Modèle de comportement élasto-visqueux META_LEMA_ANI avec prise en compte de la métallurgie pour les tubes de gaine du crayon combustible

Résumé :

En vue de la réalisation de calculs 3D de la gaine combustible en situation accidentelle de type APRP, le département MMC a formulé, pour les tubes en Zircaloy, un modèle de comportement élastovisqueux, sans seuil, anisotrope et prenant en compte l'effet de la transformation de phase alpha-bêta sur le comportement mécanique.

On décrit ici ce modèle, disponible dans *Code_Aster* sous le nom de META_LEMA_ANI, et son algorithme de résolution. Il est disponible en 3D, déformation plane, axisymétrie.

La matrice d'anisotropie de Hill peut être renseignée soit en coordonnées cartésiennes, soit dans le repère cylindrique associé au tube. À ce jour, on a supposé que l'axe axial z du repère cylindrique associé au tube correspondait à celui du repère global. Si bien que si plusieurs tubes doivent être modélisés ou bien si l'axe du tube ne correspond pas à celui du repère global, le modèle n'est pas correct. A terme, il faudrait soulever cette restriction.

Les équations en vitesse sont intégrées numériquement par un schéma implicite d'Euler. Le système d'équations obtenu est résolu par la méthode de Newton.

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

Table des matières

1 Contexte....3
2 Relation META_LEMA_ANI dans Code_Aster....4
2.1 Généralités....4
2.2 Restriction d'utilisation du modèle....4
2.3 Utilisation....4
2.4 Variables internes....5
3 Notations....5
4 Présentation du modèle META_LEMA_ANI....6
4.1 Remarques importantes....6
4.2 Équations du modèle....6
5 Intégration du modèle....9
5.1 Discrétisation des équations....9
5.2 Résolution....10
5.2.1 Algorithme....11
5.2.2 Résolution du problème isotrope....12
5.3 Expression de la matrice tangente....13
6 Description des versions....14
Annexe 1 : Expression du Jacobien....15

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

1 Contexte

Lors de la première phase d'un accident de dimensionnement de type APRP (Accident de perte de Réfrigérant Primaire), les crayons combustibles sont soumis à une rapide élévation de température, à des transformations de phase du matériau et à des changements de conditions aux limites mécaniques. L'étude d'un accident d'APRP nécessite une bonne connaissance du comportement de la gaine des crayons combustibles lors de la première phase dite de « gonflement-rupture ». En particulier, il est nécessaire d'avoir une bonne idée de la déformation totale de la gaine.

Des modèles de transition de phases, de comportement mécanique et de rupture ont été développés, et identifiés sur la base d'essais expérimentaux.

Pour la partie métallurgique, le Zircaloy subit des transformations métallurgiques entre $700\,°C$ et $1000\,°C$, où ils passent d'une phase de structure hexagonale compacte (phase froide alpha ou α) à une phase de structure cubique (phase chaude bêta ou β). On trouvera dans [R4.04.04], les équations régissant les cinétiques des transformations au chauffage (α se transforme en β) et au refroidissement (β se transforme en α).

Pour la partie mécanique, le modèle est écrit en unidimensionnel, dans la direction circonférentielle du tube. Même si ce modèle est conforme aux expériences, son utilisation pour réaliser des calculs 3D aux éléments finis n'est pas possible. De plus, les alliages en zirconium présentent un comportement anisotrope, au moins en phase α, qui ne peut être pris en compte dans un modèle 1D. D'un point de vue sollicitation, le tube subit un gradient azimutal de température entraînant des gradients de déformation circonférentielle, mais aussi axiale, qu'il est important de prendre en compte pour obtenir une réponse conforme à l'expérience.

