Opérateur CALC_META

1 But

Calcule l'évolution métallurgique associée à une histoire thermique.

L'opérateur fonctionne en tant que post-traitement du résultat du calcul thermique dans le sens où ce dernier est une donnée « entrant » du calcul métallurgique et qu'il n'y a pas de couplage entre la métallurgie et la thermique. Deux modèles d'évolution sont disponibles :

- un modèle dédié aux transformations austénito-férritiques de l'acier,
- un modèle dédié aux transformations des alliages de zirconium.

Le calcul se fait aux nœuds.

Le résultat obtenu pourra par la suite être utilisé en donnée de chargement d'un calcul thermo-mécanique avec prise en compte de la métallurgie. On peut également à l'issue d'un calcul de métallurgie effectuer un calcul de post-traitement de dureté.

Opérateur réentrant, enrichit une structure de données `evol_ther`.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

2 Syntaxe

```
temper = CALC_META  (

      ◊  reuse = temper,

      ♦  MODELE =  mo  ,                                          [modele]

      ♦  CHAM_MATER   =  chmat  ,                                 [cham_mater]

      ◊  /  TOUT      = 'OUI',                                    [DEFAUT]
         /  GROUP_MA  = lgrma,                                    [l_gr_maille]


      ♦  RESULTAT  =  temper,                                     [evol_ther]

      ♦  ETAT_INIT =  _F (
            ♦  /  META_INIT_ELNO = phasinit,                      [carte]

               /  EVOL_THER = temper                              [evol_ther]
                  ♦  /  NUME_INIT = nuini_temper,                 [I]
                     /  INST_INIT = to,                           [R]
                        ◊  /  CRITERE = 'RELATIF'                 [DEFAUT]
                              ◊  PRECISION =  / 1.E-6             [DEFAUT]
                                              / prec              [R]
                           /  CRITERE = 'ABSOLU'
                              ♦ PRECISION = / prec                [R]
               ),

      ♦  COMPORTEMENT =  _F  (
            ♦  RELATION =  / 'ACIER',
                           / 'ZIRC',
       Si RELATION = 'ACIER'
        {
            ◊  / LOI_META   = 'WAECKEL' ,                         [DEFAUT]
        }
       Si RELATION = 'ZIRC'
        {
            ◊  / LOI_META   = 'EDGAR' ,                           [DEFAUT]
        }
            ◊  / TOUT       = 'OUI' ,                           [DEFAUT]
               / GROUP_MA   = lgrma,                            [l_gr_maille]
                 ),

      ◊  OPTION =  |  'DURT_ELNO',
                   |  'DURT_NOEU',
                   |  'META_ELNO',
                   |  'META_NOEU',

          )
```


Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

3 Opérandes

3.1 Opérandes MODELE / CHAM_MATER

♦ MODELE = mo ,

Nom du modèle dont les éléments font l'objet du calcul métallurgique.

♦ CHAM_MATER = chmat ,

Nom du champ du matériau affecté sur le modèle mo.

3.2 Opérande RESULTAT

♦ RESULTAT = temper ,

Nom du résultat evol_ther issu d'un calcul thermique à partir duquel on fait un calcul de métallurgie. Ce résultat sera à l'issue du calcul enrichi de l'évolution de champ métallurgique, champs de variables internes dont le nombre et la signification dépendent du modèle de transformation utilisé (cf [§3.3.1]).

3.3 Sélection des mailles concernées par le calcul

Les mots clés TOUT et GROUP_MA permettent à l'utilisateur de choisir les mailles sur lesquelles il souhaite faire ses calculs élémentaires de post-traitement.

/ TOUT = 'OUI'

Toutes les mailles (porteuses d'éléments finis) seront traitées. C'est la valeur par défaut.

/ GROUP_MA = l_grma

Seules les mailles incluses dans l_grma seront traitées..

3.4 Mot clé COMPORTEMENT

♦ COMPORTEMENT =

Renseigne le modèle d'évolution métallurgique utilisé. On ne peut utiliser qu'un modèle d'évolution par calcul.

