hand, this

effect is countered by the high thermal inertia (high Biot number) of the block, through conduction, which results in maintaining high temperature at the center, even after 900s. As the size of the colder regions increases, the maximum temperature at the center decreases progressively to form a Gaussian shape temperature distribution pattern.

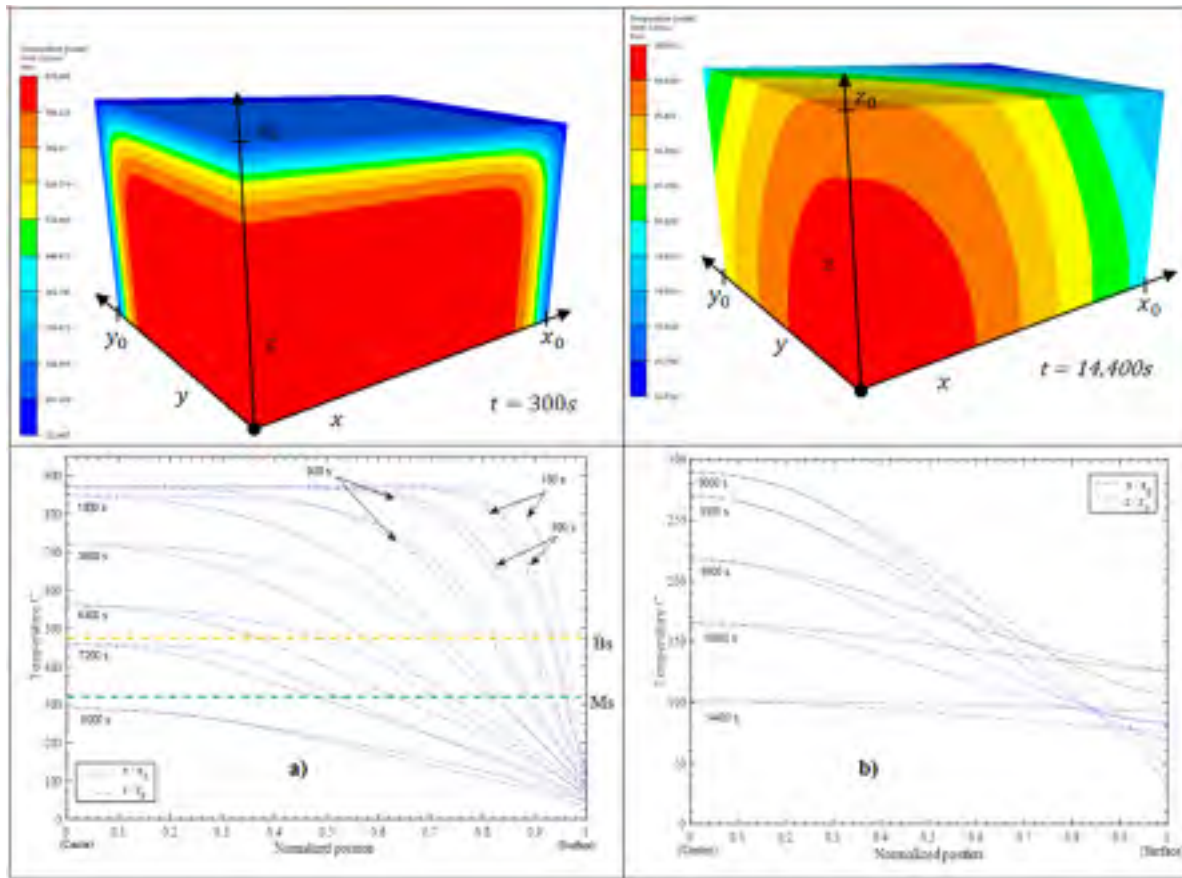


Figure 6-11. Evolution of temperature along x and z directions during **a)** water quenching, and **b)** air cooling.

As illustrated in section 6.3.1, the block was taken out from the quench water bath after 2.5h to be cooled in the air. All phase transformations (e.g., austenite to martensite, austenite to bainite) were expected to reach the finishing stage for the full block (temperature below M_s). From Figure 6-11.b), it can be concluded that the heat stored in the center region of the block was transferred to the surfaces by conduction, due to the low severity of air cooling (low HTC), based on the fact that the temperature difference inside the block quickly vanished between the center and surfaces. Based on the above analysis, it can be said that the calculated temperature

for the block was accurately predicted considering the similarity of the quench conditions (steel grade, thickness of the block, size of the quench tank, etc.) to experimental works published by some of the current authors (Bouissa et al., 2019).

6.4.2 Distortion analysis

Figure 6-12 illustrates the prediction of shape change during quench, where it can be seen that the maximum displacements are mainly located at the center of the surfaces. However, the level of distortion was pronounced for the surfaces normal to the z direction, with a maximum value of 7.6 mm at the surface center. The external shape of the block, scanned after quenching (Figure 6-14), confirmed a characteristic shape that is usually observed in the case of steel hardening of a prismatic specimen (M. Schwenk, 2014). The geometry obtained after hardening could be described mainly by a spool shape characterized by a bulging out at the edges and a bulging in at the center of the surfaces, as also reported by J.H. M. Schwenk, et al. (2014) (M. Schwenk, 2014).

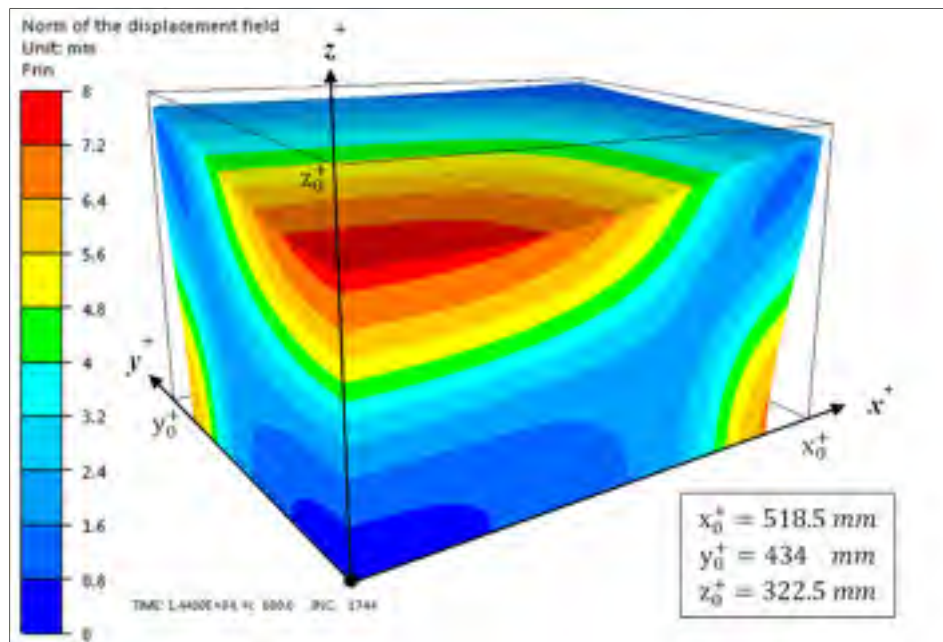


Figure 6-12. Distortion pattern obtained after quench simulation ($\times 10$ displacement magnification).

6.4.2.1 Distortion evolution during quench

The progress of the predicted distortions via a temporal sequence of cross-sectional volume changes at (x_0, z_0) was tracked using the same magnitude ($\times 10$) and level of iso-displacement (black lines) superimposed with temperature, as illustrated in Figure 6-13. The simulation of the early stages of water quenching (Figure 6-13, $t = 150\text{s}, 300\text{s}$) shows that the iso-displacements are mainly located at the surface and have a convex shape (maximum displacement in z^+ direction, was located next to the bulging edges). At this stage, a good correlation between the temperature and displacement fields could be observed, indicating that the shrinking of the block was driven by thermal stresses. T. Lübben, et al. (2014) reported that the temperature difference $\Delta T = (T_{max} - T_{min})$ between the coldest and hottest zones could be correlated to the intensity of thermal stresses (N. I. Kobasko et al., 2007; Lübben, Dossett, & Totten, 2014). Results reported in Figure 6-13 also reveal that due to high heat removal, the edges were the first elements to experience M_s temperature (S. H. Kang & Y. T. Im, 2007; G. Y. Liu et al., 2016) and build a rigid frame composed of hard martensitic layers. This newly formed martensite (fresh martensite) is associated with a fast increased volume change that could explain the local bulging out of the iso-displacement at the level of the edges while the iso-displacements of the untransformed zones within the block still keep a convex shape (Figure 6-13, $t = 150\text{s}, 300\text{s}$). The observed geometry could be mostly described by a barrel-shape; the martensitic transformation starts first in the surface regions before ΔT is at a maximum, and the remaining zones being still in the austenitic state at high temperature (Narazaki et al., 2002). Results indicate that at around $t = 900\text{s}$, $\Delta T \approx \Delta T_{max}$, the maximum level of thermal stresses has probably been reached and that the deviation between the temperature and displacement fields can be clearly observed. In the time interval 900s-to-9000s, the magnitude and extent of transformational stresses increase as the phase transformation continues to spread progressively towards the center of the block. The shape changes at this stage are mostly controlled by the transformational stresses that overcome thermal stresses (continuous decrease of ΔT), resulting in progressive shape evolution from a barrel to a spool shape (Lübben et al., 2014; Şimşir, 2014). In other words, z_{min} in (x_0, z_0) , the cross-section is moving from the edge region to the center at the level of the top surface. During

air quenching, phase transformations are expected to be in their finishing stage (temperatures below M_s), and therefore, volume changes are slightly noticeable, with a rapid decrease of ΔT (Figure 6-13, $t = 9000$ s to 14 400s). Therefore, it could be said that as long as the temperature is below any critical phase transformation value (e.g., M_f) and ΔT is very small, the block has almost attained its final shape.