C'est pourquoi, le département MMC a formulé un modèle 3D pour décrire le comportement de la gaine en Zircaloy dans le cas d'une analyse type APRP. Les lois de Norton décrivant le comportement 1D du matériau dans différents domaines $(\alpha, \alpha-\beta, \beta)$ sont remplacées par des lois de Lemaître, avec prise en compte de l'anisotropie de la phase α. La phase β est isotrope. Le domaine $\alpha-\beta$ est supposé présenter une anisotropie proportionnelle au taux de présence de la phase α.

On décrit ici l'implantation numérique de ce modèle, disponible dans *Code_Aster* sous le nom de `META_LEMA_ANI`, et son algorithme de résolution. Il est disponible en 3D, déformation plane, axisymétrie.

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

2 Relation META_LEMA_ANI dans *Code_Aster*

2.1 Généralités

Le modèle présenté est élastovisqueux, sans seuil (la limite d'élasticité est nulle), avec pris en compte des transformations métallurgiques de ce matériau et pris en compte de l'anisotropie de la phase α. La viscosité est décrit par une loi de type Lemaître.

Le modèle est introduit dans *Code_Aster* en 3D, déformations planes (D_PLAN), et axisymétrie (AXIS) sous le nom de META_LEMA_ANI.

La prise en compte de l'anisotropie s'effectue par un tenseur d'ordre 4 (matrice de Hill $\boldsymbol{M}$) affectant les lois dévolution de la déformation visqueuse et la contrainte équivalente (contrainte de Von Mises au sens de Hill).

Les équations en vitesse sont intégrées numériquement par un schéma implicite d'Euler. Le système obtenu est résolu par la méthode de Newton.

2.2 Restriction d'utilisation du modèle

Les équations du modèle peuvent être écrites soit en cartésiennes, soit dans le repère cylindrique associé au tube $(1=e_r, 2=e_\theta, 3=z)$. Ceci est du au fait que les coefficients de la matrice de Hill, $\boldsymbol{M}$, sont connus dans ce repère.

Au niveau de l'implantation dans *Code_Aster*, on effectue dans ce cas un changement de variables des champs tensoriels (un autre choix aurait été de faire subir le changement de variable au tenseur de Hill $\boldsymbol{M}$, mais il est plus simple de procéder à l'inverse)

- Pour un calcul 3D ou en déformation plane, le tenseur des contraintes connu dans le repère global $(1=x, 2=y, 3=z)$ est transformé dans le repère local $(1=e_r, 2=e_\theta, 3=z)$;
- Pour un calcul 2D, axisymétrique, le tenseur des contraintes connu dans le repère global $(1=e_r, 2=z, 3=e_\theta)$ est calculé dans le repère local $(1=e_r, 2=e_\theta, 3=z)$; dans ce cas, le changement de variables est simple puisqu'il s'agit uniquement d'intervertir les indices 2 et 3.

Limitation : on a supposé que l'axe z du repère cylindrique associé au tube correspondait à celui du repère global. Si bien que si plusieurs tubes doivent être modélisés ou bien si l'axe du tube ne correspond pas à celui du repère global, le modèle n'est pas correct. À terme, il faudrait soulever cette restriction.

2.3 Utilisation

1) L'utilisation de ce modèle nécessite un calcul préalable des proportions des phases α et β, activé par le mot clé facteur COMPORTEMENT='ZIRC' de l'opérateur CALC_META.
2) Dans l'opérateur STAT_NON_LINE, on accède à ce modèle mécanique en utilisant le mot clé facteur suivant :

```
| COMPORTEMENT = (
                 RELATION =  'META_LEMA_ANI'
                 RELATION_KIT='ZIRC'
                 ITER_INTE_MAXI = nombre d'itérations maximum pour Newton
                 RESI_INTE_RELA = critère d'arrêt du processus de Newton
```


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

3) Les données matériaux relatives au modèle META_LEMA_ANI, sont renseignées dans l'opérateur DEFI_MATERIAU en utilisant les mots clés facteur ELAS_META et META_LEMA_ANI.

