

DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE



# MISE EN PLACE D'UNE MODÉLISATION CA-FE POUR SIMULER LA STRUCTURE DES GRAINS EN SOUDAGE

Club Cast3M 2016 |

Noé Beaupère (CEA/DEN/DANS/SEMT/LTA)

Danièle Ayrault (CEA/DEN/DANS/SEMT/LTA)

Olivier Fandeur (CEA/DEN/DANS/SEMT/LM2S)

Denis Solas (ICMMO, Université Paris-Sud 11)

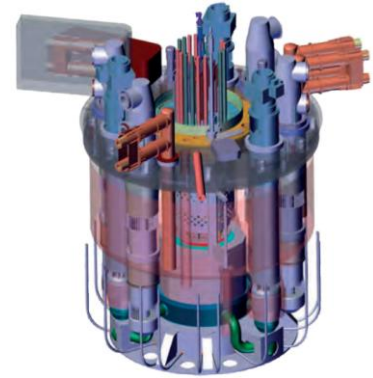
[www.cea.fr](http://www.cea.fr)

25 NOVEMBRE 2016 – CLUB CAST3M 2016

Introduction	P.03
Essais expérimentaux	P.05
Modèle	P.06
Résultats	P.14
Conclusion - perspectives	P.19

## Contexte

- Acier 316 L(N) envisagé pour la cuve du réacteur ASTRID (Génération IV), aucun défaut n'est toléré
- La fissuration à chaud doit donc être évitée
  - **Intégrité des structures préservées**
- Celle-ci apparaissant lors du refroidissement dans les métaux d'apport, on définit des critères thermomécaniques de fissuration à chaud.
- Passage par un acier 316 L(N) pour paramétrer les essais et mettre en place les calculs.



ASTRID (Advanced Sodium Technological Reactor for Industrial Demonstration)

[Les défis du CEA, oct. 2014]



Eprouvette fissurée

## Objectifs

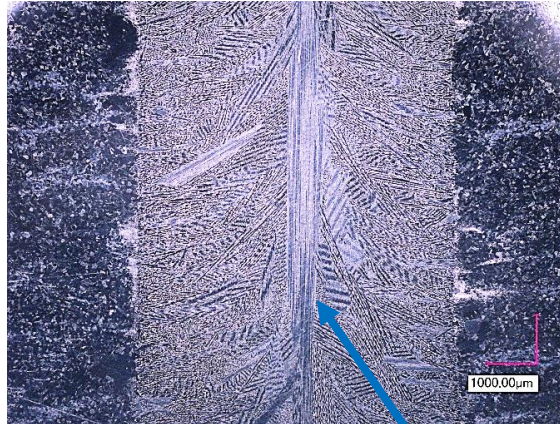
- Modéliser la structure granulaire après soudage avec un modèle couplant Eléments Finis (échelle macroscopique) et Automate Cellulaire (échelle mésoscopique).
- Un modèle entièrement développé au CEA.
- Confrontation à des essais expérimentaux spécifiques (bain liquide débouchant, faible épaisseur)

N° essai	U (V)	I (A)	Vitesse (mm/min)
2	9	100	150
3	10	90	150
5	10	60	100
6	10	120	200
7	10	150	250
9	10	140	300
12	10	60	60
13	10	80	80

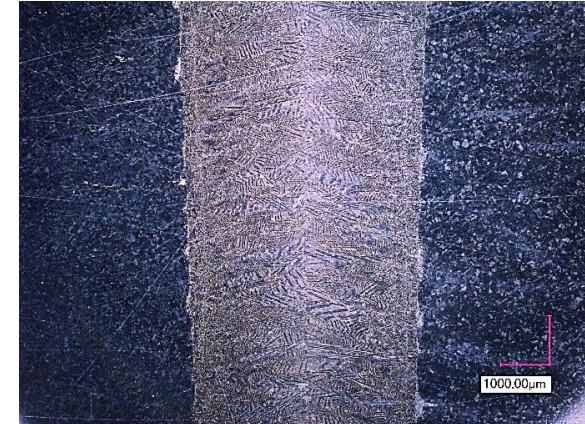
Essais TIG

N° essai	Puissance (W)	Vitesse (mm/min)
15	1200	80

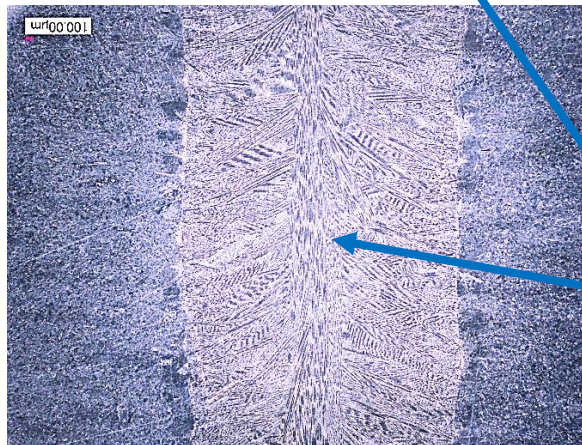
Essai laser



Essai 12, vue du dessus



Essai 9, vue du dessus



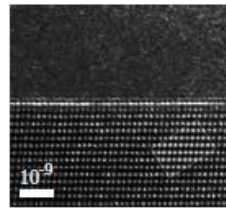
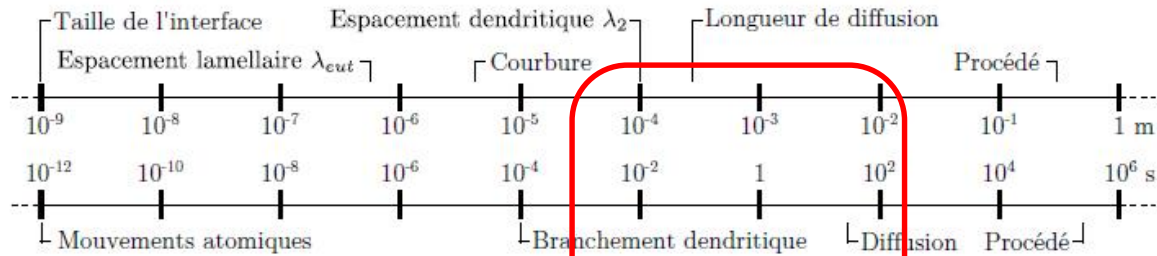
Essai laser, vue du dessus

↑  
Direction de soudage

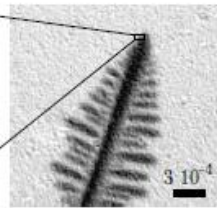
Présence d'un grain au centre du bain liquide à faible vitesse