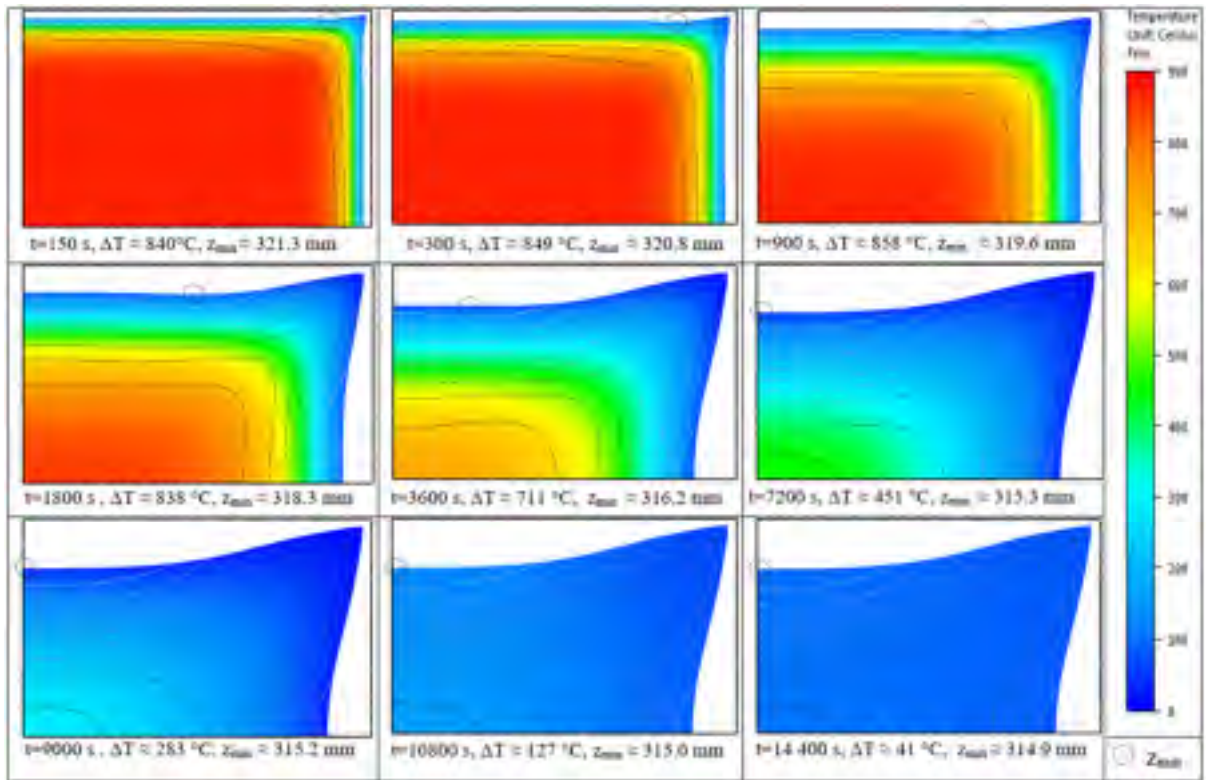


Figure 6-13. Evolution of (x_0, z_0) cross-section volume change superimposed with temperature evolution.

6.4.2.2 Experimental validation of predicted distortions

The reconstructed shape after the heat treatment was used for the evaluation of thickness changes. As shown in Figure 6-14.b), a coordinate grid (14×12) was extracted from the upper ($z_+(x, y)$) and bottom ($z_-(x, y)$) surfaces to be analyzed in MATLAB in order to model thickness change, $z_{thickness} = (z_+ - z_-)$ along x-y plane. The results obtained, reported in Figure 6-14.a, show that the maximum thickness change reaches almost 630 mm in the center of the block,

corresponding to a thickness reduction of about 15.2 mm, as compared to the nominal thickness, $z_0 = 645 \text{ mm}$. However, the apex was not positioned exactly at the center of the block (as predicted by simulation results shown in Figure 6-12), but rather, was shifted by 100 mm in the y_0 -direction, and tilted about 5.3° . The positioning deviation observed between experimental measurements and the simulation results could be explained by the imperfection of the initial shape, which was considered perfectly prismatic, as well as the homogenous heat transfer at all faces for the simulation purposes.

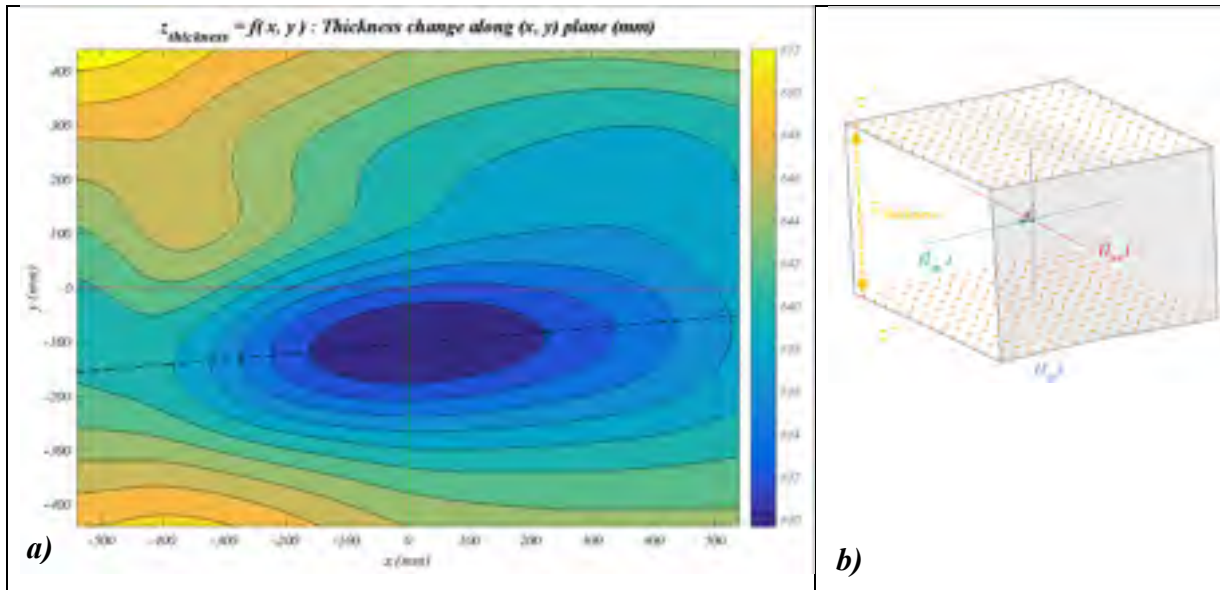


Figure 6-14. **a)** Thickness change ($z_{thickness}$) after hardening as a function of (x, y) coordinates, **b)** Data extraction procedures from the reconstructed block.

Figure 6-15 shows a comparison between the thickness reduction ($\Delta z = z_{thickness} - z_0$) calculated by the FEM model at $y = 0$ and the measured one at the indicated cross-section in Figure 6-14 (black dashed line). It is important to mention that the simulation was forced to continue for air cooling after 14,400s to vanish the existing ΔT as much as possible, from 41°C to 7.5°C (after 45,000s). This was done with the aim of analyzing the final shape state with a uniform temperature. The thickness deviation predicted by simulation using experimental data followed a trend similar to the experimental observations. The maximum thickness reduction was accurately predicted versus the measured one, with a deviation of about 0.5 mm. As mentioned above, the measured distortion was not perfectly symmetrical, which explains the slight

difference in the results on the right part of the block. It must also be emphasized that considering the large size of the block, particularly its thickness, it is reasonable to assume that some microstructural heterogeneity (e.g., macro-segregation, grain size variation, etc.) may exist within the block, and as such, the block may not be symmetrical as well, which may influence the distortion level for each face.

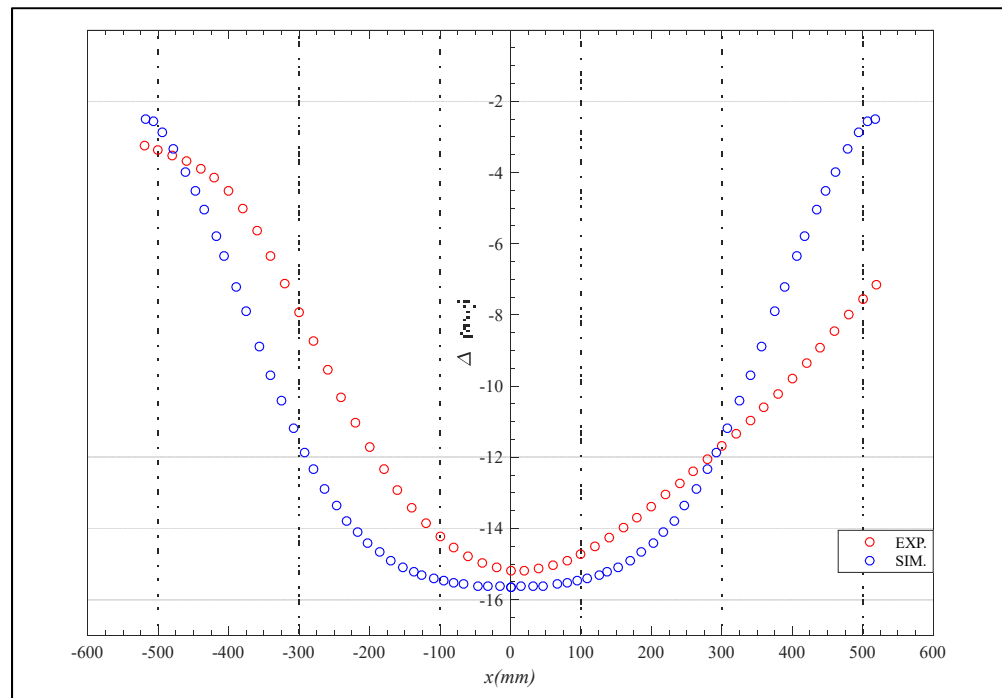


Figure 6-15. Thickness reduction, Δz : Comparison between the measured and the simulated values.

6.4.3 Residual stresses

The final state of Von Mises residual stresses calculated after quench could be directly linked to the superposition of thermal and transformational effects. Figure 6-16 shows that the most critical residual stresses are generally located in the center region of surfaces, with the maximum magnitude of residual stress at the level of the smaller surfaces. This could be explained by the fact that the smaller surfaces are cooled faster than the larger ones (as reported in Figure 6-11.a), which results in higher thermal stresses and an increase in the Von Mises stress for the smaller surfaces. In the same figure, it can be seen that the surface in the thickness

direction experienced the maximum deformation, as compared to other surfaces. This higher plastic deformation is probably what mainly accounts for the magnitude of the reduction of residual stresses observed on these surfaces (Lübben et al., 2014).

The maximum level of residual stress was reached at around 1794 MPa, which exceeds the martensite yield stress at room temperatures (1650 MPa), thus indicating the possibility of cracking. The stress-strain curve of martensite at room temperature shown in Figure 8.c) demonstrates that the martensite phase is able to resist stresses up to 2350 MPa, which could mean that the stresses experienced at the surface, even when they exceed the yield stress of martensite, could be absorbed via plastic deformations. Furthermore, at the surface level, the principal stress components, S_{33} and S_{22} , show negative values at the center, while S_{11} was positive and localized near the edges. Thus, the distribution of the Von Mises residual stress and that of the principal stress, S_{33} , could be correlated, indicating that the external layers at the surface level experienced high compressive stresses, while the rest of the block was under low tensile stresses to balance this effect (S. H. Kang & Y. T. Im, 2007). The formation of the compressive stresses near the surface regions are considered beneficial as they increase the service life of the forgings (Lübben et al., 2014).

