

## Génération et calculs d'agrégats multi-cristallins dans *Code\_Aster*.

*J. El Gharib, Ph. De Bonnières, G. Debruyne, J.M. Proix (EDF R&D AMA), O. Diard (EDF R&D MMC)*

Pour mieux appréhender les comportements macroscopiques non linéaires des métaux, et aussi en tirer des enseignements sur la répartition fine des champs dans les grains et aux interfaces, on veut pouvoir réaliser avec *Code\_Aster* des (nombreux) calculs de microstructures comprenant plusieurs centaines de grains, chaque grain étant maillé suffisamment finement pour capter les gradients de contraintes aux interfaces. Ces développements sont effectués dans le cadre du projet PERFECT / SINERGY [3].

Pour atteindre ces objectifs, il faut d'une part créer des maillages licites, et d'autre part effectuer les calculs dans un temps raisonnable.

Deux voies sont examinées ici pour la création des maillages : le maillage libre de chaque grain ou le maillage régulier où l'on affecte à chaque maille, un numéro de grain en fonction de sa distance aux différents germes.

En ce qui concerne le calcul, les développements dans *Code\_Aster* relatifs aux comportements du monocristal sont disponibles dans la version 7. L'un des enjeux de ce type de calcul consiste à optimiser les performances (l'intégration locale du comportement, résolution globale), pour pouvoir mener facilement des calculs paramétriques. Une optimisation de l'algorithme d'intégration du comportement est en cours en version 8. Conjointement à ce travail, la mise à disposition du couplage Aster-Zmat permet de valider les développements (par inter-comparaison des résultats entre Aster et Zmat pour des monocristaux donnés).

### Génération de maillages d'agrégats

On part d'une répartition aléatoire de germes dans un V.E.R. donné et, via un algorithme de décomposition de l'espace en cellules de Voronoï autour de chaque germe, on définit une géométrie des grains, qui est ensuite transmise à un logiciel de maillage. En utilisant sans modification les cellules ainsi produites, on constate que l'on obtient des arêtes parfois très petites, ce qui conduit à un maillage de mauvaise qualité, voire impossible à réaliser étant donnée la dispersion des densités locales. On a donc construit une méthode de génération de germes permettant d'éliminer directement les petites arêtes, en modifiant leur localisation sur des critères géométriques. Cet algorithme, associé à une procédure Matlab permet de construire des géométries de grains plus raisonnables, qui sont transmises à SALOME (via un script python) ou TETGEN pour fournir un maillage libre tétraédrique. On obtient alors des géométries du type de la figure 1.

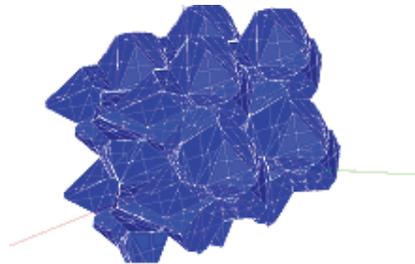


Figure 1 : Géométrie d'agrégat

Enfin, pour pouvoir appliquer des chargements quelconques, il est pra-

tique de tronquer les cellules pour avoir des faces planes. Ces transformations sont effectuées directement à l'aide du module GEOM de SALOME (figure 2).

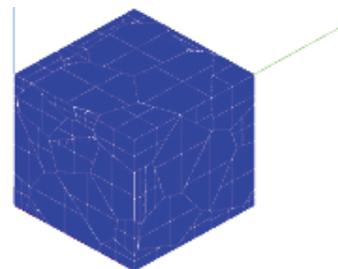


Figure 2 : Agrégat tronqué avec Salomé

L'autre voie possible de génération de maillage consiste à générer des maillages réguliers et d'attribuer à chaque élément un numéro de grain. Ceci peut être réalisé dans le fichier de commandes Aster, en python : à partir d'une génération aléatoire de germes, on utilise la propriété des cellules de Voronoï sur chaque centre d'élément fini : un point appartient à la cellule de Voronoï (donc au grain) dont le centre est le plus proche. La représentation de la forme des cellules est alors moins fine que dans le cas du maillage libre, notamment en ce qui concerne les joints de grains (figure 3).