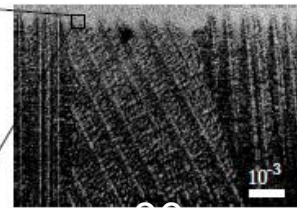
## Pourquoi le CA-FE



Interface atomique  
[Lee11]



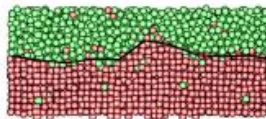
Pointe de dendrite  
[Bog10]



Structure de grains  
[Gan94]



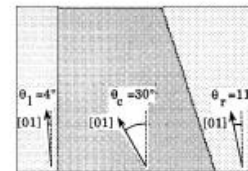
Pièce de fonderie  
[Wil03]



Dynamique moléculaire  
[Hoy03]



Champ de phase  
[Eik09]



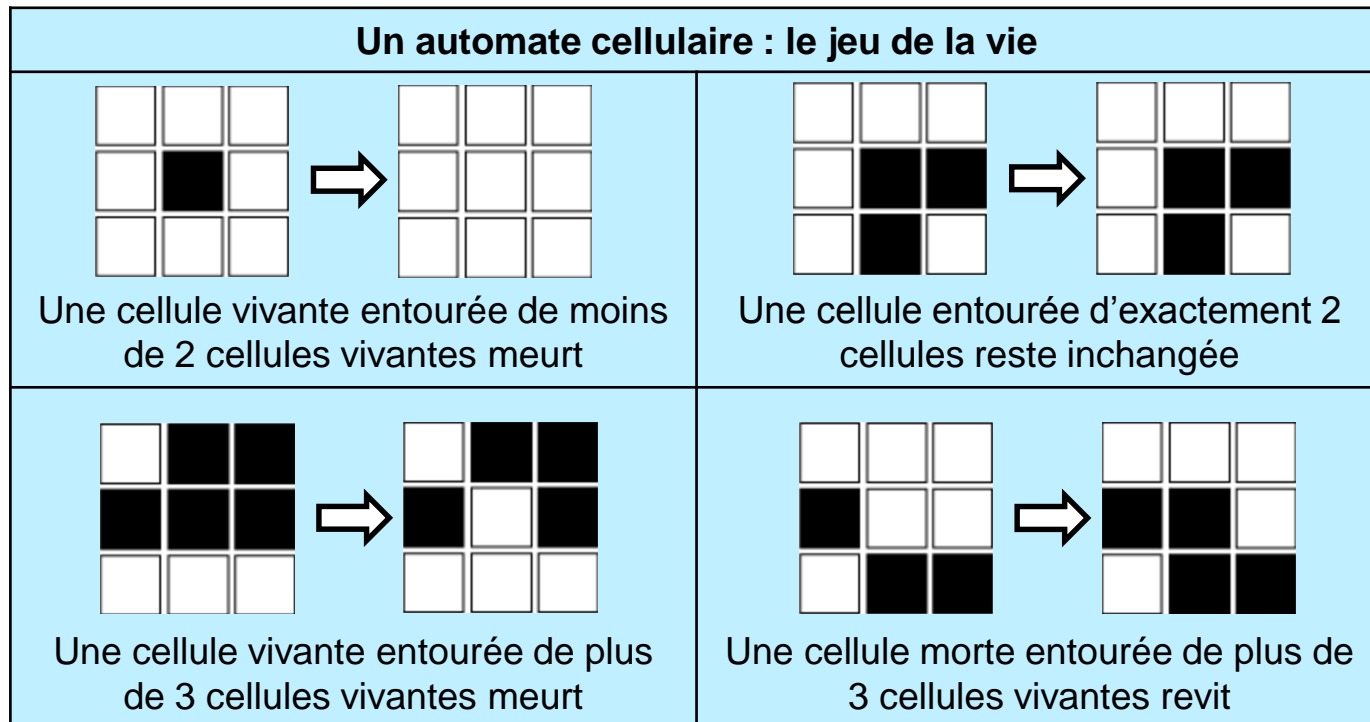
Modèle CAFE  
[Gan94]



Volumes finis  
[Sri10]

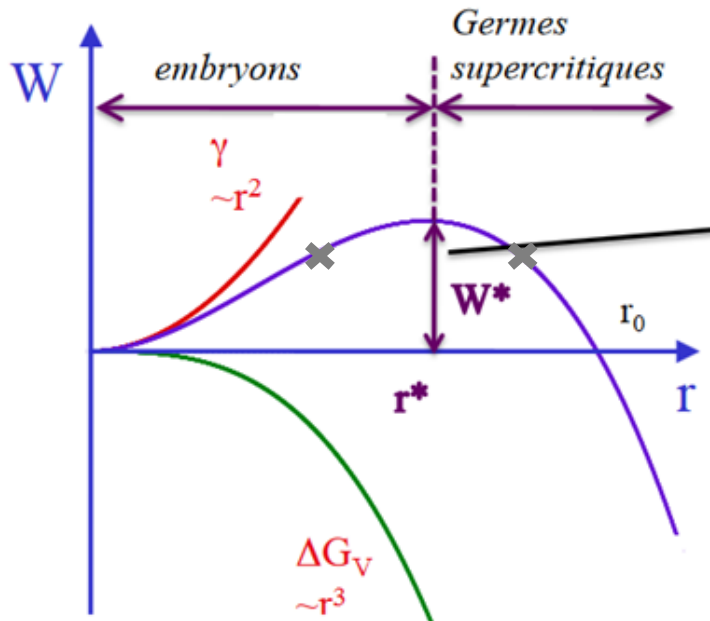
## L'automate cellulaire

- Les cellules sont capables de changer d'état en fonction de règles spécifiques et l'état des voisins.

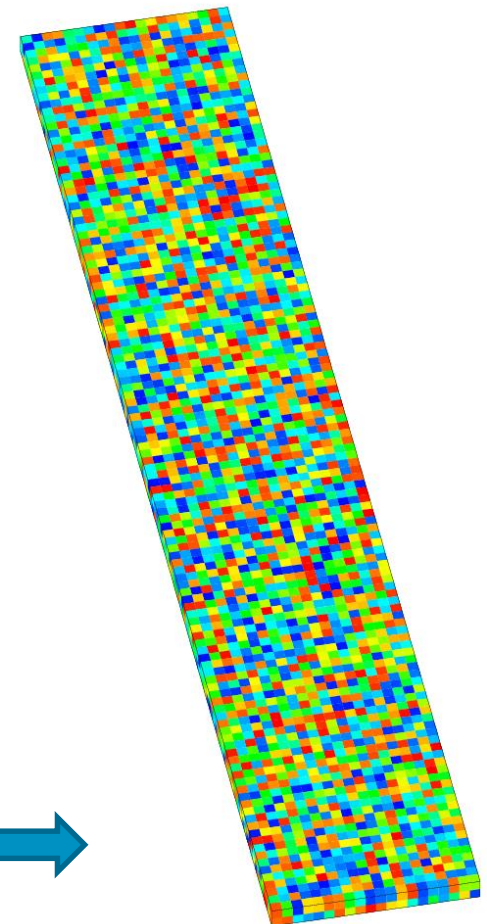
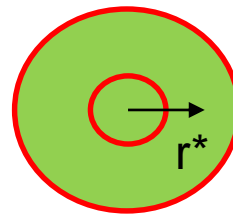


- Deux règles sont ici appliquées : **germination** et **croissance des grains**

## L'automate cellulaire - Germination



Germination homogène [1]



Difficile d'étudier chaque grain !