3.4.1 Opérande RELATION

♦ RELATION = /'ACIER',
/'ZIRC' ,

/ 'ACIER'

Sert à spécifier l'exécution du calcul des transformations métallurgiques de l'acier, aux environs de $800\,°C$, d'une phase ferritique (ferrite, perlite, bainite, martensite) à une phase austénitique (et inversement au refroidissement). Le modèle au chauffage et au refroidissement sont différents (la sélection de ce modèle se fait suivant le mot-clef LOI_META).
L'acier donne cinq phases comme variables internes :

- $V1$: proportion de la phase ferrite ;
- $V2$: proportion de la phase perlite ;
- $V3$: proportion de la phase bainite ;
- $V4$: proportion de la phase martensite ;
- $V5$: proportion de la phase austénite.

La somme de toutes les phases doit être égale à 1.0. Si ce n'est pas le cas (à 1 % près), une alarme est émise.

Les données matériaux nécessaires doivent être renseignées dans DEFI_MATERIAU sous le mot-clé META_ACIER.

/ 'ZIRC'

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

Sert à spécifier l'exécution du calcul pour la transformation métallurgique (au refroidissement) des alliages de zirconium, d'une phase hexagonale compacte à une phase cubique centrée aux environs de $800\,°C$ (la sélection de ce modèle se fait suivant le mot-clef LOI_META).
Le Zircaloy donne trois phases comme variables internes :

- $V1$: proportion de la phase à froid α ;
- $V2$: initialement sans signification et obligatoirement nul ; pour un post-traitement, la fraction de phase α est donnée par $V1+V2$;
- $V3$: proportion de la phase à chaud β.

La somme de toutes les phases doit être égale à 1.0. Si ce n'est pas le cas (à 1 % près), une alarme est émise.

Les données matériaux nécessaires doivent être renseignées dans DEFI_MATERIAU sous le mot-clé META_ZIRC.

3.4.2 Opérande LOI_META

```
Si RELATION = 'ACIER'
 {
      ◊  / LOI_META   = 'WAECKEL' ,                    [DEFAUT]
 }
Si RELATION = 'ZIRC'
 {
      ◊  / LOI_META   = 'EDGAR' ,                      [DEFAUT]
 }
```

Sert à spécifier le modèle métallurgique utilisé :

- Pour l'acier, le modèle de Waeckel (voir R4.04.01) ;
- Pour le Zircaloy, le modèle EDGAR (voir R4.04.04).

Le modèle de Waeckel ajoute trois variables internes à celles décrivant les phases de l'acier :

- $V6$: taille de grain austénitique ;
- $V7$: température aux points de Gauss ;
- $V8$: température de transformation martensitique.

Le modèle EDGAR ajoute deux variables internes à celles décrivant les phases du Zircaloy :

- $V4$: température aux nœuds ;
- $V5$: temps correspondant soit à la température de début de transformation à l'équilibre si la fraction de phase α vaut 1 initialement, soit à la température de fin de transformation à l'équilibre si la fraction de phase α vaut 0 initialement. Cette variable est utilisée pour calculer la vitesse au chauffage, respectivement au refroidissement (méthode de la sécante glissante), qui sert à déterminer les températures de début de transformation au chauffage ou au refroidissement.

3.4.3 Opérandes TOUT / GROUP_MA

```
◊  /  TOUT      =  'OUI' ,
   /  GROUP_MA  =  lgrma ,
```

Spécifient les mailles sur lesquelles le modèle est utilisé et permet de n'affecter le calcul que sur une sous partie du maillage total.

3.5 Mot clé ETAT_INIT

♦ ETAT_INIT =

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

```
♦  / META_INIT_ELNO = phasinit,
   / EVOL_THER      = temper
```

État métallurgique initial.
Attention : La structure de données thermique EVOL_THER pour l'état initial doit être la même que celle enrichie par la commande.