Remarque : **les matrices de Hill pour les phases α et β sont données dans le repère cylindrique $(1=e_r, 2=e_\theta, 3=z)$, même pour un calcul 2D axisymétrique où les indices 2 et 3 sont intervertis.**

2.4 Variables internes

Les variables internes du modèle META_LEMA_ANI sont :

$V1$: la déformation visqueuse cumulée,
$V2$: l'indicateur de plasticité (0 ou 1).

3 Notations

On notera par :

$\boldsymbol{Id}$	matrice identité
$Tr\,\boldsymbol{A}$	trace du tenseur $\boldsymbol{A}$
$\tilde{\boldsymbol{A}}$	partie déviatorique du tenseur $\boldsymbol{A}$ définie par $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{A} - (\frac{1}{3}\mathrm{Tr}\,\mathbf{A})\mathbf{Id}$
:	produit doublement contracté : $\mathbf{A}:\mathbf{B} = \sum_{i,j} A_{ij}B_{ij} = \mathrm{Tr}(\mathbf{A}\mathbf{B}^T)$
$\otimes$	produit tensoriel : $(\mathbf{A}\otimes\mathbf{B})_{ijkl} = A_{ij}B_{kl}$
A_{eq}	valeur équivalente de Von Mises au sens de Hill définie par $A_{eq} = \sqrt{\mathbf{A}:\mathbf{M}:\mathbf{A}}$
$\boldsymbol{M}$	Matrice d'anisotropie de Hill
λ , μ , E , ν , K	coefficients de l'élasticité isotrope
α	coefficient de dilatation thermique
T	température
T_{ref}	température de référence

Par ailleurs, dans le cadre d'une discrétisation en temps, toutes les quantités évaluées à l'instant précédent sont indicées par $^-$, les quantités évaluées à l'instant $t+\Delta t$ ne sont pas indicées et les incréments sont désignés par Δ. On a ainsi :

$$\Delta Q = Q - Q^-$$

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

4 Présentation du modèle META_LEMA_ANI

4.1 Remarques importantes

- Par la suite, les équations du modèle sont présentées dans un repère « générique » (1,2,3) qui représente soit le repère cartésien (Ox,Oy,Oz), soit le repère cylindrique $(1=e_r, 2=e_\theta, 3=z)$ associé à la gaine d'axe z.
- D'un point de vue purement métallurgique, le Zircaloy comporte deux phases, la phase froide α et la phase chaude β, qui peuvent être présentes simultanément, en respectant la condition $Z_\alpha + Z_\beta = 1$, où Z_α et Z_β représentent les proportions de phase α et de phase β, respectivement.
- D'un point de vue mécanique, on considère, pour les paramètres matériaux du modèle mécanique, trois phases : la phase 1 = phase α pure, la phase 2 = mélange $\alpha\beta$ et la phase 3 = phase β pure. C'est pourquoi, on voit apparaître trois indices par la suite dans les équations. Les trois phases sont distinguées de la manière suivante :
  - Si $0 \leq Z_\alpha \leq 0.01 \Rightarrow$ phase $3 = \beta$
  - Si $0.01 \leq Z_\alpha \leq 0.1 \Rightarrow$ phases $3 = \beta$ et $2 = \alpha\beta$ (loi des mélanges linéaire)
  - Si $0.1 \leq Z_\alpha \leq 0.9 \Rightarrow$ phase $2 = \alpha\beta$
  - Si $0.9 \leq Z_\alpha \leq 0.99 \Rightarrow$ phases $1 = \alpha$ et $2 = \alpha\beta$ (loi des mélanges linéaire)
  - Si $0.99 \leq Z_\alpha \leq 1 \Rightarrow$ phase $1 = \alpha$

4.2 Équations du modèle

Les équations du modèle sont :