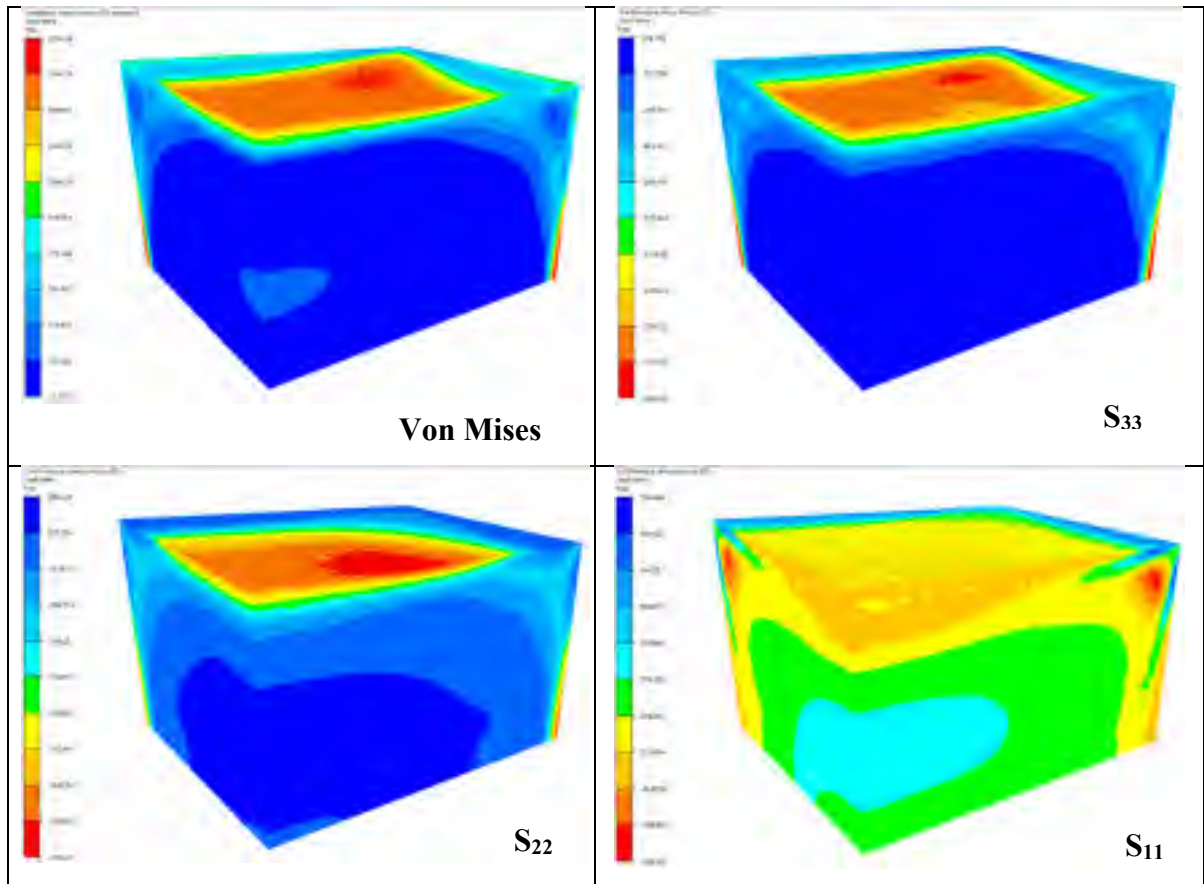


Figure 6-16. Distribution of residual stresses at the end of the quench process.

6.5 Conclusions

FEM modeling supported by experimental validation was used to investigate the distortion and residual stress distribution during water quenching of a large size forged steel block. The following conclusions can be drawn from the present study:

1. A methodology was proposed for reliable measurement of quench induced distortions of large size forged blocks and a good agreement was obtained with FEM predictions.
2. The distortion is mainly driven by the volume expansion coefficient, the volume change due to phase transformation and the TRIP effect. These quantities significantly influence the estimation of strains and displacements.

3. The quality of experimental data coming from dilatometry tests plays an essential role in the accurate distortion prediction by the FEM model.
4. The distortion trend as well as the maximum thickness reduction at the center of the block was predicted with enough precision for industrial application.

Considering that the experimental validation of the predicted residual stresses was not possible due to the large size of the block (danger: possibility of crack during measurement operations), the estimated values for residual stresses could be considered reasonable due to the accuracy of flow stress determination for each phase.

Further research needs to look at the heterogeneity of the cooling rate experienced by each face and further, to consider the material's orthotropic character and its impact on simulations.

Acknowledgement

This project was realized in collaboration with Finkl Steel-Sorel. A portion of the grant used for this collaboration was supported by MITACS (IT03151), which is gratefully acknowledged. The authors are also very grateful to Finkl Steel, especially the R&D and Engineering departments, for providing the large size block, as well as the instrumentation and measurements used in the present research.

CONCLUSION

La méthodologie développée en combinant un réseau de neurones (ANN) avec le modèle éléments finis (MEF) dans la première partie du manuscrit a permis d'identifier un modèle récursif du coefficient de transfert thermique durant la trempe à l'eau d'une brame de taille industrielle. La fiabilité de la forme générale du modèle HTC prédit a été aussi démontrée par la bonne prédiction de l'évolution de la température pour une autre brame par l'adaptation du HTC avec l'un des coefficients de transferts thermiques déjà utilisés pour l'entraînement du réseau de neurones pour la zone de convection.

La stratégie suivie pour la préparation de données fiables pour la simulation a contribué significativement à l'amélioration des résultats de prédictions, vu leurs disparités avec les bases de données disponibles consultées. La concordance des résultats expérimentaux obtenus pour les propriétés thermophysiques avec les prédictions du logiciel JMatPro® a permis de bien justifier l'utilisation des données calculées par ce dernier pour un ensemble de propriétés nécessaires pour la simulation de la trempe.

Il s'est avéré que la modélisation de la trempe de brames de taille industrielle nécessite beaucoup plus de précision en termes de connaissance de cinétiques de transformation, ceci peut être traduit par l'acquisition de diagramme de transformations (TTT/ TRC) fiables, qui sont aussi capables d'accompagner la précision recherchée. L'optimisation du diagramme (TTT), s'est basée essentiellement sur les paramètres de transformations de l'acier étudié tels que sa trempabilité et ses températures spécifiques de transformations. En réalité les modèles de diagrammes de transformations de phases existantes, ne sont pas capables de prédire la baisse de la température M_s pour les temps de refroidissement longs, comme c'est le cas de brames forgées de grandes tailles; cette imprécision pourra influencer la prédiction de la distribution des phases à la fin de la trempe.

La considération de ce type de détails métallurgiques de l'acier étudié a permis de générer un modèle éléments finis capable de prédire avec une bonne précision l'évolution de la décomposition des phases après la trempe. La confirmation de ces prédictions a été validée expérimentalement.

L'existence d'une quantité plus élevée de bainite transformée dans la région du quart de la brame par rapport à celle du centre, a été confirmée par l'analyse des courbes dilatométriques, en plus des observations microscopiques et les mesures de dureté.

La conclusion établie par rapport à cette observation, repose sur la nature des courbes de refroidissement établi dans la région du quart de la brame (influencées par les conditions du transfert thermique), et qui se caractérisent par des vitesses de refroidissement faibles favorisant des durées d'incubation plus longues dans les régimes de température favorables à la transformation bainitique (entre B_s et M_s').

En utilisant des vitesses de refroidissement constantes, les essais sur dilatomètre ont permis aussi de calculer les coefficients d'expansion thermique pour l'ensemble des phases présentes, mais surtout de distinguer entre celui de la martensite et celui de la bainite qui sont souvent considérés similaires dans la littérature. Une remarque semblable a été formulée, concernant le calcul du changement de volume dû à la transformation de phase.

Les essais mécaniques sur la machine Gleeble ® 3800TM à différentes températures pour les différentes phases présentes a permis d'identifier les paramètres thermoélastiques réels de chacune des phases en fonction de la température tels que le module de Young, la limite élastique, mais plus particulièrement, la contrainte d'écoulement qui s'est avérée différente des prédictions du logiciel JMatPro®. Les changements de volume mesurés pour la bainite et la martensite combinée avec l'évolution de la limite élastique de l'austénite, ont permis aussi de calculer de manière semi-empirique l'évolution du coefficient de plasticité de transformation (TRIP) en fonction de la température pour les deux phases présentes soit la martensite et la bainite.

Cette approche a facilité la détermination expérimentale de tous les paramètres impliqués dans la formulation des différentes sous composantes sommatives dans le tenseur de la déformation totale, ce qui a amélioré par la suite la prédiction de la distorsion. La méthodologie utilisée pour mesurer la distorsion a pu confirmer la capacité du modèle éléments finis à prédire sa sévérité et les tendances de la distorsion.

Il est à noter que la mesure directe des contraintes résiduelles au niveau de la brame après la trempe a été sujette à des limitations d'ordres techniques et sécuritaires ; la mesure nécessite

la disponibilité d'un équipement spécialisé sur le site, mais aussi d'une préparation de la surface dépendamment de la méthode de mesure (décapage de surface, nettoyage, perçage...etc.), ce qui pourrait exposer l'expérimentateur à des risques sérieux comme l'explosion de la brame durant la manipulation et de mesure. Néanmoins, on peut conclure que les contraintes résiduelles calculées sont prédites de manière raisonnable en s'appuyant sur la bonne prédiction de la distorsion, la fiabilité des lois rhéologiques produites de manière expérimentale ainsi que l'ensemble des paramètres générés pour les calculs mécaniques, vu le fort couplage existant entre le tenseur de déformations et de contraintes.

Finalement, la méthodologie suivie pour la construction du modèle MEF a permis de prédire le comportement de l'ensemble des domaines physiques impliqués dans la modélisation de la trempe.

RECOMMANDATIONS

Le niveau de précision obtenu par les prédictions du modèle EF à l'échelle industrielle, pourra être transféré à l'entreprise partenaire afin de l'exploiter comme un outil prédictif pour le contrôle et l'optimisation du procédé de la trempe surtout pour des grades d'acier similaires. Il servira aussi comme outil d'aide à la décision avec de légères adaptations pour la conception de cycles thermiques à de nouveaux produits.

L'ensemble de résultats obtenus en utilisant les techniques et méthodologies suivies dans le cadre de ce travail de thèse, encouragent à transposer la même approche vers d'autres procédés thermomécaniques qui utilisent la transformation de phase (soudage, laminage à chaud, forgeage à chaud, induction magnétique...etc.).

La simulation de la trempe, implique l'intégration d'un très grand nombre de paramètres (matériaux, ou procédés). Cependant l'influence de ces facteurs sur la réponse du modèle MEF (thermique, métallurgique ou mécanique), n'est pas clairement quantifiée dans le cas industriel, d'où la nécessité de réaliser une étude approfondie visant à hiérarchiser la sensibilité des paramètres de simulations par rapport à leurs impacts sur la réponse du modèle MEF.

Bien que la modélisation des cinétiques des transformations soit basée sur les modèles diffusifs de JMAK et/ou displacifs de K-M, l'efficacité de l'approche a bien été démontrée. Cependant, il existe plusieurs adaptations ou modifications de ces dits modèles qui peuvent être considérés de manière personnalisée pour améliorer l'évolution de la prédiction des cinétiques de transformation de phase.

Dans les cas où la simulation devient très sensible aux diagrammes de phases utilisés, il faut penser à développer, et implémenter dans les modèles EF, les éléments nécessaires qui sont capables d'accompagner la précision recherchée ; par exemple, suivre de manière continue la baisse de la température de transformation martensitique en fonction du refroidissement, pour améliorer les prédictions de la distribution de phases.