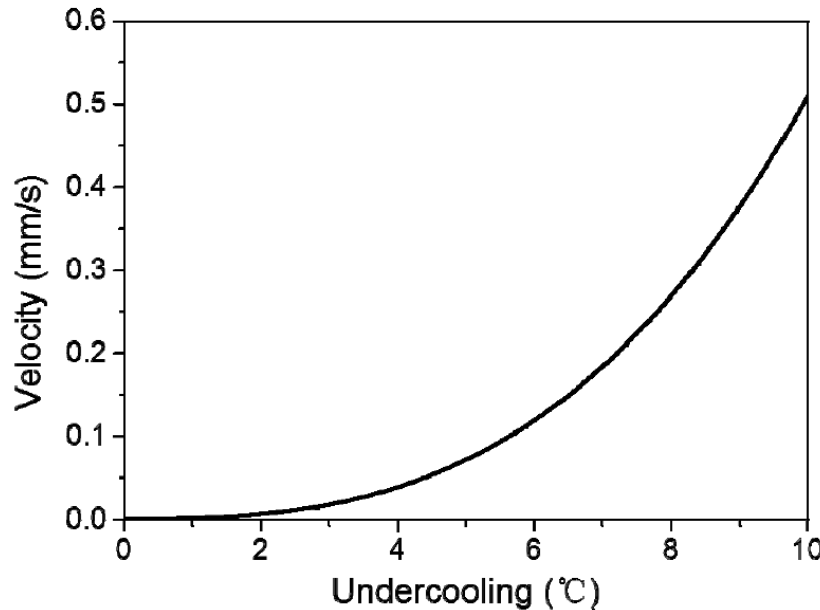
- Modèle numérique **probabiliste**
- Distribution gaussienne des surfusions
- 3 angles d'Euler (orientation) aléatoire





## L'automate cellulaire - Croissance

### Vitesse expérimentale du front de solidification



Source : Kurz, W, Giovanola, B et Trivedi, R. 1986. Theory of Microstructural Development During Rapid Solidification

$\Delta T$  : surfusion  
(état métastable,  
liquide à  $T < T_{\text{fusion}}$ )

Calcul vitesse

$$v^{S/L}(\Delta T)$$

En ajustant la courbe

$$(a_2 \Delta T^2 + a_3 \Delta T^3)$$

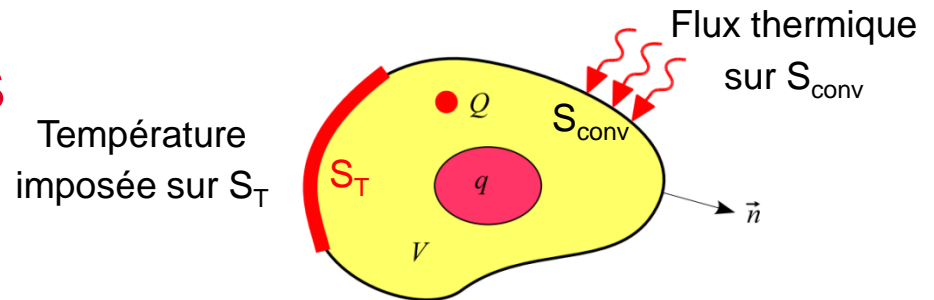
En fonction de l'orientation du grain

$$\max \left( \frac{\vec{\nabla} T}{\|\vec{\nabla} T\|} \cdot (h_i, k_i, l_i)_{\text{macro}}^{\text{normé à 1}} \right)$$

Et par rapport  
à la direction  
de soudage

$$\cos(\theta)$$

## Les éléments finis



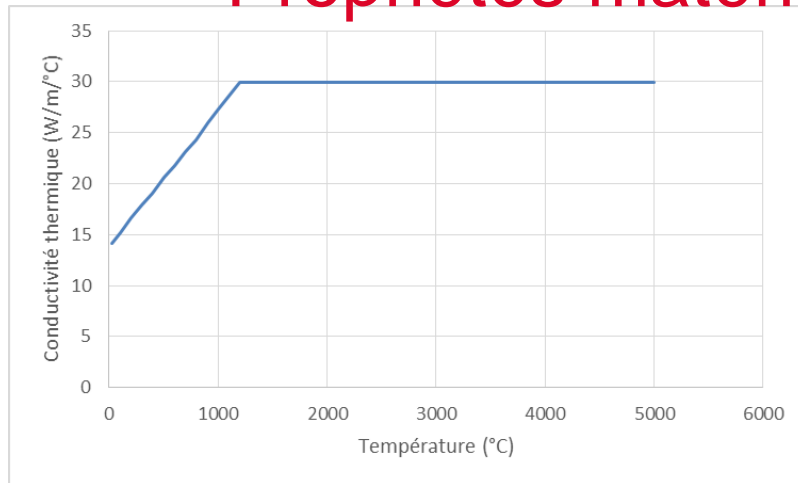
Chargements et conditions aux limites en thermique

- Ils permettent de résoudre l'équation de la chaleur :

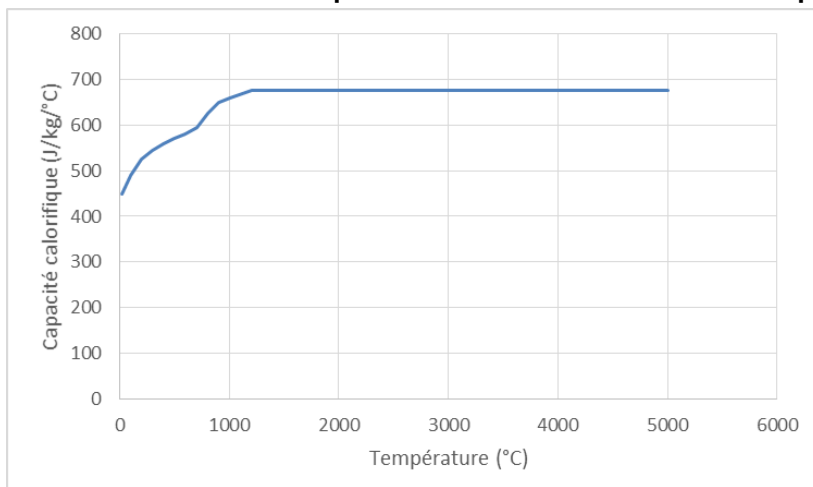
$$\rho C_p \dot{T} - \text{div}(\lambda \cdot \vec{\nabla} T) - q = 0$$

- Avec  $\rho$  la masse volumique ( $\text{kg}/\text{m}^3$ ),  $\lambda$  la conductivité thermique ( $\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ),  $C_p$  la capacité calorifique en  $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot ^\circ\text{C}^{-1}$ ,  $\vec{\nabla} T$  le gradient thermique en  $\text{K} \cdot \text{m}^{-1}$
- $q$  correspond à une source de chaleur, ponctuelle (W) ou volumique ( $\text{W}/\text{m}^3$ ).
- Ils s'appuient sur des conditions aux limites (convection, rayonnement, température imposée).