- Partition des déformations en des parties élastique $\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathbf{e}}$, thermique ε^{th} et visqueuse $\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathbf{v}}$:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathbf{e}} + \varepsilon^{th}\mathbf{Id} + \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathbf{v}} \text{ avec } \varepsilon^{th} = \alpha(T - T_{ref})$$

- Relation contrainte – déformation : on sépare la partie déviatorique de la partie sphérique :

$$\boldsymbol{\sigma} = \tilde{\boldsymbol{\sigma}} + \frac{1}{3}\sigma_{pp}\mathbf{Id}$$

$$\sigma_{pp} = 3K\left(\varepsilon_{pp} - 3\varepsilon^{th}\right)$$

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = 2\mu\left(\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} - \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathbf{v}}\right)$$

- Lois d'écoulement de la déformation visqueuse :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{v}} = \dot{p}\frac{\mathbf{M}:\boldsymbol{\sigma}}{\sigma_{eq}}$$

avec la contrainte équivalente au sens de Hill définie par : $\sigma_{eq} = \sqrt{\boldsymbol{\sigma}:\mathbf{M}:\boldsymbol{\sigma}}$

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

$$\mathbf{M} = \begin{cases} \mathbf{M^3} & \text{si } 0 \le Z_\alpha \le 0.01 \\ \mathbf{M^2} = Z_\alpha \mathbf{M^1} + (1-Z_\alpha)\mathbf{M^3} & \text{si } 0.01 \le Z_\alpha \le 0.99 \\ \mathbf{M^1} & \text{si } 0.99 \le Z_\alpha \le 1 \end{cases}$$

La matrice d'anisotropie de Hill, M, est de la forme :

$$\mathbf{M}_{(\mathbf{e_r},\mathbf{e_\theta},\mathbf{z})} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & M_{13} & 0 & 0 & 0 \\ M_{12} & M_{22} & M_{23} & 0 & 0 & 0 \\ M_{13} & M_{23} & M_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & M_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & M_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & M_{66} \end{pmatrix} \text{ avec } \begin{cases} M_{11}+M_{12}+M_{13}=0 \\ M_{12}+M_{22}+M_{23}=0 \\ M_{13}+M_{23}+M_{33}=0 \end{cases}$$

Soit :

$$M_{12} = \frac{1}{2}(-M_{11}-M_{22}+M_{33})$$
$$M_{13} = \frac{1}{2}(-M_{11}+M_{22}-M_{33})$$
$$M_{23} = \frac{1}{2}(M_{11}-M_{22}-M_{33})$$

Remarque : dans le cas isotrope, on a :

$$M_{11}=M_{22}=M_{33}=1$$
$$M_{12}=M_{13}=M_{23}=-\frac{1}{2}$$
$$M_{44}=M_{55}=M_{66}=\frac{3}{4}=0.75$$

- La vitesse de déformation équivalente est donnée par :

$$\dot{p} = \left(\frac{\sigma_{eq}}{a p^m}\right)^n e^{-Q/T} \text{ ou de manière équivalente } \sigma_{eq} = a\left(e^{Q/T}\right)^{1/n} p^m \dot{p}^{1/n} = \sigma_v$$

contrainte visqueuse σ_v

- Loi des mélanges sur la contrainte visqueuse σ_v

$$\sigma_{eq} = \sigma_v = \sum_{i=1}^{3} f_i(Z_\alpha)\sigma_{vi} \text{ avec } \sigma_{vi} = a_i\left(e^{Q_i/T}\right)^{1/n_i} p^{m_i} \dot{p}^{1/n_i}$$

avec

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

$$f_1 = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad 0 \leq Z_\alpha \leq 0.9 \\ \dfrac{(Z_\alpha - 0.9)}{0.09} & \text{si} \quad 0.9 \leq Z_\alpha \leq 0.99 \\ 1 & \text{si} \quad 0.99 \leq Z_\alpha \leq 1 \end{cases}, \qquad f_3 = \begin{cases} 1 & \text{si} \quad 0 \leq Z_\alpha \leq 0.01 \\ \dfrac{(0.1 - Z_\alpha)}{0.09} & \text{si} \quad 0.01 \leq Z_\alpha \leq 0.1 \\ 0 & \text{si} \quad 0.1 \leq Z_\alpha \leq 1 \end{cases}$$