Il s'est avéré que, le domaine thermique est altéré durant la génération de la chaleur latente due à la transformation de phase, quand cette dernière est imprécise, ceci résulte d'un déséquilibre thermique dans la brame. La complexité de l'estimation de la libération de la chaleur latente durant la trempe surtout dans le cas des produits de massifs ($Bi \gg 1$) réside dans le fait que ce paramètre pourra être assimilé à une succession de sources de chaleur mobiles dans la pièce sous forme de surfaces tridimensionnelles. Les paramètres qui déterminent leurs vitesses dépendent principalement des conditions de transfert thermique (conditions de refroidissement) et de la nature et de la cinétique de transformation des phases (quantité de chaleur latente libérée ...etc.). Développer une méthodologie efficace pour l'estimation de la chaleur latente, en utilisant par exemple une méthode numérique inverse appliquée sur un modèle réduit (MEF), pour améliorer les prédictions de la température par la suite.

Une des simplifications les plus répondues c'est de considérer des modèles rhéologiques isotropes pour représenter la réponse mécanique d'un matériau suite à une excitation, et en conclure que la réaction sera similaire indépendamment de l'orientation dans l'espace.

Cependant dépendamment de l'historique des procédés (coulée en lingotière, laminage, forgeage... etc.) que le matériau a pu subir avant traitement thermique; il est possible que le matériau présente des comportements différents dépendamment des directions choisies ce qui augmentera davantage le coût de la partie expérimentale.

Dans le cas du la brame industrielle instrumentée la déviation de la composition chimique était négligeable, justifiant ainsi que le matériau peut être considéré homogène. Cependant pour des épaisseurs très larges et des longueurs réelles (3m et plus) la présence des hétérogénéités au niveau de la microstructure et de la composition chimique est inévitable. Dans ce cas la variation de la composition chimique doit être prise en compte surtout pour le calcul des propriétés mécaniques des phases et son influence sur la distorsion et les contraintes résiduelles. Finalement, il sera important d'étudier l'effet du refroidissement hétérogène (par zones) subi dans des blocs de tailles industrielles et son impact sur le coefficient du transfert de chaleur par région, puis estimer son influence sur les distorsions et contraintes résiduelles.

ANNEXE I

Modèle de JMAK : Concept du volume excédentaire

Kolmogorov, Johnson, Mehl et Avrami proposent le concept de volume excédentaire
Le formalisme d'Avrami implique les différentes hypothèses suivantes (Aliaga, 2000):

- L'hypothèse iso cinétique : invariabilité du quotient de la vitesse de germination et la vitesse de croissance par rapport à la température.
- L'hypothèse de la germination instantanée: les germes récemment nucléés provoquent une saturation des sites.
- L'hypothèse du volume infini : qui stipule que le volume de la phase mère (austénite) est supposé infini devant celui de la phase fille (phase transformée).

En utilisant des modèles de croissance et de nucléation, le volume excédentaire V_e^α s'écrit comme suit :

$$dV^\alpha = \left(1 - \frac{V^\alpha}{V}\right) dV_e^\alpha \quad (6-1)$$

avec V^α le volume d'une phase α nouvellement nucléé et V le volume total (phase mère + phase α).

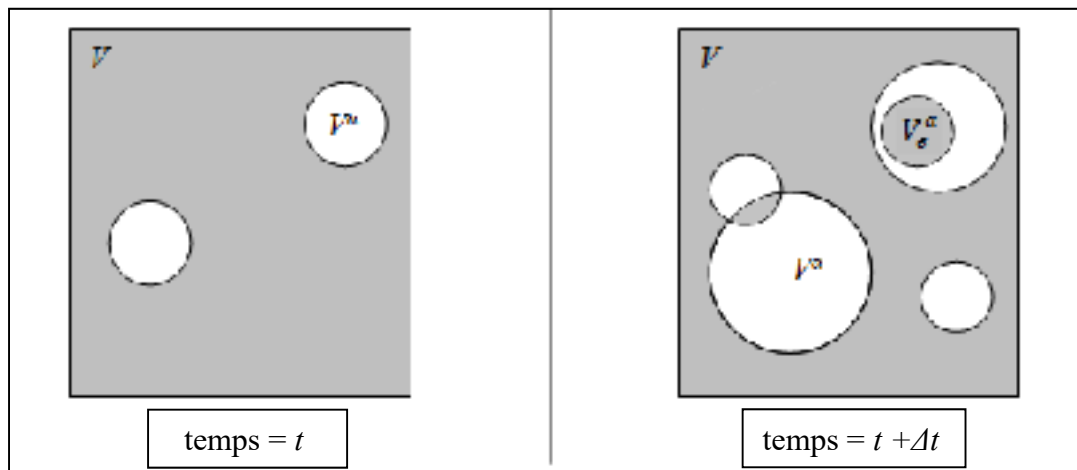


Figure 6-17. Illustration du concept du volume excédentaire après germination en temps t et croissance en $t + \Delta t$

Pour des raisons de simplification, la phase α est considérée croître d'une manière isotrope avec une vitesse constante G et I_V est le taux de nucléation par unité de volume.

Le volume de la phase nucléé à un instant $t = \tau$ est donné par : $\vartheta_\tau = \frac{4}{3}\pi G^3(t - \tau)^3$

La variation du volume excédentaire entre τ et $\tau + d\tau$:

$$dV_e^\alpha = \frac{4}{3}\pi G^3(t - \tau)^3 \times I_V \times V \times d\tau \quad (6-2)$$

En substituant le volume excédentaire V_e^α dans l'équation précédente, on aura :

$$dV^\alpha = \left(1 - \frac{V^\alpha}{V}\right) \times \frac{4}{3}\pi G^3(t - \tau)^3 \times I_V \times V \times d\tau \quad (6-3)$$

Finalement, la fraction volumique $\xi = \frac{V^\alpha}{V}$ prendra la forme suivante :

$$\xi = 1 - \exp\left\{-\frac{\pi G^3 I_V t^4}{3}\right\} \quad (6-4)$$

Cette équation est obtenue selon des hypothèses spécifiques : nucléation aléatoire, taux de nucléation constant et une vitesse de croissance constante. Il existe différentes conditions qui réduisent souvent cette équation à la forme générale suivante (Bhadeshia, 2001):

$$\xi = 1 - \exp\{-k_A t^n\} \quad (6-5)$$

ANNEXE II

Schéma d'intégration temporelle

Un schéma temporel d'intégration à trois temps est implémenté dans le logiciel Forge Nxt 1.1. un instant t^* peut être formulé en fonction des instants t_{n-1} , t_n et t_{n+1} comme suit (Pelissou, 2005):

$$t^* = \alpha_1 t_{n-1} + \alpha_2 t_n + \alpha_3 t_{n+1} \quad (6-6)$$

La température à l'instant t^* peut s'écrire aussi de la même manière :

$$T^* = \alpha_1 T_{n-1} + \alpha_2 T_n + \alpha_3 T_{n+1} \quad (6-7)$$

$$\frac{\partial T^*}{\partial t} = \frac{\beta_1 T_{n-1} + \beta_2 T_n}{\Delta t_1} + \frac{\gamma_1 T_n + \gamma_2 T_{n+1}}{\Delta t_2} \quad (6-8)$$

Avec $\Delta t_1 = t_n - t_{n-1}$ et $\Delta t_2 = t_{n+1} - t_n$,

Les conditions d'une dérivée temporelle, $\frac{\partial T^*}{\partial t}$ sont satisfaites si :

$$\gamma_1 = -\gamma_2 \text{ et } \beta_1 = -\beta_2 = \gamma_2 - 1 \text{ avec } \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 1$$

Donc

$$\frac{\partial T^*}{\partial t} = (1 - \gamma_2) \frac{T_{n-1} - T_n}{\Delta t_1} + \gamma_2 \frac{T_n - T_{n+1}}{\Delta t_2} \quad (6-9)$$

Finalement l'équation (3-7) pour s'écrire de la manière suivante :

$$[C^*] \left\{ \frac{\partial T^*}{\partial t} \right\} + ([K^*] + [H^*]) \{T^*\} = \{Q^*\} \quad (6-10)$$

$$M^* = \alpha_1 M_{n-1} + \alpha_2 M_n + \alpha_3 M_{n+1} \quad (6-11)$$

Avec M^* peut représenter les matrices de conduction, convection ou le vecteur de charge.

Finalement

$$[C^*] \left\{ (1 - \gamma_2) \frac{T_{n-1} - T_n}{\Delta t_1} + \gamma_2 \frac{T_n - T_{n+1}}{\Delta t_2} \right\} + ([K^*] + [H^*]) \{ \alpha_1 T_{n-1} + \alpha_2 T_n + \alpha_3 T_{n+1} \} = \{Q^*\} \quad (6-12)$$

La nécessité d'avoir un schéma inconditionnellement stable et consistant du second ordre, exige la satisfaction des conditions suivantes:

$$\begin{cases} \alpha_2 = 1 - \alpha_1 + \left(\frac{1}{2} - \alpha_1\right) \frac{\Delta t_1}{\Delta t_2} - \frac{\gamma_2}{2} \left(1 + \frac{\Delta t_1}{\Delta t_2}\right) & / \text{ consistance} \\ \alpha_3 = \left(\alpha_1 - \frac{1}{2}\right) \frac{\Delta t_1}{\Delta t_2} + \frac{\gamma_2}{2} \left(1 + \frac{\Delta t_1}{\Delta t_2}\right) & / \text{ consistance} \\ \gamma_2 \geq \frac{1}{2} \text{ et } \alpha_1 > (1 - \gamma_2) & / \text{ stabilité} \end{cases} \quad (6-13)$$

Le tableau suivant présente les valeurs que prennent les différents coefficients $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ et γ_2 en fonction du schéma numérique choisi.

Tableau 6-2. Schémas d'intégration utilisés

	α_1	α_2	α_3	γ_2
Crank-Nicholson	0	0.5	0.5	1
Dupont	0.25	0	0.75	1

LISTE DE RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- Alexey V. Sverdlin , A. R. N. (2006). Fundamental Concepts in Steel Heat Treatment. Dans *Steel Heat Treatment: Metallurgy and Technologies* Taylor & Francis. Repéré à http://books.google.ca/books?id=_WkyJv9MOpEC
- Ali, S. K. (2009). *An Online Input Estimation Algorithm For A Coupled Inverse Heat Conduction-Microstructure Problem*.
- Aliaga, C. (2000). *Simulation numérique par élément finis en 3D du comportement thermomécanique au cours du traitement thermique d'aciers : Application a la trempe de pieces forgées ou coulées* (Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris).
- Anca, A. A. (2008). *Computer Simulation Of Steel Thermomechanical Processes At High Temperatures* (Universidad Nacional Del Litoral).
- Anil Kumar Sinha, B. P. D. (1991). Defects and Distortion in Heat-Treated Parts. Dans *ASM Handbook, Volume 04 - Heat Treating* (pp. 601-619). ASM International. Repéré à <http://app.knovel.com/hotlink/toc/id:kpASMHVHT3/asm-handbook-volume-04/asm-handbook-volume-04>
- Antonio Augusto Gorni , S. V. (2012). *Steel Forming And Heat Treating Handbook*.
- Araki, K., Yuasa, T., & Tamura , Y.-T. (2013). *Heat-Treated Steel Plates with Heavy Section and Large Product Weight* (n° 18). JFE Steel.
- Arimoto, K., Jin, C., Tamura, S., Funatani, K., & Tajima, M. (2004). Verification of Inverse Quench-Hardening Phenomena in Bearing Steel Specimens by Experiment and Computer Simulation. *Cailiao Rechuli Xuebao/Transactions of Materials and Heat Treatment*, 25.
- Aronov, M., Kobasko, N., & Powell, J. (2005). *Industrial-Scale Intensive Quenching Process for Tool Products Commercialization*.
- ASM-International-Handbook-Committee. (1991). *ASM Handbook , Heat Treating* (Vol. 04). ASM International. Repéré à <http://app.knovel.com/hotlink/toc/id:kpASMHVHT3/asm-handbook-volume-04/asm-handbook-volume-04>
- Azizi, S., & Ahmadloo, E. (2016). Prediction of heat transfer coefficient during condensation of R134a in inclined tubes using artificial neural network. *Applied Thermal Engineering*, 106, 203-210. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2016.05.189>. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359431116308687>