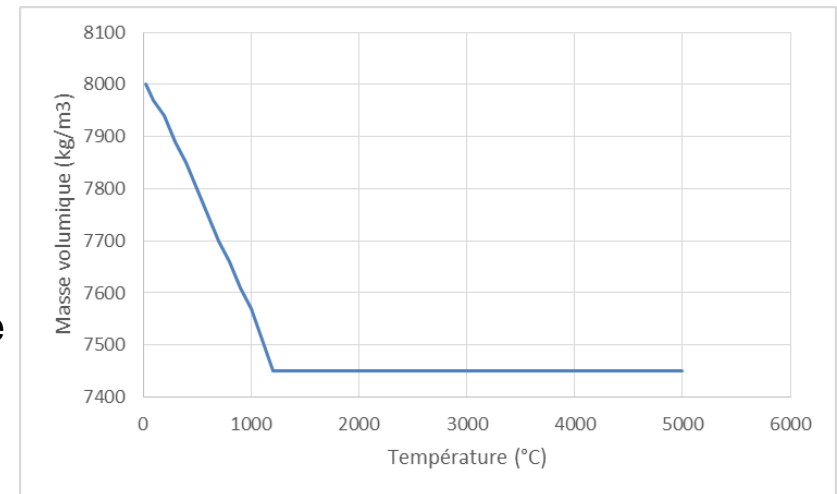
## Propriétés matériaux acier 316L



Conductivité thermique en fonction de la température

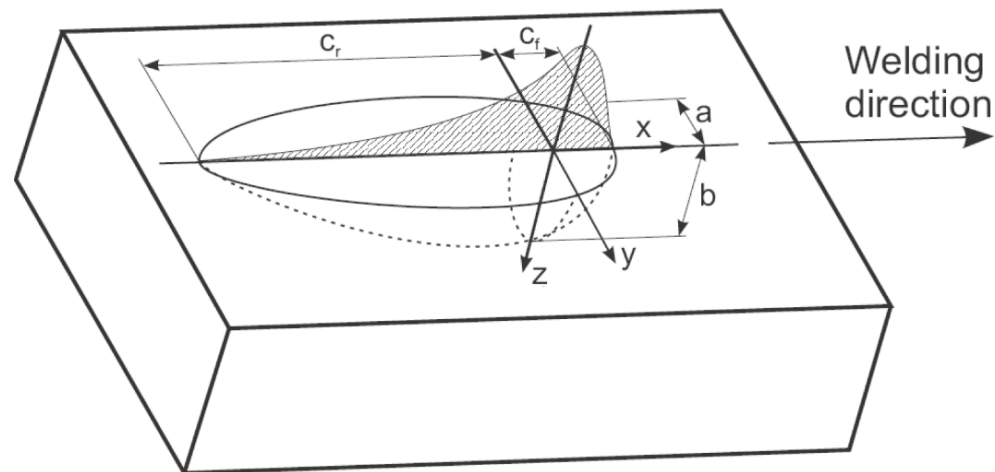
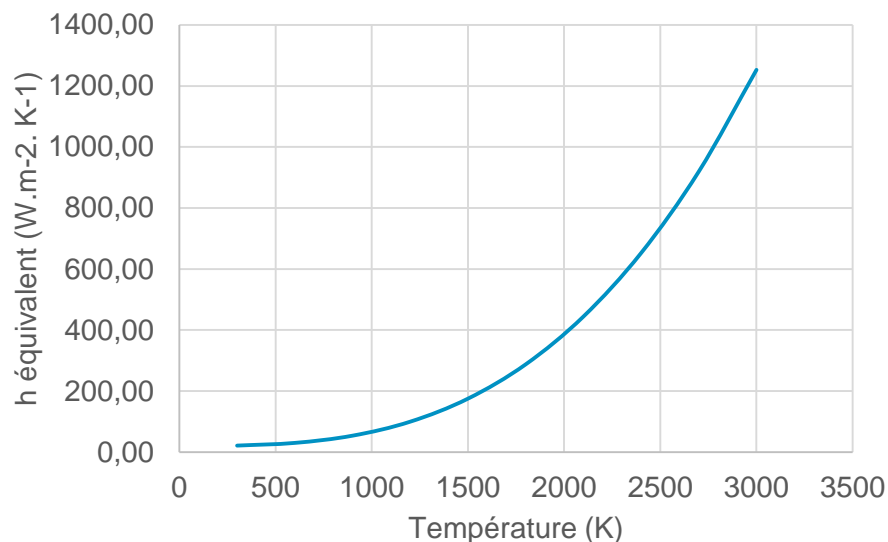


Capacité calorifique en fonction de la température



Masse volumique en fonction de la température

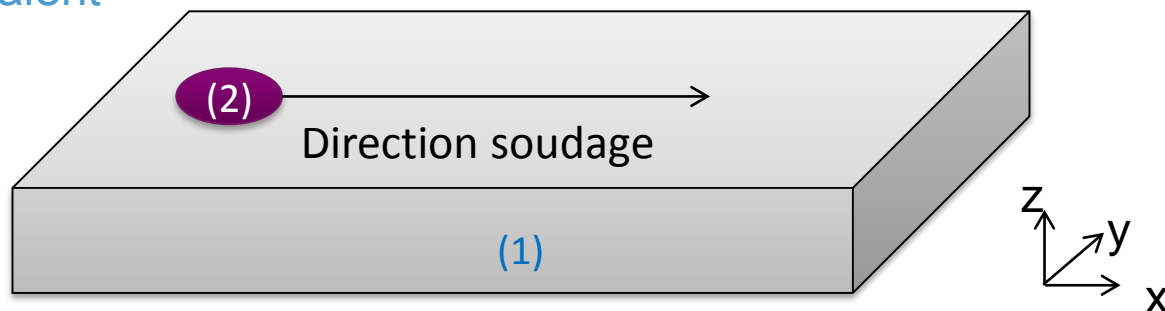
## Chargements et conditions aux limites