$$f_2 = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad 0 \leq Z_\alpha \leq 0.01 \\ 1 - \dfrac{(0.1 - Z_\alpha)}{0.09} & \text{si} \quad 0.01 \leq Z_\alpha \leq 0.1 \\ 1 & \text{si} \quad 0.1 \leq Z_\alpha \leq 0.9 \\ 1 - \dfrac{(Z_\alpha - 0.9)}{0.09} & \text{si} \quad 0.9 \leq Z_\alpha \leq 0.99 \\ 0 & \text{si} \quad 0.99 \leq Z_\alpha \leq 1 \end{cases}$$

où (a_i, Q_i, n_i, m_i) sont des paramètres matériaux rattachés aux trois phases métallurgiques.

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

5 Intégration du modèle

5.1 Discrétisation des équations

Connaissant le tenseur des contraintes $\boldsymbol{\sigma}^-$, la déformation visqueuse équivalente p^-, les tenseurs des déformations totales $\boldsymbol{\varepsilon}^-$ et $\Delta\boldsymbol{\varepsilon}$, les températures T^- et T, et la proportion de phase α Z_α, on cherche à déterminer $(\boldsymbol{\sigma}, p)$.

La discrétisation implicite du modèle donne :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathbf{e}} + \varepsilon^{th}\mathbf{Id} + \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathbf{v}} \text{ avec } \varepsilon^{th} = \alpha(T - T_{ref}) \quad \textbf{éq. 5.1-1}$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \tilde{\boldsymbol{\sigma}} + \frac{1}{3}\mathrm{Tr}\,\boldsymbol{\sigma}\,\mathbf{Id} \quad \textbf{éq. 5.1-2}$$

$$\mathrm{Tr}\,\boldsymbol{\sigma} = 3K\left(\mathrm{Tr}\,\boldsymbol{\varepsilon} - 3\varepsilon^{th}\right) \quad \textbf{éq. 5.1-3}$$

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = 2\mu\left(\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} - \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathbf{v}}\right) \quad \textbf{éq. 5.1-4}$$

$$\Delta\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathbf{v}} = \Delta p\frac{\mathbf{M}:\boldsymbol{\sigma}}{\sigma_{eq}} \quad \textbf{éq. 5.1-5}$$

$$\sigma_{eq} = \sqrt{\boldsymbol{\sigma}:\mathbf{M}:\boldsymbol{\sigma}} \quad \textbf{éq. 5.1-6}$$

$$\sigma_{eq} = \sum_{i=1}^{3} f_i(Z_\alpha)a_i\left(e^{Q_i/T}\right)^{1/n_i}\left(p^- + \Delta p\right)^{m_i}\left(\frac{\Delta p}{\Delta t}\right)^{1/n_i} \quad \textbf{éq. 5.1-7}$$

Dans la résolution de ce système, seule la contrainte déviatorique $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$ est inconnue car la trace de $\boldsymbol{\sigma}$ est fonction uniquement des déformations totale $\boldsymbol{\varepsilon}$ et thermique ε^{th}, qui sont connues.