- Babu, K., & Kumar, T. P. (2014). Comparison of austenite decomposition models during finite element simulation of water quenching and air cooling of AISI 4140 steel. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 45(4), 1530-1544.
- Babu, S. (2007). Classification and mechanisms of steel transformation. *Steel Heat Treatment: Metallurgy and Technologies*, 2nd edn., ed. by G. Totten (CRC Press, Taylor and Francis Group, New York, 2007), 91-118.
- Barbero, B. R., & Ureta, E. S. (2011). Comparative study of different digitization techniques and their accuracy. *Computer-Aided Design*, 43(2), 188-206. doi: <https://doi.org/10.1016/j.cad.2010.11.005>. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010448510002150>
- Beale, M. H., Hagan, M. T., & Demuth, H. B. (1992). *Neural Network Toolbox™ User's Guide*.
- Beaudet, F. (2009). *Amélioration de la trempabilité de l'acier SF2050 par l'ajout de Vanadium* (UNIVERSITÉ LAVAL).
- Beaudet, F., Blais, C., Lehu, H., Voyzelle, B., L'espérance, G., Masse, J.-P., & Krishnadev, M. (2012). Improvement of hardenability and static mechanical properties of P20+ 0.5 Ni mold steel through additions of vanadium and boron. *ISIJ International*, 52(3), 424-433.
- Ben Fredj, E. (2019). *Évolution de la microstructure des aciers à haute résistance mécanique durant le traitement thermique de trempe* (École de technologie supérieure, Montréal).
- Ben Fredj, E., Nanesa, H. G., Shahriari, D., Morin, J.-B., & Jahazi, M. (2017). Effect of Cooling Rate on Phase Transformation and Microstructure Evolution in a Large Size Forged Ingot of Medium Carbon Low Alloy Steel. Dans (pp. 413-423). Springer International Publishing.
- Bhadeshia, H. K. D. H. (2001). *Bainite in Steels: Transformations, Microstructure and Properties*. IOM Communications. Repéré à <https://books.google.ca/books?id=sF5RAAAAMAAJ>
- Boniardi, M., Guagliano, M., Casaroli, A., Andreotti, R., & Ballerini, F. (2014). Large Forgings: Microstructural Evolution and Residual Stresses Due to Quenching Treatments—A Combined Numerical and Experimental Approach. *Materials Performance and Characterization*, 3(4), 118–136. doi: 10.1520/MPC20130089
- Bouissa, Y., Shahriari, D., Champlaud, H., & Jahazi, M. (2019). Prediction of heat transfer coefficient during quenching of large size forged blocks using modeling and experimental validation. *Case Studies in Thermal Engineering*, 13, 100379. doi:

<https://doi.org/10.1016/j.csite.2018.100379>. Repéré à
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2214157X18302946>

- Braz Fernandes, F., Denis, S., & Simon, A. (1985). Mathematical model coupling phase transformation and temperature evolution during quenching of steel. *Materials Science and Technology*, 1, 838-844. doi: 10.1179/026708385790123991
- Buchmayr, B., & Kirkaldy, J. S. (1990). Modeling of the temperature field, transformation behavior, hardness and mechanical response of low alloy steels during cooling from the austenite region. *Journal of Heat Treating*, 8(2), 127-136. doi: 10.1007/BF02831633. Repéré à <http://dx.doi.org/10.1007/BF02831633>
- Caballero, F., Santofimia, M., Garcia-Mateo, C., & García de Andrés, C. (2004). Time-Temperature-Transformation Diagram within the Bainitic Temperature Range in a Medium Carbon Steel. *Materials Transactions*, 45, 3272-3281. doi: 10.2320/matertrans.45.3272
- Çakir, M., & Özsoy, A. (2011). Investigation of the correlation between thermal properties and hardenability of Jominy bars quenched with air–water mixture for AISI 1050 steel. *Materials & Design*, 32(5), 3099-3105. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.matdes.2010.12.035>. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0261306910007636>
- Cao, P.-z., Liu, G.-z., & Wu, K. (2013). Study of heat treatment parameters for large-scale hydraulic steel gate track. *Water Science and Engineering*, 6(4), 423-432. doi: <http://dx.doi.org/10.3882/j.issn.1674-2370.2013.04.006>. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1674237015302568>
- Cao, P., Liu, G., & Wu, K. (2012). Numerical simulation and analysis of heat treatment of large-scale hydraulic steel gate track. *International Journal of Material and Mechanical Engineering*, 1, 16-20.
- Cardinaux, D. (2008). *Étude et modélisation numérique 3D par éléments finis d'un procédé de traitement thermique de tôles embouties après chauffage par induction : application à un renfort de pied central automobile* (Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris).
- Casotto, S., Pascon, F., Habraken, A. M., & Bruschi, S. (2005). Thermo-mechanical-metallurgical model to predict geometrical distortions of rings during cooling phase after ring rolling operations. *International Journal of Machine Tools and Manufacture*, 45(6), 657-664. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijmachtools.2004.10.007>. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S089069550400255X>
- Cengel, Y. A. (2002). *Heat Transfer: A Practical Approach 2nd Edition*.

- Chadha, K., Shahriari, D., & Jahazi, M. (2016). Constitutive modelling of ingot breakdown process of low alloy steels. *Int. J. Ital. Assoc. Metall*, 4, 5-12.
- Chen, X. L. (1998). *Computer simulation of the thermal-mechanics of steel quenching* (Oregon Graduate Institute of Science and Technology).
- Cheng, L., Liwen, Z., Zhang, Q. a., Quying, Z., & Zhaokun, W. (2006). Numerical Simulation and Technological Parameter Optimization for Quenching Process of a Gas Turbine Compressor Disk Based on Metallo-Thermo-Mechanics. *J. Mater. Sci. Technol.*, 22(06), 860-864. Repéré à {http://www.jmst.org/CN/abstract/article_7985.shtml}
- Chentouf, S. M., Jahazi, M., Lapierre-Boire, L.-P., & Godin, S. (2014). Characteristics of Austenite Transformation During Post Forge Cooling of Large-Size High Strength Steel Ingots. *Metallography, Microstructure, and Analysis*, 3(4), 281-297. doi: 10.1007/s13632-014-0142-8. Repéré à <http://dx.doi.org/10.1007/s13632-014-0142-8>
- Choudhary, B. K., Samuel, E. I., Bhanu Sankara Rao, K., & Mannan, S. L. (2001). Tensile stress-strain and work hardening behaviour of 316LN austenitic stainless steel. *Materials Science and Technology*, 17(2), 223-231. doi: 10.1179/026708301101509890. Repéré à <https://doi.org/10.1179/026708301101509890>
- Cochet, J., Thuillier, S., Loulou, T., Decultot, N., Carré, P., & Manach, P.-Y. (2017). Heat treatment of 34CrNiMo6 steel used for mooring shackles. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 91(5), 2329-2346. doi: 10.1007/s00170-016-9951-z. Repéré à <https://doi.org/10.1007/s00170-016-9951-z>
- Dalgic, M., Irretier, A., Zoch, H.-W., & Lowisch, G. (2008). Transformation plasticity at different phase transformation of a through hardening bearing steel. *International Journal of Microstructure and Materials Properties*, 3. doi: 10.1504/IJMMP.2008.016943
- Davis, J. R. (1998). Basic Principles and Design Guidelines for Heat Treating of Steel. Dans J. R. Davis (Éd.), *Metals Handbook Desk Edition* (pp. 961-970). ASM International. doi: 10.31399/asm.hb.mhde2.a0003195. Repéré à <https://doi.org/10.31399/asm.hb.mhde2.a0003195>
- de Oliveira, W. P., Savi, M. A., & Pacheco, P. M. C. L. (2013). Finite element method applied to the quenching of steel cylinders using a multi-phase constitutive model. *Archive of Applied Mechanics*, 83(7), 1013-1037. doi: 10.1007/s00419-013-0733-x. Repéré à <https://doi.org/10.1007/s00419-013-0733-x>
- Dean, S., Kobasko, N., Aronov, M., & Powell, J. (2009). One More Discussion “What is Intensive Quenching Process?”. *Journal of ASTM International*, 6. doi: 10.1520/JAI101792

- Denis, S. (1997). Considering Stress-Phase Transformation Interactions in the Calculation of Heat Treatment Residual Stresses. Dans M. Berveiller & F. D. Fischer (Éds.), *Mechanics of Solids with Phase Changes* (Vol. 368, pp. 293-317). Springer Vienna. doi: 10.1007/978-3-7091-2660-8_10. Repéré à http://dx.doi.org/10.1007/978-3-7091-2660-8_10
- Dong-li Song , J. G., Jiansheng Pan , Xin Yao. (2006). Design of Quenching Process for Large-sized AISI P20 Steel Block Used as Plastic Die. *Journal of Materials Science & Technology*.
- Dung-An Wang. (2013). Computational Modeling of a Jominy Test *Proceedings of the 29th National Conference on Mechanical Engineering of CSME, December 6-7, 2013, I-Lan, Taiwan*.
- Evci, G. E., Mustak, O., & Şimşir, C. (2016). Simulation of through-hardening of SAE 52100 steel bearings – Part II: Validation at industrial scale. *Materialwissenschaft und Werkstofftechnik*, 47(8), 746-754. doi: 10.1002/mawe.201600608. Repéré à <http://dx.doi.org/10.1002/mawe.201600608>
- Felde, I., & Réti, T. (2010). Evaluation Of Hardening Performance of Cooling Media by Using Inverse Heat Conduction Methods and Property Prediction. *Strojnicki Vestnik/Journal of Mechanical Engineering*, 56.
- Felde, I., Szénási, S., Kenéz, A., Wei, S., & Colas, R. (2015a). Determination of complex thermal boundary conditions using a Particle Swarm Optimization method. Dans *5th International Conference on Distortion Engineering* (pp. 227-236).
- Felde, I., Szénási, S., Kenéz, A., Wei, S., & Colas, R. (2015b). *Determination of complex thermal boundary conditions using a Particle Swarm Optimization method* présentée à IDE- International Conference on Distortion Engineering, Bremen.
- Ferguson, B. L., Li, Z., & Freborg, A. M. (2014). Characterizing Water Quenching Systems with a Quench Probe. *Journal of Materials Engineering and Performance*, 23(12), 4197-4201. doi: 10.1007/s11665-014-1276-1. Repéré à <http://dx.doi.org/10.1007/s11665-014-1276-1>
- Firrao, D., Matteis, P., Scavino, G., Ubertalli, G., Ienco, M. G., Pinasco, M. R., . . . Ghidini, A. (2007). Relationships between tensile and fracture mechanics properties and fatigue properties of large plastic mould steel blocks. *Materials Science and Engineering a-Structural Materials Properties Microstructure and Processing*, 468, 193-200. doi: 10.1016/j.msea.2006.07.166. Repéré à <Go to ISI>://WOS:000250278600027
- FORGE@NXT. <http://www.transvalor.com/en/cmspages/traitement-thermique.62.html>. Repéré