Source Goldak

### Coefficient d'échange équivalent

(1) Convection avec  $h$  équivalent (conv + ray) sur l'enveloppe,  $T_\infty = 20^\circ C$



(2) Source Goldak

## Couplage

Fichier d'entrées

$\lambda, \rho, C_p$

Source Goldak,

↓ Lecture des entrées

Eléments finis  
Logiciel Cast3M

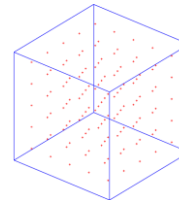


↓ Interpolation des températures aux cellules, écriture dans un fichier (ASCII)

$T_{EF}$  au nœud



$T_{AC}$  aux cellules



Automates cellulaires  
Langage Fortran

Calcul des étapes de germination croissance

↓ Ecriture des sorties  
Post traitement sur Cast3M

Fichier de sorties

Angles d'Euler

$(\varphi_1, \Phi, \varphi_2)$

$f_s$

Retour de la fraction solide au niveau des éléments finis

$F_{S_{AC}}$

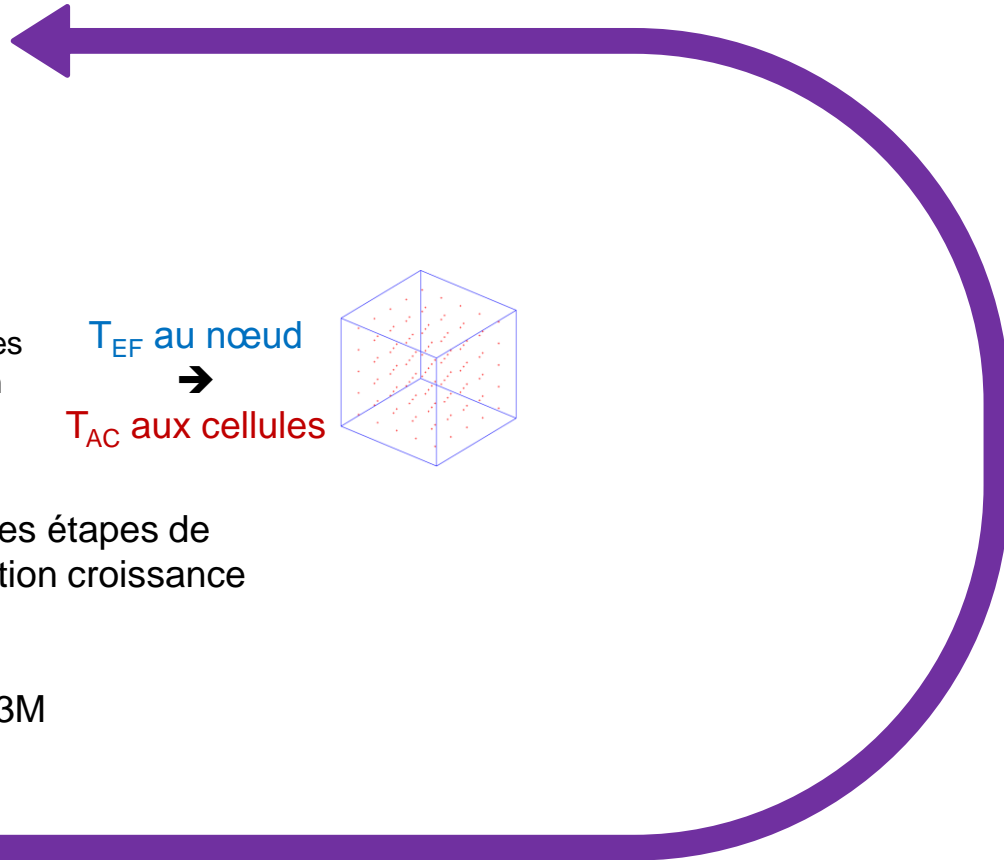


$F_{S_{EF}}$

Couplage fort

$f_s \rightarrow$  influe sur les propriétés matériaux

$\rightarrow$  génère une chaleur latente (terme source)

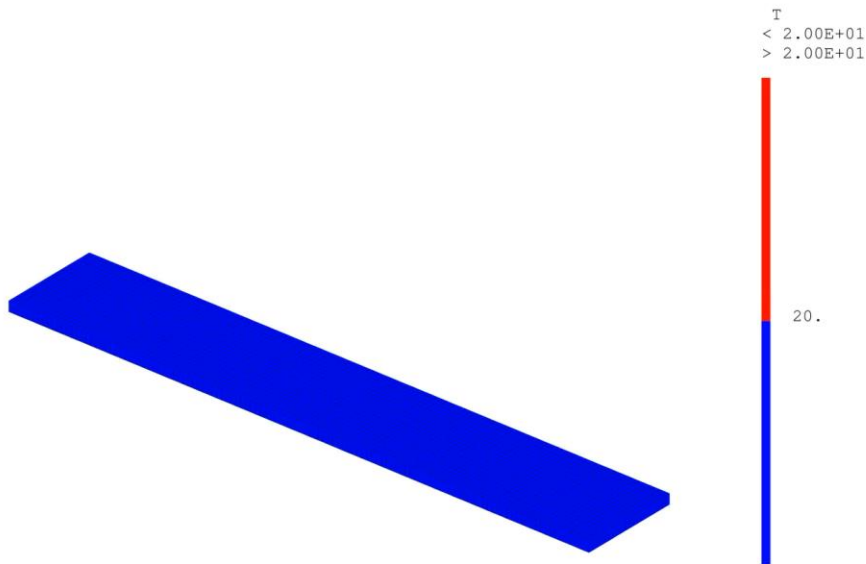




## Passage EF ↔ AC

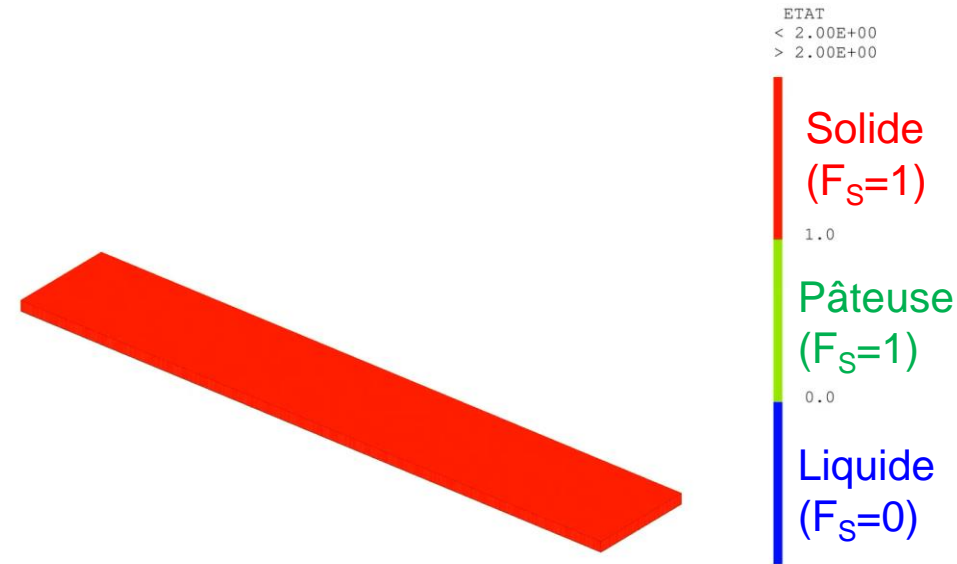
Nombre d'éléments finis	4.800
Nombre de cellules	19.660.000

