

# Offre de thèse (septembre 2021) en modélisation & simulation, Université de Rouen-Normandie

**Titre du sujet/subject title** : Modélisation atomistique de la transformation de phase austénite-ferrite dans les aciers/Atomistic modeling of austenite-ferrite phase transformation in steels.

**Mots clefs/Keywords** : champ de phase cristallin, dynamique moléculaire, machine-learning, transition de phase, transformation martensitique, acier, alliages métalliques/phase field crystal, Molecular Dynamics, Machine Learning, phase transition, martensitic transformation, steel, metallic alloys.

**Directeur de thèse/PhD director** : Helena Zapolsky (Professeur, GPM UMR 6634, Université de Rouen-Normandie).

*email* : [helena.zapolsky@univ-rouen.fr](mailto:helena.zapolsky@univ-rouen.fr)

*téléphone* : 02.32.95.50.42

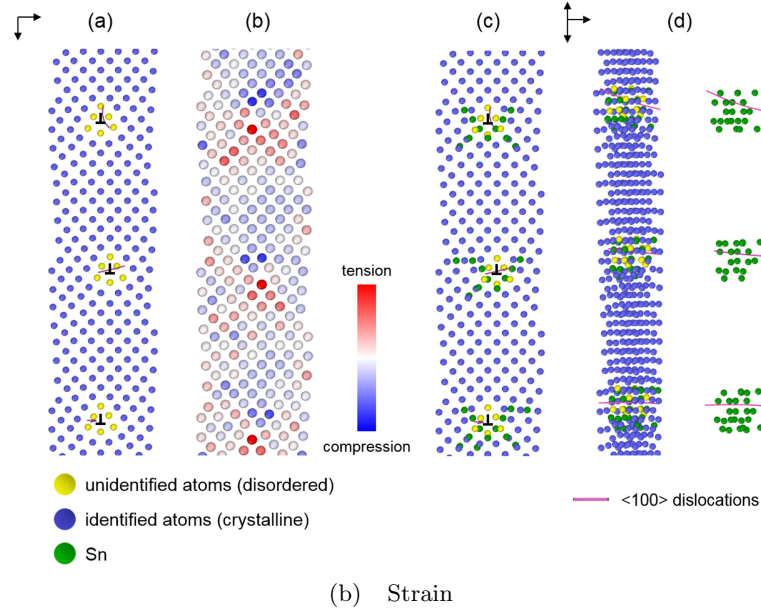
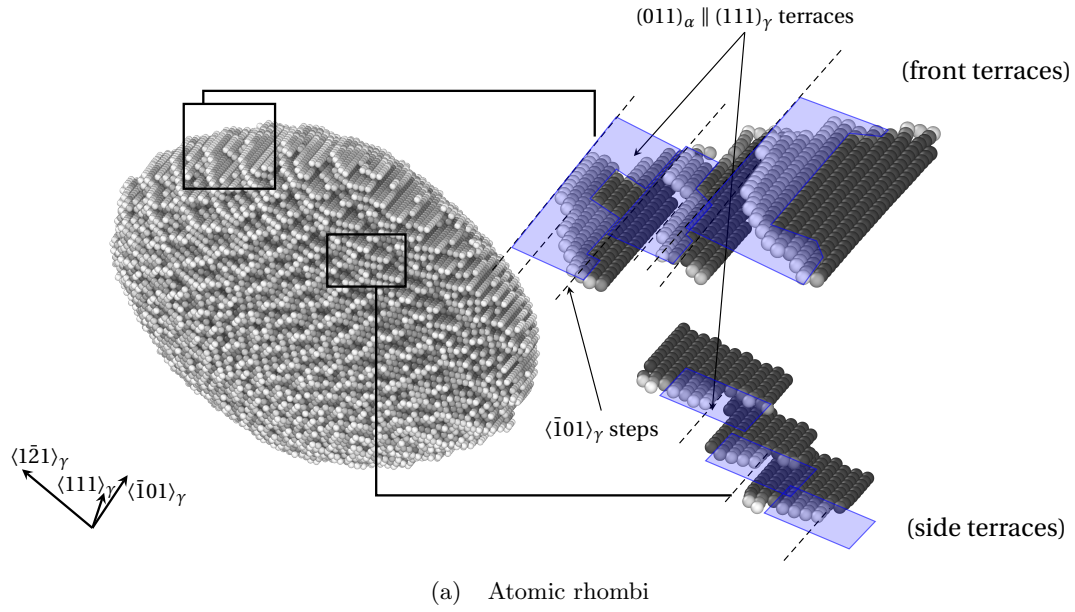
**Encadrant/Supervisor** : Gilles Demange (Maître de Conférences, GPM UMR 6634, Université de Rouen-Normandie).