- Franz, C., Besserlich, G., Schulze, V., Müller, H., & Löhe, D. (2005). Influence of Transformation Plasticity on Residual Stresses and Distortions due to the Heat Treatment of Steels with Different Carbon Content. *Materials Science Forum - MATER SCI FORUM*, 490-491, 47-52. doi: 10.4028/www.scientific.net/MSF.490-491.47
- Frerichs, F., & Lübken, T. (2014). *Simulation of Shell Hardening of Unalloyed Steel Cylinders Due to High Speed Quenching*.
- Geijselaers, H. (2003). *Numerical Simulation of Stresses due to Solid State Transformations : The Simulation of Laser Hardening*.
- Goulas, C., Mecozzi, M. G., & Sietsma, J. (2016). Bainite Formation in Medium-Carbon Low-Silicon Spring Steels Accounting for Chemical Segregation. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 47(6), 3077-3087. doi: 10.1007/s11661-016-3418-6. Repéré à <https://doi.org/10.1007/s11661-016-3418-6>
- Grajcar, A., Skrzypczyk, P., & Kozłowska, A. (2018). Effects of Temperature and Time of Isothermal Holding on Retained Austenite Stability in Medium-Mn Steels. *Applied Sciences-Basel*, 8(11). doi: ARTN 2156 10.3390/app8112156. Repéré à <Go to ISI>://WOS:000451302800146
- Guo, Z., Saunders, N., Miodownik, A. P., & Schillé, J.-P. (2013). Introduction of materials modelling into processing simulation—towards true virtual design and simulation. *International Journal of Metallurgical Engineering*, 2(2), 198-202.
- Guo, Z., Saunders, N., Miodownik, P., & Schillé, J.-P. (2009). Modelling phase transformations and material properties critical to the prediction of distortion during the heat treatment of steels. *International Journal of Microstructure and Materials Properties*, 4(2), 187-195.
- Guo, Z., Saunders, N., Miodownik, P., & Schille, J. (2009). Modelling phase transformations and material properties critical to the prediction of distortion during the heat treatment of steels. *International Journal of Microstructure and Materials Properties*, 4. doi: 10.1504/IJMMP.2009.028632
- Guo, Z., Saunders, N., Schillé, J. P., & Miodownik, A. P. (2009). Material Properties For Process Simulation. *Materials Science and Engineering: A*, 499(1-2), 7-13. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.msea.2007.09.097>. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0921509308006047>
- Gustavo Sánchez, S. M. V., Bongiovanni. (2009). Modeling of Case Hardening. Dans C. P. T. F. Group (Éd.), *Handbook of Thermal Process Modeling of Steels*.

- Guy, M. (1998). Transformations dans les aciers. *Techniques de l'ingénieur Traitements thermiques des métaux : généralités, base documentaire : TIB500DUO*(ref. article : m1115). Repéré à <http://www.techniques-ingenieur.fr/base-documentaire/materiaux-th11/traitements-thermiques-des-metaux-generalites-42500210/transformations-dans-les-aciers-m1115/>
- Guy, M. (2000). Traitements thermiques dans la masse des aciers. Partie 1. *Techniques de l'ingénieur Traitements thermiques des aciers, des alliages et des fontes, base documentaire : TIB364DUO*(ref. article : m1126). Repéré à <http://www.techniques-ingenieur.fr/base-documentaire/materiaux-th11/traitements-thermiques-des-aciers-des-alliages-et-des-fontes-42364210/traitements-thermiques-dans-la-masse-des-aciers-partie-1-m1126/>
- Guzzetta, G. (2013). Relating Deformation and Thermodynamics: An Opportunity for Rethinking Basic Concepts of Continuum Mechanics. *Entropy, Entropy*, 2548-2569. doi: 10.3390/e15072548
- H.K.D.H.Bhadesha. (2001). Bainite in steels
- Hans M. Tensi, A. S., George E. Totten. (2006). Quenching and Quenching Technology. Dans *Steel Heat Treatment*. CRC Press. doi: doi:10.1201/NOF0849384523.ch5
10.1201/NOF0849384523.ch5. Repéré à <http://dx.doi.org/10.1201/NOF0849384523.ch5>
- Hasan, H. S., Peet, M. J., Jalil, J. M., & Bhadeshia, H. K. D. H. (2011). Heat transfer coefficients during quenching of steels. *Heat and Mass Transfer*, 47(3), 315-321. doi: 10.1007/s00231-010-0721-4. Repéré à <http://dx.doi.org/10.1007/s00231-010-0721-4>
- He, L., & Huiping, L. (2010). FEM simulation of quenching residual stress for the plane strain problems. *2010 International Conference on Computer Design and Applications, ICCDA 2010*, 3. doi: 10.1109/ICCDA.2010.5540972
- Huang, C.-H., & Wang, S.-P. (1999). A three-dimensional inverse heat conduction problem in estimating surface heat flux by conjugate gradient method. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 42(18), 3387-3403. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/S0017-9310\(99\)00020-4](http://dx.doi.org/10.1016/S0017-9310(99)00020-4). Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0017931099000204>
- Huang, D., Arimoto, K., Lee, K., Lambert, D., & Narazaki, M. (2000). Prediction of Quench Distortion on Steel Shaft with Keyway by Computer Simulation. *ASM Proceedings: Heat Treating*, 2, 708-712.
- Huiping, L., Guoqun, Z., Shanting, N., & Yiguo, L. (2006). Inverse heat conduction analysis of quenching process using finite-element and optimization method. *Finite Elements in Analysis and Design*, 42(12), 1087-1096. doi:

<http://dx.doi.org/10.1016/j.fincl.2006.04.002>. Repéré à
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168874X06000734>

Humberto M. Celleri, I. V. P., Diego N. Passarella. (2014). Comparison Of Metallurgical Models During Quenching Using Open Source Software.

Hunkel, M., & Nadolski, D. (2016). Coupled process simulation of cold extrusion and heat treatment distortion of steel shafts. *Materialwissenschaft und Werkstofftechnik*, 47(8), 762-770. doi: 10.1002/mawe.201600610. Repéré à
<http://dx.doi.org/10.1002/mawe.201600610>

Ilker, M., & ARAT, H. T. (2014). Prediction Of Heat Transfer Coefficients By Ann For Aluminum and Steel Material. *International Journal of Scientific Knowledge*, 5.

Inoue, T., & Wang, Z. (1985). Coupling between stress, temperature, and metallic structures during processes involving phase transformations. *Materials Science and Technology*, 1(10), 845-850.

Jaouen, O., Costes, F., Saad, A., Lasne, P., & Ducloux, R. (2016). Advanced solutions for virtual process modelling: application to steel ingot manufacturing from casting to open-die forging. Dans *16th International Conference Metal Forming 2016*.

Juan J., V. C. T. C. P. N., Qusted; National Physical Laboratory. (2008). Thermophysical properties. Dans A. H. Committee (Éd.), *ASM Handbook* (Vol. Volume 15: Casting, pp. 468-481).

Jung, M., Kang, M., & Lee, Y.-K. (2012). Finite-element simulation of quenching incorporating improved transformation kinetics in a plain medium-carbon steel. *Acta Materialia*, 60(2), 525-536. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.actamat.2011.10.007>. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359645411007129>

Kakhki, M. E., Kermanpur, A., & Golozar, M. A. (2009). Numerical simulation of continuous cooling of a low alloy steel to predict microstructure and hardness. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 17(4), 045007. doi: 10.1088/0965-0393/17/4/045007. Repéré à <http://dx.doi.org/10.1088/0965-0393/17/4/045007>

Kang, S.-H., & Im, Y.-T. (2007). Three-dimensional thermo-elastic-plastic finite element modeling of quenching process of plain-carbon steel in couple with phase transformation. *International Journal of Mechanical Sciences*, 49(4), 423-439. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2006.09.014>. Repéré à
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002074030600213X>

Kang, S. H., & Im, Y. T. (2007). Thermo-elasto-plastic finite element analysis of quenching process of carbon steel. *Journal of Materials Processing Technology*, 192–193, 381-

390. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2007.04.101>. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S092401360700444X>
- Kaynar, A., Gündüz, S., & Türkmen, M. (2013). Investigation on the behaviour of medium carbon and vanadium microalloyed steels by hot forging test. *Materials & Design*, 51, 819-825. doi: 10.1016/j.matdes.2013.04.102
- Klein, B. D., & Rossin, D. F. (1999). Data quality in neural network models: effect of error rate and magnitude of error on predictive accuracy. *Omega*, 27(5), 569-582. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/S0305-0483\(99\)00019-5](http://dx.doi.org/10.1016/S0305-0483(99)00019-5). Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0305048399000195>
- Kobasko, N., Aronov, M., & Powell, J. (2010). *Intensive Quenching Systems: Engineering and Design*.
- Kobasko, N. I., Morhuniuk, W. S., & Ushakov, B. K. (2007). *Design of Steel-Intensive Quench Processes*. CRC Press, New York.
- Koen, D., & Marc, S. (2017). The Effect of Size on the Distortion Behavior After Carburisation and Quenching Processes of Gears. *Int J Metall Mater Eng*, 3.
- Krauss, G. (1999). Martensite in steel: strength and structure. *Materials Science and Engineering: A*, 273-275, 40-57. doi: [https://doi.org/10.1016/S0921-5093\(99\)00288-9](https://doi.org/10.1016/S0921-5093(99)00288-9). Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0921509399002889>
- Kulawik, A., & Bokota, A. (2011). Modelling of Heat Treatment of Steel Elements with the Movement of Coolant. 56(2), 345. doi: <https://doi.org/10.2478/v10172-011-0037-5>. Repéré à <https://content.sciendo.com/view/journals/amm/56/2/article-p345.xml>
- Lauralice, C. F. C., & George, E. T. (2010). Hardening of Steels*. Dans *Quenching Theory and Technology, Second Edition*. CRC Press. doi: doi:10.1201/9781420009163-c1 10.1201/9781420009163-c1. Repéré à <http://dx.doi.org/10.1201/9781420009163-c1>
- Lee, S.-J., & Lee, Y.-K. (2009). Latent heat of martensitic transformation in a medium-carbon low-alloy steel. *Scripta Materialia*, 60(11), 1016-1019. doi: <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2009.02.042>. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359646209001286>
- Leijie Zhao, L. Q., Qian Zhoua, Dongdong Li, Tongliang Wang, Zhigeng Jia, Fucheng Zhang, Jiangying Meng (2019). The combining effects of ausforming and below-Ms or above-Ms austempering on the transformation kinetics, microstructure and mechanical properties of low-carbon bainitic steel.
- Li, D. I., & Wells, M. A. (2005). Effect of subsurface thermocouple installation on the discrepancy of the measured thermal history and predicted surface heat flux during a