### Eléments Finis



Envoi des températures EF → AC  
Valeur maximale : 2650 °C

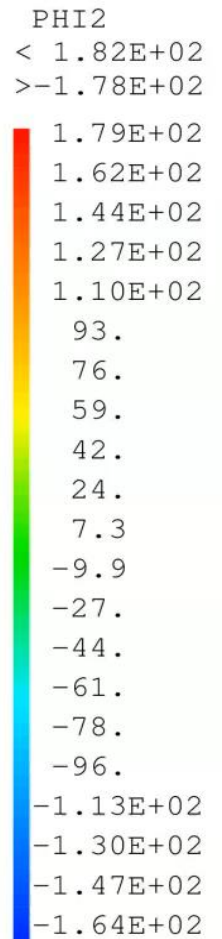
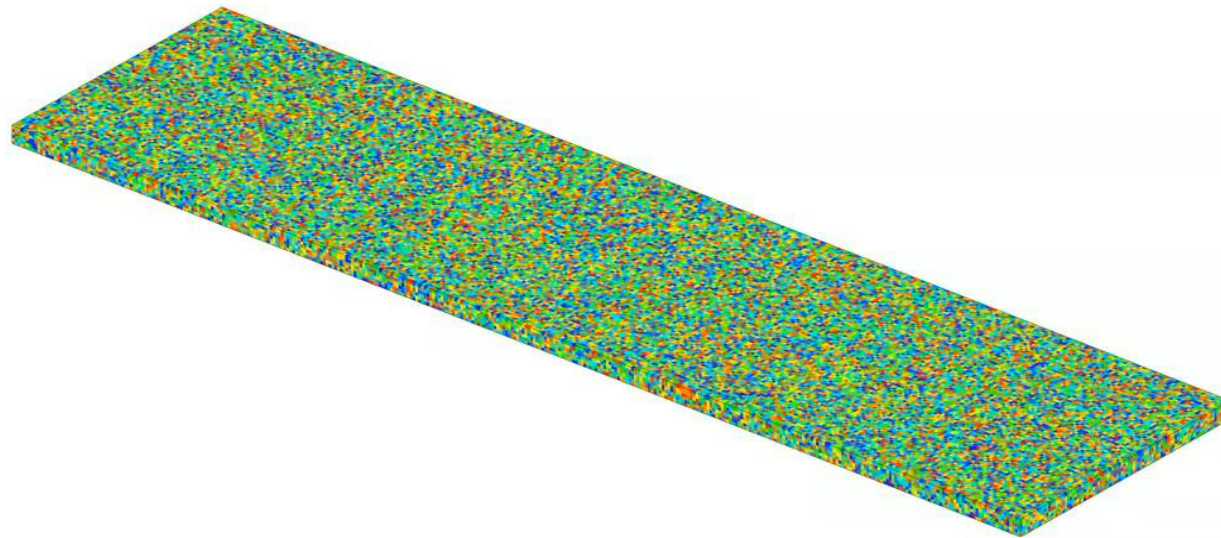
### Automate cellulaire



Iv au temps 1

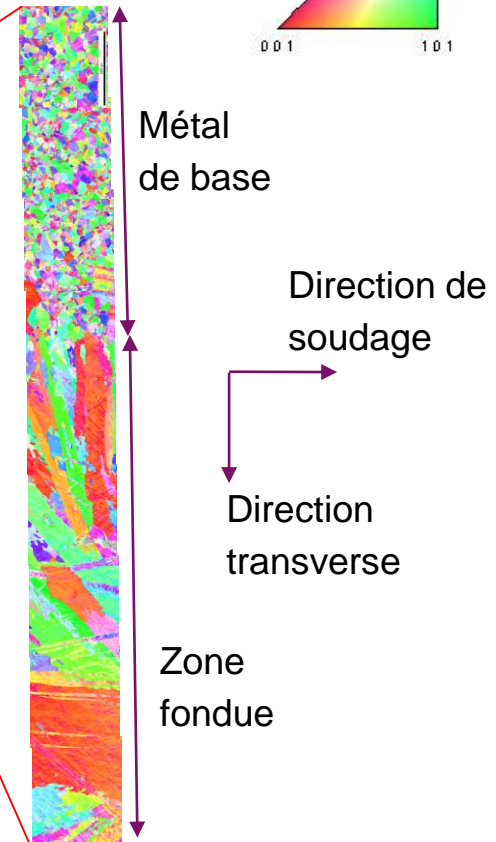
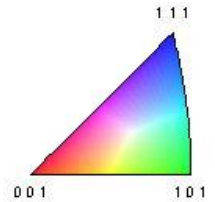
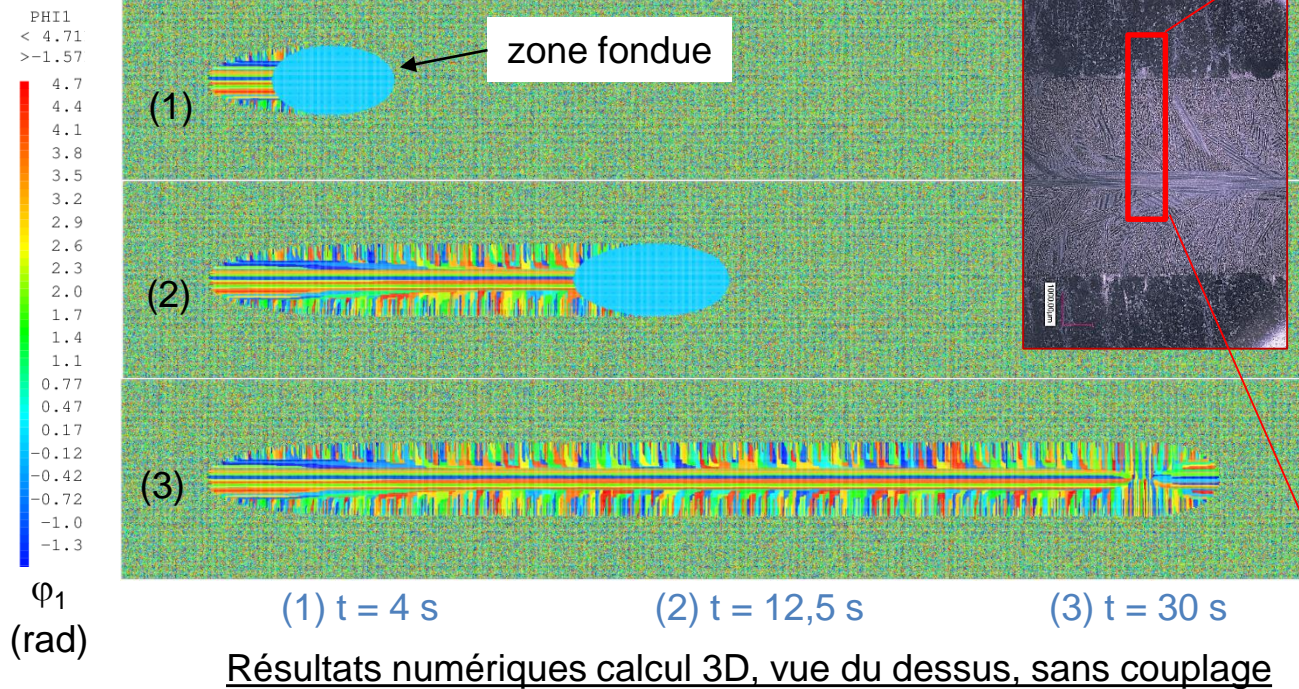
Retour de la fraction solide AC → EF