*email* : [gilles.demange@univ-rouen.fr](mailto:gilles.demange@univ-rouen.fr)

*téléphone* : 02.32.95.51.55

**Subject** : Displacive solid-state phase transformations from the face centered cubic (fcc) to body centered cubic (bcc) play a pivotal role in the physical properties of steels and ferrous alloys, inasmuch as it inherently alters the mechanical properties of these materials, including fatigue, plasticity and strength. Now, several important phenomena related to the transformation interface can significantly affect the kinetics of the phase transformation, among which the interaction of the migrating fcc/bcc interface with alloying elements. The latter results in the solute segregation at the interface, and drag effect. For instance, it was shown that the interaction of carbon and manganese atoms with the moving austenite/ferrite interface induces the slowing down of the transformation front. In this regards, the present PhD is devoted to the fcc  $\rightarrow$  bcc structural transformation in multi-components systems. In particular, the influence of the chemical species and concentration of solute atoms on the kinetics of the fcc/bcc interface and the concentration profile of solute atoms close to the interface depending on the specific features of martensitic transformations, such as the orientation relationship between structure domains, the orientation of the fcc/bcc interface, and the fcc  $\rightarrow$  bcc transformation mode will be assessed. The main application of this study will be the austenite to ferrite transformation in the Fe-C binary alloy and the Fe-C-Mn ternary alloy, as it provides insightful model alloy of industrial steels.

A promising numerical tool to study complex structural transformations in materials such as the fcc  $\rightarrow$  bcc is provided by the atomic phase-field class of models (APFM). The APFM operates at atomic space scale and diffusion time scale [2, 3], which allows to prospect the kinetics of phase transformations on large spatial domains, over a duration spanning the full transformation process. Recently, a specific APFM named quasi-particle (QA) was developed by the ERAFEN team of the GPM [4] which was successful in modeling the dynamics of a host of physical processes, including the growth of a bcc inclusion in a fcc precipitate (see figure 1(a)), and solute segregation in Fe-based alloys (see figure 1(b)) [1]. For this reason, the QA approach will be a numerical tool of choice for this PhD. In addition



**Figure 1** – a) Surface relief of a bcc inclusion in a precipitate, in the case of a binary system, as simulated by the QA approach (to be published). b) Solute Sn adsorption at edge dislocations in a low-angle dislocation boundary, as simulated by the QA approach [1]

to the QA model, the use of Molecular Dynamics simulations will also be considered, as a mean to prospect the atomic structure of the relaxed fcc/bcc interface with enhanced accuracy [5].

During this PhD, the candidate will develop further the QA approach, which hitherto imperfectly reproduced the interaction of solute atoms with the fcc/bcc interface in multi-component systems, due to inadequate interaction potentials. One of the main tasks will thence be the development of new interaction potentials for a multi-components system. One option will be provided by the development of a Machine Learning based potential. A second step will be to achieve quantitative results for specific model alloys, such as the Fe-C binary alloy and the Fe-C-Mn ternary alloy, thanks to existing thermodynamical data. Another facet of the PhD will be to interface the QA approach with Molecular-Dynamics simulations, into a hybrid method. The idea will be to use the QA approach to simulate the main stages of the phase transformation kinetics, and Molecular Dynamics to relax the interface structure simulated thereby. Therefrom, various configurations (solute atom chemical species and concentration, temperature, orientation relationships, etc.) will be prospected. Results will eventually be compared to experimental observations recently performed by a former PhD student using APT and EBSD in Fe-C et Fe-C-Mn. In particular, the concentration profiles of Carbon and Manganese

solute atoms in the vicinity of the interface will be compared to their experimental counterparts, as well as existing theories (Local Equilibrium with Partitioning, Local Equilibrium with Non-Partitioning and ParaEquilibrium). One fundamental insight of this study, will be to unravel the meshed atomistic mechanisms rooting the interaction between solute atoms and fcc  $\rightarrow$  bcc propagation front (such as coupled solute drag, ).