- quench operation. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 36(3), 343-354. doi: 10.1007/s11663-005-0064-6. Repéré à <https://doi.org/10.1007/s11663-005-0064-6>
- Li, H., Zhao, G., & He, L. (2008). Finite element method based simulation of stress-strain field in the quenching process. *Materials Science and Engineering: A*, 478(1), 276-290. doi: <https://doi.org/10.1016/j.msea.2007.05.101>. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0921509307011252>
- Li, H., Zhao, G., He, L., & Mo, Y. (2009). Solution of non-linear thermal transient problems by a new adaptive time-step method in quenching process. *Applied Mathematical Modelling*, 33(1), 329-342. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.apm.2007.11.004>. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0307904X07002922>
- Li, H., Zhao, G., He, L., & Mu, Y. (2008). High-speed data acquisition of the cooling curves and evaluation of heat transfer coefficient in quenching process. *Measurement*, 41(6), 676-686. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.measurement.2007.10.003>. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0263224107001017>
- Li, M. V., Niebuhr, D., Meekisho, L., & Atteridge, D. (1998a). A computational model for the prediction of steel hardenability. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 29(3), 661-672. doi: 10.1007/s11663-998-0101-3. Repéré à <http://dx.doi.org/10.1007/s11663-998-0101-3>
- Li, M. V., Niebuhr, D. V., Meekisho, L. L., & Atteridge, D. G. (1998b). A computational model for the prediction of steel hardenability. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 29(3), 661-672. doi: 10.1007/s11663-998-0101-3. Repéré à <https://doi.org/10.1007/s11663-998-0101-3>
- Li, Z. X., Zhan, M., Fan, X. G., & Tan, J. Q. (2017). A modified Johnson-Cook model of as-quenched AA2219 considering negative to positive strain rate sensitivities over a wide temperature range. *Procedia Engineering*, 207, 155-160. doi: <https://doi.org/10.1016/j.proeng.2017.10.754>. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1877705817355297>
- Liščić, B. (2006). Steel Heat Treatment. Dans *Steel Heat Treatment*. CRC Press. doi: 10.1201/NOF0849384523.ch5
10.1201/NOF0849384523.ch5. Repéré à <http://dx.doi.org/10.1201/NOF0849384523.ch5>
- Liščić, B., & Totten, G. E. (2013). Inverse Hardening. Dans J. L. Dossett & G. E. Totten (Éds.), *Steel Heat Treating Fundamentals and Processes* (Vol. 4A). ASM International. doi: 10.31399/asm.hb.v04a.a0005788. Repéré à <https://doi.org/10.31399/asm.hb.v04a.a0005788>
- Liu, G. Y., Dong, L. M., Wang, K. K., Zhu, D. M., Zhang, S. J., Gong, S. C., & Li, M. W. (2016). Water-air online quenching process of 3Cr2Mo steel based on numerical

- simulation. *Ironmaking & Steelmaking*, 43(10), 780-789. doi: 10.1080/03019233.2016.1209618. Repéré à <https://doi.org/10.1080/03019233.2016.1209618>
- Liu, J.-y., Lu, H., & Junmei, C. (2009). Experimental analysis of transformation induced plasticity in 9Cr1Mo steel. *Frontiers of Materials Science in China*, 3, 61-66. doi: 10.1007/s11706-009-0002-7
- Löwisch, G., & Dalgic, M. (2006). The influence of the temperature on the stress-strain curves of a bearing steel and a case hardening steel. *Materialwissenschaft und Werkstofftechnik*, 37(1), 134-141. doi: 10.1002/mawe.200500955. Repéré à <http://dx.doi.org/10.1002/mawe.200500955>
- Lübben, T., Dossett, J., & Totten, G. (2014). Basics of distortion and stress generation during heat treatment. *ASM Handbook*, 4, 339-354.
- M. Schwenk, J. H., and V. Schulze, Karlsruhe Institute of Technology. (2014). Residual Stresses and Distortion in Quenched and Tempered Steels. Dans J. Dossett and G.E. Totten (Éd.), *ASM Handbook, Volume 4B, Steel Heat Treating Technologies* (Vol. ASM Handbook). ASM International.
- Malakizadi, A. (2010). *Simulation of Cooling Behavior and Microstructure Development of PM Steels* (Chalmers University of Technology). (42/2010).
- Malinowski, Z., Telejko, T., Hadała, B., Cebo-Rudnicka, A., & Szajding, A. (2014a). Dedicated three dimensional numerical models for the inverse determination of the heat flux and heat transfer coefficient distributions over the metal plate surface cooled by water. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 75, 347-361. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2014.03.078>. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0017931014002841>
- Malinowski, Z., Telejko, T., Hadała, B., Cebo-Rudnicka, A., & Szajding, A. (2014b). Dedicated three dimensional numerical models for the inverse determination of the heat flux and heat transfer coefficient distributions over the metal plate surface cooled by water. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 75(Supplement C), 347-361. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2014.03.078>. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0017931014002841>
- Maniruzzaman, M., & Jr., R. D. S. (2004). Heat transfer coefficients for quenching process simulation. *J. Phys. IV France*, 120, 269-276. doi: <https://doi.org/10.1051/jp4:2004120031>. Repéré à <https://doi.org/10.1051/jp4:2004120031>

- Maradît, B. P. (2010). *Analytical, Numerical and Experimental Investigation of The Distortion Behavior of Steel Shafts During Through-Hardening* (Middle East Technical University).
- Michael, A., Nikolai, K., & Joseph, P. (2005). *Industrial-scale intensive quenching process for tool products commercialization*.
- Müştağ, O., Davut, K., Şimşir, C., & Gur, H. (2014). *Determination of flow curves of metastable austenite*.
- Mustak, O., Evcil, E., & Şimşir, C. (2016). Simulation of through-hardening of SAE 52100 steel bearings – Part I: Determination of material properties. *Materialwissenschaft und Werkstofftechnik*, 47(8), 735-745. doi: 10.1002/mawe.201600607. Repéré à <http://dx.doi.org/10.1002/mawe.201600607>
- N. Saunders, Z. G., X. Li, A.P. Miodownik and J.-P. Schillé. (2004). *The Calculation of TTT and CCT diagrams for General Steels*. U.K: Sente Software Ltd. Repéré à <http://www.sentesoftware.co.uk>
- Narayan Prabhu, K., & Ashish, A. A. (2002). Inverse Modeling Of Heat Transfer With Application To Solidification And Quenching. *Materials and Manufacturing Processes*, 17(4), 469-481. doi: 10.1081/AMP-120014230. Repéré à <http://dx.doi.org/10.1081/AMP-120014230>
- Narazaki, M., & Totten, G. (2006). *Distortion of heat-treated components Steel Heat Treatment: Metallurgy and Technology*: Boca Raton: Taylo & Francis Group, LLC.
- Narazaki, M., Totten, G., & Webster, G. (2002). Hardening by reheating and quenching. *ASM International, Member/Customer Service Center, Materials Park, OH 44073-0002, USA, 2002.*, 248-295.
- Optasanu, V. (2013). Influence des macro-hétérogénéités sur la déformation résiduelle des composants en 18MnNiMo-5. Dans *21ème Congrès Français de Mécanique*.
- Pan, Y.-T. (2001). Measurement and modelling of diffusional transformation of austenite in C-Mn steels. *National sun yat-sen university*.
- Pelissou, C. (2005). *Discretisation spatio-temporelle du problème thermique à deux champs: application au procédé de forgeage à chaud* (Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris).
- Peraire, J., & Widnall, S. (2008). *Lecture L26 - 3D Rigid Body Dynamics: The Inertia Tensor. Dynamics*.

- Perzynski, K., Madej, L., Szajding, A., Raga, K., Kubiak, K., Niechajowicz, A., . . . Pietrzyk, M. (2016). Numerical evaluation of gear ring behavior during various cooling conditions. *Journal of Machine Engineering*, 16(2), 18-26. Repéré à <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84990925141&partnerID=40&md5=85677f561baf0cfc194de14aabb774e7>
- Peterli, M., Truong, M.-T., Manopulo, N., & Hora, P. (2016). A new optimization procedure for the accurate characterization of thermal phase transformation curves based on controlled quenching experiments. *MATEC Web of Conferences*, 80, 10010. doi: 10.1051/mateconf/20168010010
- Piekarska, W. (2015). Modelling and Analysis of Phase Transformations and Stresses in Laser Welding Process / Modelowanie I Analiza Przemian Fazowych I Naprężeń W Procesie Spawania Laserowego. *Archives of Metallurgy and Materials*, 60(4), 2833. doi: 10.1515/amm-2015-0454. Repéré à <https://www.degruyter.com/view/j/amm.2015.60.issue-4/amm-2015-0454/amm-2015-0454.xml>
- Piekarska, W., & Kubiak, M. (2012). Theoretical investigations into heat transfer in laser-welded steel sheets. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 110(1), 159-166. doi: 10.1007/s10973-012-2486-0. Repéré à <https://doi.org/10.1007/s10973-012-2486-0>
- Pizetta Zordão, L. H., Oliveira, V. A., Totten, G. E., & Canale, L. C. F. (2019). Quenching power of aqueous salt solution. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 140, 807-818. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2019.06.036>. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0017931019310488>
- Porto de Oliveira, W., Savi, M., Pacheco, P., & Souza, L. (2010). Thermomechanical analysis of steel cylinders quenching using a constitutive model with diffusional and non-diffusional phase transformations. *Mechanics of Materials*, 42(1), 31-43. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.mechmat.2009.09.006>. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0167663609001598>
- Prabhu, K., & Fernandes, P. (2010). Heat transfer during quenching and assessment of quench severity—a review. Dans *Quenching and Cooling, Residual Stress and Distortion Control*. ASTM International.
- Quidort, D., & Brechet, Y. J. M. (2002). A Model of Isothermal and Non Isothermal Transformation Kinetics of Bainite in 0.5% C Steels. *ISIJ International*, 42(9), 1010-1017. doi: 10.2355/isijinternational.42.1010
- Rajeev, P., Jin, L., Farris, T., & Chandrasekar, S. (2009). Modeling of Quenching and Tempering Induced Phase Transformations in Steels. *Journal of ASTM International*, 6(5), 1-19. doi: 10.1520/JAI102095. Repéré à

https://compass.astm.org/DIGITAL_LIBRARY/JOURNALS/JAI/PAGES/JAI102095.htm

Reardon, A. C. (2011). Heat treatment of Steel. Dans *Metallurgy for the Non-Metallurgist (2nd Edition)*. ASM International. Repéré à <http://app.knovel.com/hotlink/toc/id:kpMNME0001/metallurgy-non-metallurgist/metallurgy-non-metallurgist>

S.-J. Lee, Y.-K. L. (2008). Prediction of austenite grain growth during austenitization of low alloy steels *Materials and Design*, 1840–1844.