En remplaçant dans l'équation 5.1-5, le tenseur des déformations visqueuses en fonction du tenseur de contraintes déviatoriques tirée de l'équation 5.1-4, on obtient finalement le système suivant :

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}} + 2\mu\Delta p\frac{\mathbf{M}:\boldsymbol{\sigma}}{\sigma_{eq}} = 2\mu\Delta\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} + \underbrace{\frac{2\mu}{2\mu^-}\tilde{\boldsymbol{\sigma}}^-}_{\tilde{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathbf{Tr}}} = \tilde{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathbf{Tr}} \quad \textbf{éq. 5.1-8}$$

$$\sigma_{eq} = \sqrt{\boldsymbol{\sigma}:\mathbf{M}:\boldsymbol{\sigma}} \quad \textbf{éq. 5.1-9}$$

$$\sigma_{eq} = \sum_{i=1}^{3} f_i(Z_\alpha)a_i\left(e^{Q_i/T}\right)^{1/n_i}\left(p^- + \Delta p\right)^{m_i}\left(\frac{\Delta p}{\Delta t}\right)^{1/n_i} \quad \textbf{éq. 5.1-10}$$

Le tenseur des contraintes $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathbf{Tr}}$ est connu puisqu'il est fonction de l'incrément du tenseur des déformations totales et du tenseur des contraintes à l'instant précédent.
La résolution de ce système d'équations, dont les inconnus sont $(\tilde{\boldsymbol{\sigma}}, \sigma_{eq}, \Delta p)$, est faite dans le *Code_Aster* par une méthode de Newton.

Une fois résolu ce système, on en déduit le tenseur des contraintes $\boldsymbol{\sigma}$ et la déformation équivalente p :

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

$$\boldsymbol{\sigma} = \tilde{\boldsymbol{\sigma}} + K\left[\mathrm{Tr}\left(\boldsymbol{\varepsilon}^{-} + \Delta\boldsymbol{\varepsilon}\right) - 3\alpha(T - T_{ref})\right]\mathbf{Id} \qquad \text{éq. 5.1-11}$$

$$p = p^{-} + \Delta p \qquad \text{éq. 5.1-12}$$

5.2 Résolution

Par la suite, on posera :

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = 2\mu\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} \qquad \text{éq. 5.2-1}$$

$$N_i = \frac{1}{n_i} \qquad \text{éq. 5.2-2}$$

$$\gamma_i = \frac{1}{2\mu} f_i(Z_\alpha) a_i \frac{e^{N_i Q_i / T}}{\Delta t^{N_i}} \qquad \text{éq. 5.2-3}$$

Le système 5.1-8 à 5.1-10 s'écrit en contrainte :

$$\mathbf{C^1}(\tilde{\boldsymbol{\sigma}}, \Delta p) = \tilde{\boldsymbol{\sigma}} + 2\mu\Delta p \frac{\mathbf{M}:\boldsymbol{\sigma}}{\sqrt{\boldsymbol{\sigma}:\mathbf{M}:\boldsymbol{\sigma}}} - \tilde{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathbf{Tr}} = 0 \qquad \text{éq. 5.2-4}$$

$$C^2(\boldsymbol{\sigma}, \Delta p) = \sqrt{\boldsymbol{\sigma}:\mathbf{M}:\boldsymbol{\sigma}} - 2\mu \sum_{i=1}^{3} \gamma_i \left(p^{-} + \Delta p\right)^{m_i} \Delta p^{N_i} = 0 \qquad \text{éq. 5.2-5}$$

Pour faciliter la méthode de Newton, il est préférable de choisir des inconnues dans la même unité (donc soit des contraintes, soit des déformations). On utilisera pour cela la relation 5.2-1 entre le tenseur des contraintes et le tenseur des déformations élastiques $\tilde{\varepsilon}_{ij}^{e}$ qui devient alors l'inconnue du problème (ce qui présente l'avantage d'adimensionnaliser le système). Finalement, le système à résoudre s'écrit :

$$\mathbf{G^1}(\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}, \Delta p) = \frac{C^1}{2\mu} = \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} + \Delta p \frac{\mathbf{M}:\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}}{\sqrt{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}:\mathbf{M}:\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}}} - \frac{\tilde{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathbf{Tr}}}{2\mu} = 0 \qquad \text{éq. 5.2-6}$$

$$G^2(\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}, \Delta p) = \frac{C^2}{2\mu} = \sqrt{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}:\mathbf{M}:\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}} - \sum_{i=1}^{3} \gamma_i \left(p^{-} + \Delta p\right)^{m_i} \Delta p^{N_i} = 0 \qquad \text{éq. 5.2-7}$$