## Passage EF $\leftrightarrow$ AC



## Soudage vitesse lente

$v = 4 \text{ mm/s}$ ,  $P = 1000 \text{ W}$

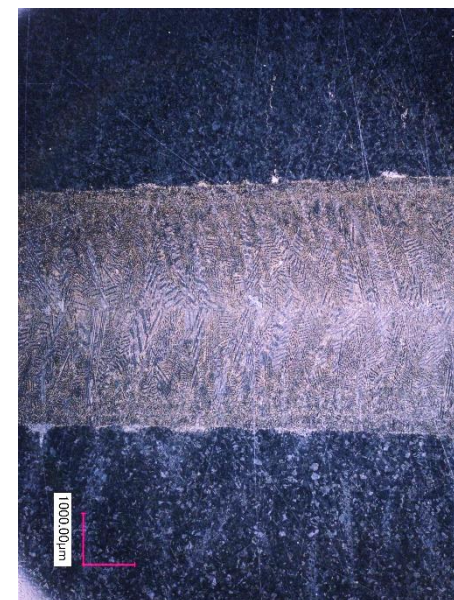
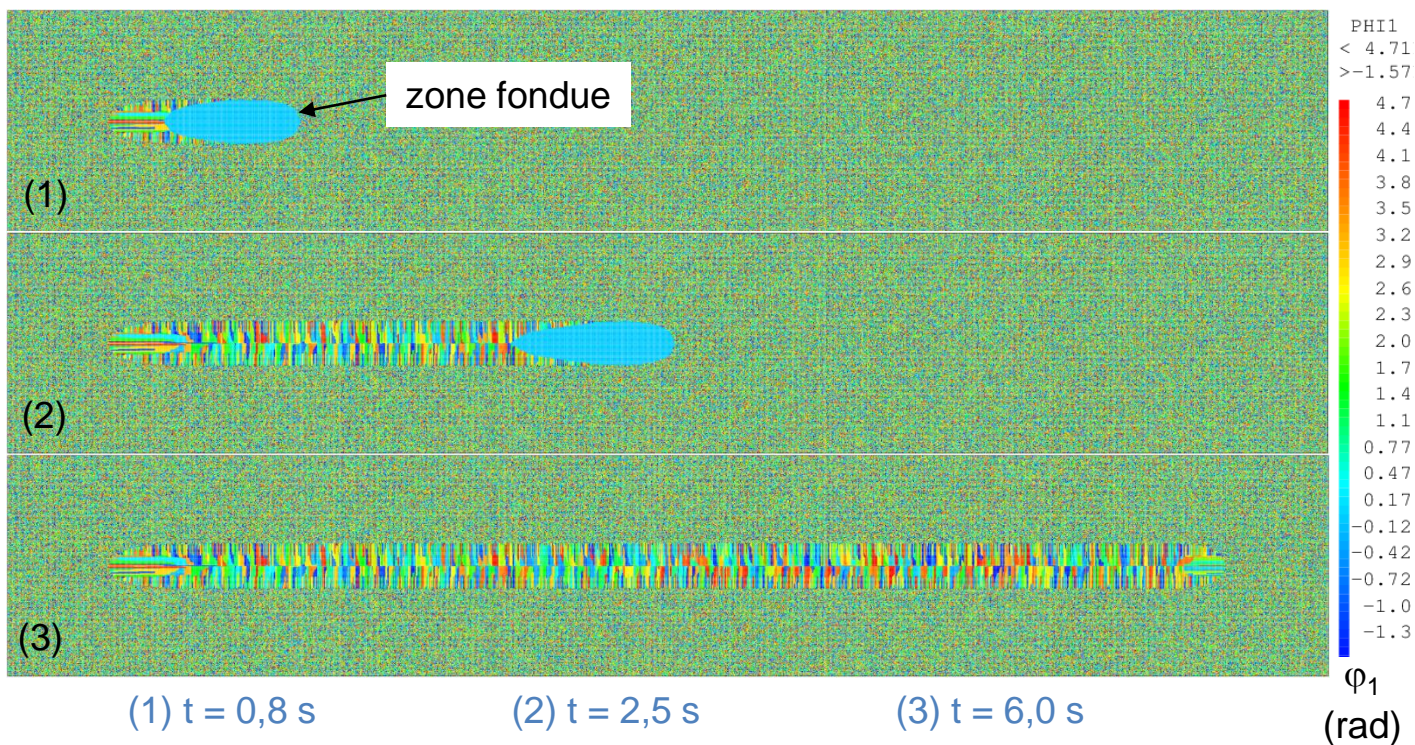


Cartographie EBSD expérimentale vue du dessus  
(ICMMO, Université Paris-Sud)