Saunders, N., Guo, U. K. Z., Li, X., Miodownik, A. P., & Schillé, J. P. (2003). Using JMatPro to model materials properties and behavior. *JOM*, 55(12), 60-65. doi: 10.1007/s11837-003-0013-2. Repéré à <http://dx.doi.org/10.1007/s11837-003-0013-2>

Schillé, J.-P., Guo, Z., Saunders, N., & Miodownik, A. P. (2011). Modeling Phase Transformations and Material Properties Critical to Processing Simulation of Steels. *Materials and Manufacturing Processes*, 26(1), 137-143. doi: 10.1080/10426910903153059. Repéré à <http://dx.doi.org/10.1080/10426910903153059>

Seif, M., Choe, L., Gross, J., Luecke, W., Main, J., McColskey, D., . . . Zhang, C. (2016). *Temperature-dependent material modeling for structural steels: formulation and application*. US Department of Commerce, National Institute of Standards and Technology.

Şimşir, C. (2008a). *3D Finite Element Simulation Of Steel Quenching In Order To Determine The Microstructure And Residual Stresses* (Middle East Technical University).

Şimşir, C. (2008b). A Mathematical Framework for Simulation of Thermal Processing of Materials: Application to Steel Quenching. *Turkish Journal of Engineering and Environmental Sciences*, 85–100.

Şimşir, C. (2009). Simulation of Quenching, Handbook of Thermal Process Modeling of Steels: CRC Press-Taylor & Francis Group.

Şimşir, C. (2014). Modeling and Simulation of Steel Heat Treatment—Prediction of Microstructure, Distortion, Residual Stresses, and Cracking. *ASM Handbook*, 4, 409-466.

Şimşir, C. (2017). Transformation Induced Plasticity (TRIP) of SAE 52100 Steel during Martensitic and Bainitic Transformations. *Hittite Journal of Science and Engineering*, 4, 1. doi: 10.17350/HJSE19030000058

- Şimşir, C., & Gür, C. H. (2010). A Simulation of the Quenching Process for Predicting Temperature, Microstructure and Residual Stresses. *Strojniski Vestnik/Journal of Mechanical Engineering*, 56(2).
- Şimşir, C., & Gür, C. H. (2010). A Simulation of the Quenching Process for Predicting Temperature, Microstructure and Residual Stresses. 2010, 56(2). doi: 93-103. Repéré à http://ojs.sv-jme.eu/index.php/sv-jme/article/view/84_Doi_not_assigned
- Singer, S. (2014). Sensitivity of the Heat-Transfer Coefficient Calculation. *Materials Performance and Characterization*, 3(4), 184–209. doi: 10.1520/ MPC20140006
- Smoljan, B., Smokvina, S., Hanza, Tomašić, N., & Iljkić, D. (2007). Computer simulation of microstructure transformation in heat treatment processes. *Journal of Achievements in Materials and Manufacturing Engineering*, 24(1).
- Song, D. L., Gu, J. F., Pan, J. S., & Hu, M. J. (2004). Numerical simulation of quenching of large sized blocks of 718 steel used for plastic dies. *Materials Science and Technology*, 20(12), 1567-1572. doi: 10.1179/026708304225022160. Repéré à <http://dx.doi.org/10.1179/026708304225022160>
- Soundararajan, R., Ramesh, A., Sivasankaran, S., & Sathishkumar, A. (2015). Modeling and Analysis of Mechanical Properties of Aluminium Alloy (A413) Processed through Squeeze Casting Route Using Artificial Neural Network Model and Statistical Technique. *Advances in Materials Science and Engineering*, 2015.
- Stark, I., Smith, G. D. W., & Bhadeshia, H. K. D. H. (1990). The Distribution of Substitutional Alloying Elements during the Bainite Transformation. *Metallurgical Transactions a-Physical Metallurgy and Materials Science*, 21(4), 837-844. doi: Doi 10.1007/Bf02656567. Repéré à <Go to ISI>://WOS:A1990DG60900008
- Sugianto, A., Narazaki, M., Kogawara, M., & Shirayori, A. (2009). A comparative study on determination method of heat transfer coefficient using inverse heat transfer and iterative modification. *Journal of Materials Processing Technology*, 209(10), 4627-4632. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2008.10.016>. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0924013608007796>
- T.Inoue. (2002). Metallo-Thermo-Mechanics-Application to Quenching. Dans *Handbook of Residual Stress and Deformation of Steel* (pp. 296-311). ASM International.
- Takahashi, Y. (1984). Measurement of thermophysical properties of metals and ceramics by the laser-flash method. *International Journal of Thermophysics*, 5, 41-52. doi: 10.1007/BF00502078

- Talebi, S. H. (2018). *Microstructure Evolution and Optimization of the Tempering Heat Treatment of a Medium-Carbon Low-Alloy Steel* (ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE, Montreal).
- Talebi, S. H., Ghasemi-Nanesa, H., Jahazi, M., & Melkonyan, H. (2017). In Situ Study of Phase Transformations during Non-Isothermal Tempering of Bainitic and Martensitic Microstructures. *Metals*, 7(9), 346. doi: ARTN 346 10.3390/met7090346. Repéré à <Go to ISI>://WOS:000412063900025
- Thuvander, A. (2002). Numerical simulation of gas quenching of tool steels and the influence of hardenability on distortion. Dans *6th International Tooling Conference, Karlstad, Sweden* (pp. 625-642).
- Tong, D., Gu, J., & Totten, G. E. (2018). Numerical investigation of asynchronous dual-frequency induction hardening of spur gear. *International Journal of Mechanical Sciences*, 142-143, 1-9. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2018.04.036>. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0020740317331442>
- Tong, D., Gu, J., & Yang, F. (2018). Numerical simulation on induction heat treatment process of a shaft part: Involving induction hardening and tempering. *Journal of Materials Processing Technology*, 262, 277-289. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2018.06.043>. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0924013618302905>
- Tóth, T., & Živčák, J. (2014). A Comparison of the Outputs of 3D Scanners. *Procedia Engineering*, 69(Supplement C), 393-401. doi: <https://doi.org/10.1016/j.proeng.2014.03.004>. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1877705814002501>
- Totten, G. E. (2006). Heat-Treating Process Design. Dans *Handbook of Metallurgical Process Design*. CRC Press. Repéré à <https://books.google.ca/books?id=3zjfgq8pUvcC>
- Totten, G. E. (2006). *Steel Heat Treatment: Metallurgy and Technologies*. Taylor & Francis. Repéré à http://books.google.ca/books?id=_WkyJv9MOpEC
- Totten, G. E., Narazaki, M., Blackwood, R. R., & Jarvis, L. M. (2002). Failures Related to Heat Treating Operations. Dans A. S. M. H. Committee (Éd.), *Failure Analysis and Prevention*. ASM International. Repéré à <https://doi.org/10.31399/asm.hb.v11.a0003510>
- Trzaska, J. (2013). Calculation of the steel hardness after continuous cooling. *Archives of Materials science and Engineering*, 61(2), 87-92.
- Umemoto, M., Tsuchiya, K., Liu, Z. G., & Sugimoto, S. (2000). Tensile stress-strain analysis of single-structure steels. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 31(7), 1785-

1794. doi: 10.1007/s11661-006-0249-x. Repéré à <https://doi.org/10.1007/s11661-006-0249-x>
- Van Bohemen, S. M. C., & Sietsma, J. (2009). Effect of composition on kinetics of athermal martensite formation in plain carbon steels. *Materials Science and Technology*, 25(8), 1009-1012. doi: 10.1179/174328408X365838. Repéré à <https://doi.org/10.1179/174328408X365838>
- Vincent, Y., Jullien, J.-F., & Gilles, P. (2005). Thermo-mechanical consequences of phase transformations in the heat-affected zone using a cyclic uniaxial test. *International Journal of Solids and Structures*, 42(14), 4077-4098. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2004.11.018>. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0020768304006596>
- Volker Schulze, O. V., and E. Macherauch. (2011). Residual Stresses after Quenching. Dans *Quenching Theory and Technology, Second Edition*.
- Wang, K.-Y., Jin, Y.-J., Xu, M.-J., Chen, J.-S., & Lu, H. (2015). Estimation of heat transfer coefficient and phase transformation latent heat by modified pattern search method. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 68, 14-19. doi: <https://doi.org/10.1016/j.icheatmasstransfer.2015.08.001>. Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S073519331500161X>
- Wang, Q. (2014). Constitutive Behavior and Modeling of Cast Aluminum Alloys during the Quenching Process. *Thermal Process Modeling: Proceedings from the 5th International Conference on Thermal Process Modeling and Computer Simulation*.
- Wei, S. (2008). Physical Metallurgy of Thermal Processing. Dans *Handbook of Thermal Process Modeling Steels*. CRC Press. doi: doi:10.1201/9781420003581.ch3 10.1201/9781420003581.ch3. Repéré à <http://dx.doi.org/10.1201/9781420003581.ch3>
- Wells, M., & Daun, K. (2008). Accurate Determination of Surface Heat Fluxes During Quenching Characterized by Boiling Water Heat Transfer. *Journal of ASTM International*, 6(1), 1-17. doi: 10.1520/JAI101818
- Wilthan, B., Schützenhöfer, W., & Pottlacher, G. (2017). Thermophysical Properties of Five Industrial Steels in the Solid and Liquid Phase. *International Journal of Thermophysics*, 38(6), 83. doi: 10.1007/s10765-017-2220-z. Repéré à <https://doi.org/10.1007/s10765-017-2220-z>
- Wood R, L. (2006). The design of experiments for inverse thermal analysis. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers. Part B. Journal of engineering manufacture*, 220(2), 225-241. Repéré à <http://www.refdoc.fr/Detailnotice?idarticle=6821979>

- Woodard, P. R., Chandrasekar, S., & Yang, H. T. Y. (1999). Analysis of temperature and microstructure in the quenching of steel cylinders. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 30(4), 815. doi: 10.1007/s11663-999-0043-4. Repéré à <https://doi.org/10.1007/s11663-999-0043-4>
- Yang, C.-y. (1998). A linear inverse model for the temperature-dependent thermal conductivity determination in one-dimensional problems. *Applied Mathematical Modelling*, 22(1), 1-9. doi: [https://doi.org/10.1016/S0307-904X\(97\)00101-7](https://doi.org/10.1016/S0307-904X(97)00101-7). Repéré à <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0307904X97001017>
- Yen, H.-W., Chiang, M.-H., Lin, Y. C., Chen, D., Huang, C.-Y., & Lin, H.-C. (2017). High-Temperature Tempered Martensite Embrittlement in Quenched-and-Tempered Offshore Steels. *Metals*, 7, 253. doi: 10.3390/met7070253
- Zajac, S., Schwinn, V., & Tacke, K.-H. (2005). Characterisation and Quantification of Complex Bainitic Microstructures in High and Ultra-High Strength Linepipe Steels. *Materials Science Forum - MATER SCI FORUM*, 500-501, 387-394. doi: 10.4028/www.scientific.net/MSF.500-501.387
- Zhou, M.-x., Xu, G., Wang, L., Xue, Z.-l., & Hu, H.-j. (2015). Comprehensive analysis of the dilatation during bainitic transformation under stress. *Metals and Materials International*, 21(6), 985-990. doi: 10.1007/s12540-015-2348-y. Repéré à <Go to ISI>://WOS:000363851100002