De manière plus contractée, on pose :

$$\mathbf{G}(\mathbf{y}) = \mathbf{0} = \begin{bmatrix} \mathbf{G^1}(\mathbf{y}) \\ G^2(\mathbf{y}) \end{bmatrix} \text{ avec } \mathbf{y} = \begin{bmatrix} \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} \\ \Delta p \end{bmatrix} \qquad \text{éq. 5.2-8}$$

La résolution par la méthode de Newton donne :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \mathbf{G}(\mathbf{y_n})}{\partial \mathbf{y}} \delta\mathbf{y_n} = -\mathbf{G}(\mathbf{y_n}) \\ \mathbf{y_{n+1}} = \mathbf{y_n} + \delta\mathbf{y_n} \end{cases} \qquad \text{éq. 5.2-9}$$

En itérant en n jusqu'à convergence.

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

On donne l'expression du tenseur $\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{y}}$ ci-après : les calculs sont précisés en annexe 1 (dans l'annexe les expressions sont données sous forme indicielle).

$$\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{y}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbf{G^1}}{\partial \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}} & \frac{\partial \mathbf{G^1}}{\partial \Delta p} \\ \frac{\partial G^2}{\partial \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}} & \frac{\partial G^2}{\partial \Delta p} \end{bmatrix} \qquad \text{éq. 5.2-10}$$

Où chaque terme vaut :

$$\frac{\partial \mathbf{G^1}}{\partial \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}} = \mathbf{C} + \frac{\Delta p}{\varepsilon^e_{eq}} \mathbf{M} - \frac{\Delta p}{\left(\varepsilon^e_{eq}\right)^3} (\mathbf{M} : \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}) \otimes (\mathbf{M} : \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}) \; ; \; \frac{\partial \mathbf{G^1}}{\partial \Delta p} = \frac{1}{\varepsilon^e_{eq}} \mathbf{M} : \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} \qquad \text{éq. 5.2-11}$$

$$\frac{\partial G^2}{\partial \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}} = \frac{\mathbf{M} : \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}}{\varepsilon^e_{eq}} \; ; \; \frac{\partial G^2}{\partial \Delta p} = - \sum_{i=1}^{3} \gamma_i \left(p^- + \Delta p\right)^{m_i} \Delta p^{N_i} \left[\frac{N_i}{\Delta p} + \frac{m_i}{p^- + \Delta p} \right] \qquad \text{éq. 5.2-12}$$

Avec $C_{ijkl} = \frac{1}{2}\left(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{jk}\delta_{il}\right)$

5.2.1 Algorithme

1) Si $\sigma^{Tr}_{eq} = 0$ alors $\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = \tilde{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathbf{Tr}}$ et $p = p^-$

2) Sinon

2.1) Initialisation de la méthode de Newton : solution pour M isotrope

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}} + 3\mu\Delta p \frac{\tilde{\boldsymbol{\sigma}}}{\sigma_{eq}} - \tilde{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathbf{Tr}} = 0 \Leftrightarrow \tilde{\boldsymbol{\sigma}} \left[1 + 3\mu \frac{\Delta p}{\sigma_{eq}} \right] = \tilde{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathbf{Tr}} \qquad \text{éq. 5.2.1-1}$$

$$\Leftrightarrow \sigma_{eq} = \sigma^{Tr}_{eq} - 3\mu\Delta p$$

$$\sigma^{Tr}_{eq} - 3\mu\Delta p = 2\mu \sum_{i=1}^{3} \gamma_i \left(p^- + \Delta p\right)^{m_i} \Delta p^{N_i} \qquad \text{éq. 5.2.1-2}$$

Une fois Δp connue (par l'algorithme décrit au § 5.2.2), on en déduit σ_{eq} et $\tilde{\sigma}$ qui servent pour l'initialisation de Newton

2.2) Itération de Newton

Le processus itératif s'arrête lorsque le maximum de la fonction $G(y)$ est inférieur ou égal au critère donné par l'utilisateur (mot clé RESI_INTE_RELA sous COMPORTEMENT de l'opérateur STAT_NON_LINE). Si le nombre d'itérations dépasse celui donné par l'utilisateur, le processus s'arrête en erreur fatale.