During the PhD, the candidate will upgrade the MPI-Fortran parallel QA code which was previously developed in the bosom of the ERAFEN team. The development of a Machine-Learning potential will be performed using the open-source Machine Learning library SCIKIT-LEARN [6], which is based on Python language. Finally, Molecular Dynamics simulations will be performed using LAMMPS software. Simulations will be performed on the supercalculator of Normandy (CRIANN).

**Sujet :** Les transformations de phase displacives d'une structure cubique face centrée (cfc) à une structure cubique centrée (cc) jouent un rôle majeur dans les propriétés physiques des aciers et de certains alliages métalliques. Elles influencent notamment les propriétés mécaniques de ces matériaux, comme la résistance et les effets plastiques. Or, la cinétique de ce type de transformations est elle-même largement impactée par un certain nombre de phénomènes physiques, au nombre desquels les interactions entre l'interface cfc/cc et les atomes en solution. Ces interactions ont pour effet la ségrégation des espèces en solution à l'interface d'une part, et le traînage de soluté d'autre part. À titre d'exemple, la présence de carbone et de manganèse en solution dans les aciers à haute résistance entraîne un ralentissement de la transformation de l'austénite en ferrite.

Dans ce cadre, le travail de thèse proposé sera dédié à l'étude des transformations cfc  $\rightarrow$  cc dans les systèmes multi-composants. Un enjeu important de l'étude sera de comprendre et de caractériser l'influence de la nature chimique et de la concentration moyenne des espèces en solution sur la cinétique de propagation de l'interface, ainsi que le profil de concentration de ces espèces à l'interface. Les caractéristiques majeures des transformations martensitiques seront prises en compte dans l'étude, au nombre desquelles les relations d'orientation spécifiques entre domaines structuraux, l'orientation de l'interface cfc/cc et le mode de transformation. Une application directe de ce travail sera la transformation austénite-ferrite dans les alliages modèles Fe-C et Fe-C-Mn.

Une méthode novatrice et prometteuse pour étudier les transformations structurales complexes est offerte par les modèles continus de type champ de phase atomique. Ces méthodes opèrent à l'échelle atomique, mais sur des temps propres aux phénomènes de diffusion [2, 3], ce qui leur permet de décrire la cinétique des transformations de phase sur des domaines spatiaux importants, et pour des durées suffisantes pour reproduire l'intégralité du phénomène étudié. Récemment, une approche de ce type appelée méthode des Quasi-Particules a été développée au sein de l'équipe ERAFEN du laboratoire GPM [4]. Celle-ci a fait preuve d'une grande efficacité pour modéliser un certain nombre de dynamiques physiques, dont la croissance d'une inclusion de structure cc dans un précipité de structure cfc (figure 1(a)), et la ségrégation de soluté en position interstitielle dans des alliages de fer (figure 1(b)) [1]. Cette approche numérique occupera donc une place centrale dans ce travail. En complément à l'approche des quasi-particules, une approche plus classique de type dynamique moléculaire sera aussi utilisée pour simuler les interfaces cfc/cc relaxées avec une précision accrue [5].

Au cours de ce travail de thèse, le candidat ou la candidate sera chargé de développer plus avant le programme existant de Quasi-Particules, dont une des limitations actuelles est liée à la difficulté de rendre compte des interactions entre l'interface cfc/cc et les atomes en solution. Cette limitation reflète quant à elle le manque de précision des potentiels d'interaction utilisés à l'heure actuelle. Un des objectifs principaux de ce travail de thèse, sera donc de développer de nouveaux potentiels d'interaction pour l'approche des Quasi-Particules appliquée aux systèmes multi-composants. Une piste envisagée est celle des potentiels d'interaction paramétrés par une approche de type Machine-Learning. Une deuxième étape de ce doctorat sera d'obtenir des résultats quantitatifs pour les alliages modèles Fe-C et Fe-C-Mn. Un deuxième enjeu de ce travail de thèse, sera de coupler les approches Quasi-Particules et dynamique moléculaire, au sein d'une approche hybride originale. L'idée centrale sera d'utiliser l'approche des Quasi-Particules pour balayer l'espace des phases, tandis que l'approche dynamique moléculaire permettra de relaxer les interfaces cfc/cc.