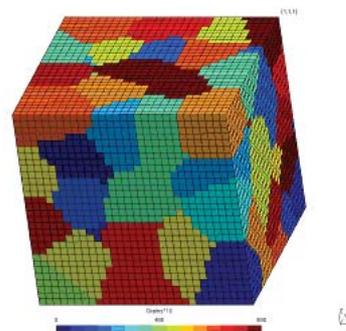


Figure 3 : Affectation de grains sur un maillage régulier

# Génération et calculs d'agrégats multi-cristallins dans Code\_Aster.

J. El Gharib, Ph. De Bonnières, G. Debruyne, J.M. Proix (EDF R&D AMA), O. Diard (EDF R&D MMC)

## Comportements «micro-macro»

L'objectif général des fonctionnalités « micro-macro » [1] dans Code\_Aster est de pouvoir intégrer de façon modulaire des modèles à plusieurs échelles, avec une possibilité de choix des lois de comportements, des règles de localisation, des types de microstructures. Ceci mène à deux types de calcul différents :

- les calculs poly-cristallins, dans lesquels on suppose qu'en un point d'intégration, plusieurs phases métallurgiques sont présentes simultanément. Il faut alors se donner des règles de transition d'échelle (homogénéisation, et localisation). Le comportement POLY\_CFC, développé dans Code\_Aster en version 4, est de ce type. Le comportement POLY-CRISTAL étend les possibilités à d'autres types de structures cristallines,
- les calculs d'agrégats multi-cristallins, avec maillage de la microstructure. Chaque grain est maillé, et sur le groupe de mailles correspondant on affecte une orientation et un comportement MONOCRISTAL. C'est ce type de modélisation qui est utilisé ici [1].

## Comparaison Code\_Aster et Zmat

La mise à disposition de l'interface Zmat-Aster [2], ainsi que des échanges fructueux avec l'Ecole des Mines, ont permis de comparer les méthodes de résolution du système local entre Code\_Aster et Zmat (la résolution globale étant celle de Code\_Aster).

Les tests sur des monocristaux permettent de constater que les résultats sont identiques entre les deux codes.

Un test d'une éprouvette tubulaire mono-cristalline en torsion montrent que Zmat et Code\_Aster donnent également les mêmes résultats, avec des temps de calcul comparables (à condition d'optimiser le système d'équations local).

## Application au calcul d'un agrégat à 100 grains

Pour tester la faisabilité et les performances d'un calcul d'agrégat représentatif des calculs envisagés, on considère un V.E.R. de 100 grains. Le nombre total d'éléments est de 86751 et le nombre total de nœuds est de 15940 (tétraèdres linéaires) ou 121534 (tétraèdres quadratiques). Le chargement consiste en une déformation homogène selon z. On atteint environ 2% de déformation en 6,5 h (machine alphaserver ES-45) (figures 4 et 5). Dès que la décomposition de domaines sera disponible en non-linéaire dans Code\_Aster (et la parallélisation des calculs élémentaires) le gain obtenu devrait être important.

[1] « Comportements viscoplastiques mono et poly cristallins » document de référence de Code\_Aster [R5.03.11].

[2] « Utilisation de l'interface Zmat-Aster » document d'utilisation de Code\_Aster [U2.10.01].

[3] « SINERGY / PERFECT. Livrable MM3-c-E-3 : Comparaison d'approches à champs moyens avec un calcul de référence ». O.Diard, note EDF R&D MMC HT-26/04/063/A. ■

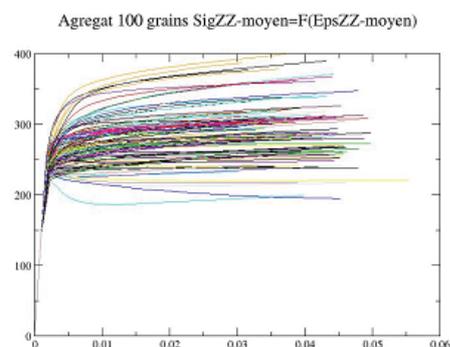


Figure 5 : Evolution de la contrainte moyenne en fonction de la déformation moyenne en chacun des grains (déformation totale imposée : 1%)

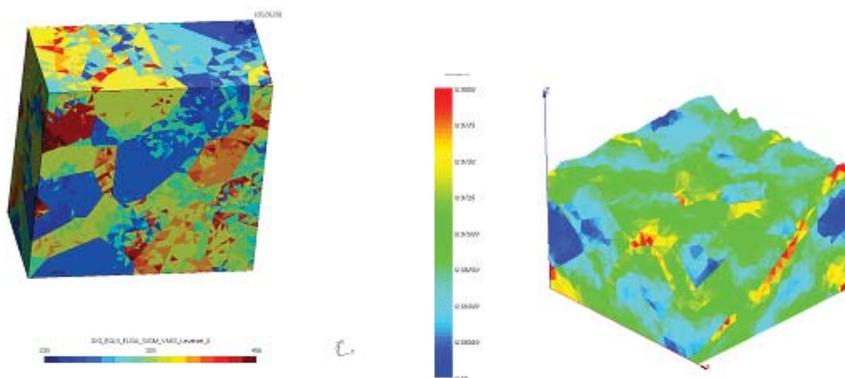


Figure 4 : Déformation plastique cumulée vue sur l'agrégat total (maillage linéaire) et vue en coupe (maillage quadratique). Déformation totale imposée : 4%