3.5.1 Opérande META_INIT_ELNO

```
/  META_INIT_ELNO = phasinit
```

Définit l'affectation du champ de variables internes initial constant par élément à partir d'une carte définie par CREA_CHAMP. Seules les variables dont l'affectation initiale a un sens sont à renseigner. On ne renseigne donc que les variables correspondant à une proportion de phase, plus éventuellement celle correspondant à la taille de grain austénitique si elle n'est pas nulle.

Dans le cas de 'ACIER', on renseigne obligatoirement toutes les phases et la taille de grain, sinon le code s'arrête en erreur fatale.

Si l'utilisateur n'a pas renseigné correctement la somme des phases froides, c'est le code qui remplacera par la somme calculée à partir des données. Une alarme sera alors émise.

Dans le cas de 'ZIRC', on renseigne obligatoirement toutes les phases et le temps correspondant à la température de début de transformation à l'équilibre sinon le code s'arrête en erreur fatale.

3.5.2 Opérandes EVOL_THER / NUME_INIT / INST_INIT / PRECISION / CRITERE

```
/ EVOL_THER = temper
      ♦ / NUME_INIT = nuini_temper,
        / INST_INIT = to,
       ◊ /CRITERE = 'RELATIF'
              ◊ PRECISION = / 1.E-6
                            / prec
         /CRITERE ='ABSOLU'
              ♦ PRECISION = / prec
                 ),
```

Définit le concept evol_ther dans lequel on va extraire l'état initial à partir duquel le calcul sera effectué. Ce concept doit contenir des grandeurs métallurgiques.
La définition de l'état initial peut se faire par numéro d'ordre stocké ou par instant associé au calcul.
NUME_INIT permet la définition à partir du numéro d'ordre stocké et INST_INIT permet la définition à partir de l'instant de calcul.
Dans ce cas, PRECISION et CRITERE permettent de définir la précision et le critère selon lesquels l'extraction sera réalisée. Si le CRITERE = 'ABSOLU' est choisi, il est obligatoire de renseigner le champ PRECISION ; pour CRITERE = 'RELATIF', une précision de $1.E-6$ est donnée par défaut, et peut être éventuellement modifiée en renseignant le champ PRECISION.

3.6 Opérande OPTION

```
◊  OPTION =
```

```
|  'DURT_ELNO'
```

Dureté aux nœuds par élément à partir des phases métallurgiques (cf. [R4.04.01]).

```
|  'DURT_NOEU'
```

Dureté aux nœuds à partir des phases métallurgiques (cf. [R4.04.01]).

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

| 'META_ELNO'

Proportion de phase métallurgique aux nœuds par éléments.

| 'META_NOEU'

Proportion de phase métallurgique aux nœuds.

4 Exemple dans le cas d'un acier

```
# CREATION DU CHAMP DE VARIABLES INTERNES INITIAL (70% DE FERRITE, 30% DE
BAINITE et le reste à zéro)

phasinit = CREA_CHAMP( OPERATION ='AFFE',
                       TYPE_CHAM = 'CART_VAR2_R',
                       MAILLAGE  = mail,
                    AFFE =_F( TOUT    = 'OUI',
                          NOM_CMP = ('V1','V2','V3','V4','V5','V6','V7'),
                                VALE    = (0.7,0.0,0.3,0.0,0,1.,0.))),

# CALCUL DE L'EVOLUTION THERMIQUE

tempe = THER_LINEAIRE( MODELE     = moth,
                       CHAM_MATER = chmat ,
                       EXCIT      = _F(CHARGE = chth1),
                       INCREMENT  = (LIST_INST= lr8),
                       TEMP_INIT  =(VALE   = 700),)

# CALCUL DE L'EVOLUTION DES PHASES METALLURGIQUES

tempe = CALC_META ( reuse      = tempe,
                    MODELE     = moth,
                    CHAM_MATER = chmat,
                    RESULTAT   = tempe,
                    ETAT_INIT  =_F(META_INIT_ELNO = phasinit),
                    COMPORTEMENT  =(RELATION ='ACIER',
                    TOUT       = 'OUI'))
```


Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)