Il sera alors possible de tester un ensemble représentatif de configurations (espèces chimique sen

solution, température, relation d'orientation etc.) pour la transition  $\text{fcc} \rightarrow \text{cc}$ . Dans un dernier temps, les résultats seront comparés à des observations expérimentales SAT et EBSD récemment obtenues par une doctorante du laboratoire dans les alliages Fe-C et Fe-C-Mn, ainsi qu'aux théories actuelles. Un des objectifs fondamentaux de ce travail de thèse sera donc d'identifier plus avant les mécanismes à l'œuvre dans l'interaction entre les interfaces  $\text{fcc}/\text{cc}$  et les atomes en solution.

Au cours des trois ans de doctorat, le candidat ou la candidate devra étendre le programme parallèle MPI-Fortran des Quasi-Particules déjà développé au laboratoire. La mise en place d'une approche de type Machine-Learning pour les potentiels d'interaction reposera quant à elle sur la librairie open-source SCIKIT-LEARN [6]. Enfin, les simulations de dynamique moléculaire seront effectuées sur le logiciel LAMMPS. L'essentiel des simulations sera réalisé sur le supercalculateur de Normandie (CRIANN).

### Compétences et souhaitées :

1. Dans l'idéal, le candidat ou la candidate disposera d'une double compétence simulation numérique/science des matériaux.
2. Le candidat ou la candidate devra au minimum disposer d'une base solide en physique numérique (par exemple en dynamique moléculaire, Monte-Carlo, approches mésoscopiques continues comme le champ de phase).
3. Des compétences dans au moins un des langages informatiques suivants sont indispensables : Fortran (pour les simulations de Quasi-particules), Python (pour le traitement de données et le Machine-Learning) ou C/C++.
4. Une connaissance des transformations martensitiques sera un plus.
5. Des notions de base en Machine-Learning pourront aider.

### Expected skills :

1. In the ideal case, the scientific skills of the candidate will be twofold numerical simulation/material science.
2. A minimal requirement for the application will be a solid background in numerical physics (for instance in molecular dynamics, Monte-Carlo, mesoscopic continuous approaches such as Phase-Field models etc.).
3. Skills in at least one programming language among Fortran (for Quasi-Particles simulations), Python (for data treatment and Machine-Learning) or C/C++ is mandatory.
4. Knowledge in the field of martensitic phase transformation will be appreciated.
5. Basis in Machine Learning and data science will be appreciated.

## Références

- [1] N Mavrikakis, C Detlefs, PK Cook, M Kutsal, APC Campos, M Gauvin, PR Calvillo, W Saikaly, R Hubert, Henning Friis Poulsen, et al. A multi-scale study of the interaction of sn solutes with dislocations during static recovery in  $\alpha$ -fe. *Acta Materialia*, 174 :92–104, 2019.
- [2] Yongmei M Jin and Armen G Khachaturyan. Atomic density function theory and modeling of microstructure evolution at the atomic scale. *Journal of applied physics*, 100(1) :013519, 2006.
- [3] Marilynne Certain, Helena Zapolsky, and Armen G Khachaturyan. Atomic density function simulations of crystal growth kinetics of fcc crystal and bcc-fcc transition. In *Solid State Phenomena*, volume 172, pages 1234–1239. Trans Tech Publ, 2011.
- [4] Mykola Lavrskyi, Helena Zapolsky, and Armen G Khachaturyan. Quasiparticle approach to diffusional atomic scale self-assembly of complex structures : from disorder to complex crystals and double-helix polymers. *Npj Computational Materials*, 2(1) :1–9, 2016.
- [5] F Maresca and WA Curtin. The austenite/lath martensite interface in steels : Structure, athermal motion, and in-situ transformation strain revealed by simulation and theory. *Acta Materialia*, 134 :302–323, 2017.

- [6] Fabian Pedregosa, Gaël Varoquaux, Alexandre Gramfort, Vincent Michel, Bertrand Thirion, Olivier Grisel, Mathieu Blondel, Peter Prettenhofer, Ron Weiss, Vincent Dubourg, et al. Scikit-learn : Machine learning in python. *Journal of machine learning research*, 12(Oct) :2825–2830, 2011.