## Soudage vitesse rapide

■  $v = 20 \text{ mm/s}$ ,  $P = 2000 \text{ W}$

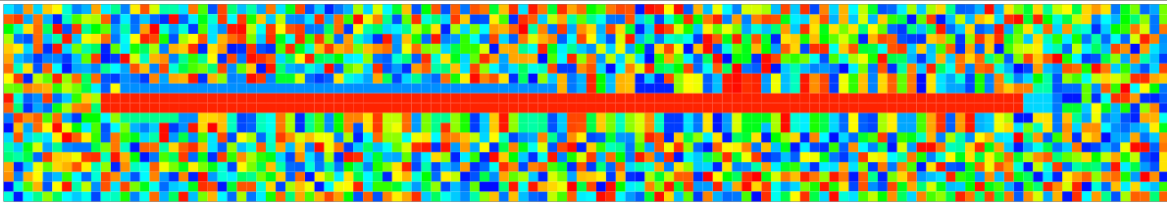
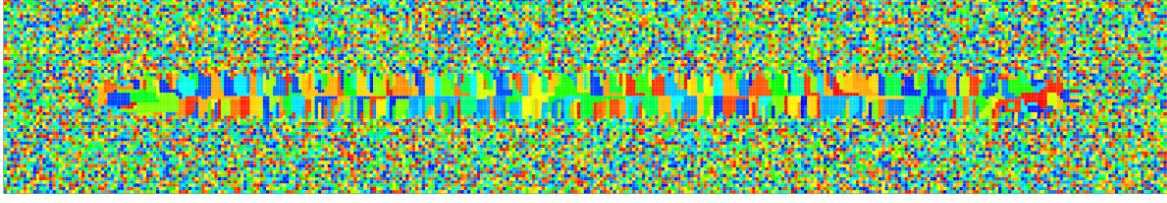
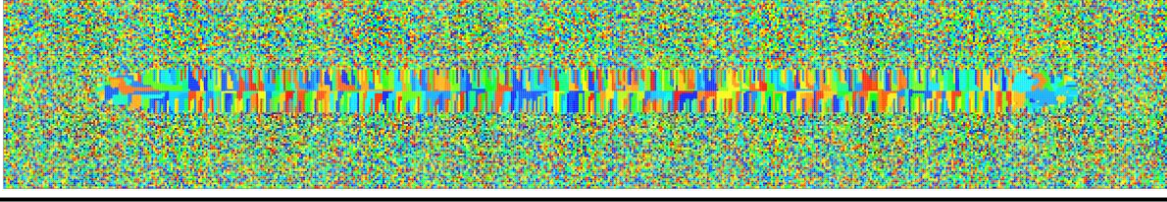
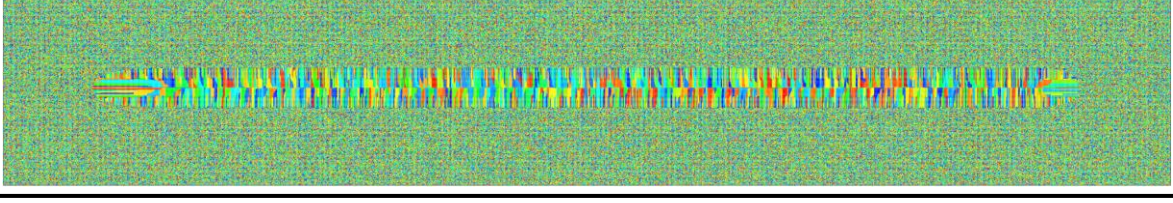


Résultat expérimental

Résultats numériques calcul 3D, vue du dessus, sans couplage

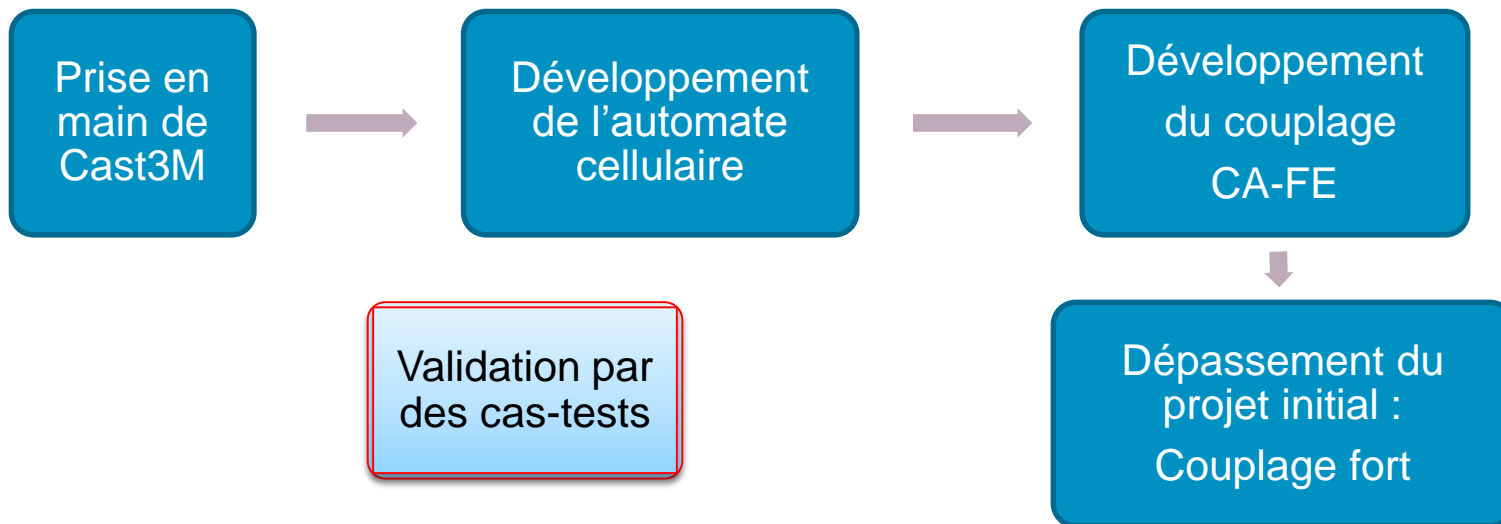


## Influence du nombre de cellules

Nombre de cellules	Temps de calcul (Xeon 3,40 GHz, 4 cœurs, 32Go RAM)	Résultat
Taille		
120 x 20 x 2	275s 4min 30s	
1000 µm		
360 x 60 x 6	1000s 16min 40s	
333 µm		
600 x 100 x 10	5600s 1h 33min	
200 µm		
1920 x 320 x 32	112000s 31h 6min	
62.5 µm		



- Le programme CAFE a permis de modéliser les structures granulaires pour deux configurations de soudage.
- Exclusivement développé au LTA



## Des améliorations à prévoir

- Optimisation des temps de calcul et de la mémoire
- Meilleure répartition du maillage
- Post traitement plus adapté
- ...
- Introduction des critères thermomécaniques
- Introduction de la mécanique des fluides

# Merci de votre attention

---

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives  
Centre de Saclay | 91191 Gif-sur-Yvette Cedex  
T. +33 (0)1 XX XX XX XX | F. +33 (0)1 XX XX XX XX

Direction  
Département  
Service