3) Calcul de la matrice tangente

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

5.2.2 Résolution du problème isotrope

On doit résoudre l'équation suivante :

$$\sigma_{eq}^{Tr} - 3\mu\Delta p = 2\mu \sum_{i=1}^{3} \gamma_i \left(p^- + \Delta p\right)^{m_i} \Delta p^{N_i} \qquad \text{éq. 5.2.2-1}$$

On posera par la suite $\Delta p = x \geq 0$.

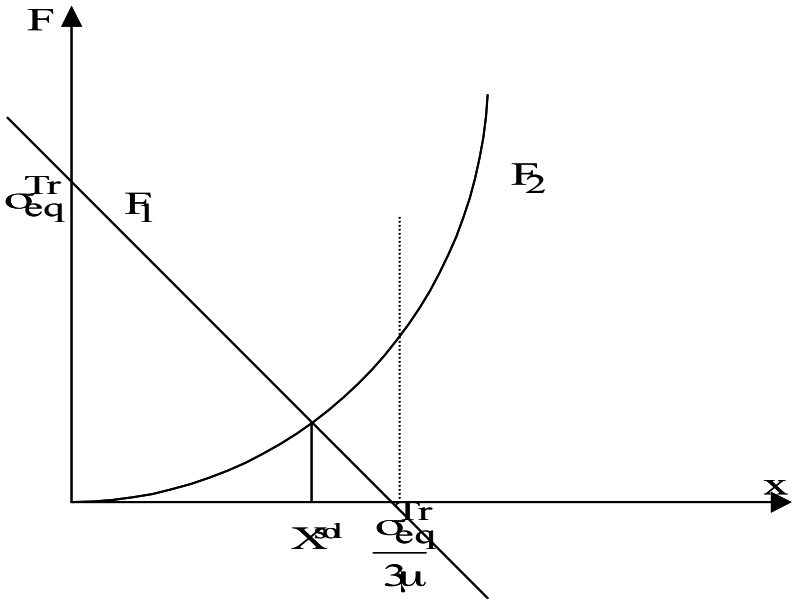
On pose également :

$$F_1(x) = \sigma_{eq}^{Tr} - 3\mu x \Rightarrow F_1'(x) = -3\mu \leq 0 \quad \forall x \qquad \text{éq. 5.2.2-2}$$

Et

$$F^2(x) = 2\mu \sum_{i=1}^{3} \gamma_i \left(p^- + x\right)^{m_i} x^{N_i}$$
$$F^{2'}(x) = 2\mu \sum_{i=1}^{3} \gamma_i \left[m_i \left(p^- + x\right)^{m_i - 1} x^{N_i} + N_i \left(p^- + x\right)^{m_i} x^{N_i - 1} \right] \qquad \text{éq. 5.2.2-3}$$

La fonction $F_1(x)$ est une fonction linéaire décroissante en x. La fonction $F_2(x)$ est une fonction positive croissante en x. La solution X^{sol} est bornée entre 0 et $\frac{\sigma_{eq}^{Tr}}{3\mu}$. On résout l'équation 5.3.2-1 par une méthode de Newton avec borne contrôlée. L'initialisation de Newton se fera avec la borne supérieure $\frac{\sigma_{eq}^{Tr}}{3\mu}$.



La méthode de Newton donne :

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

$$F(x) = F^1(x) - F^2(x) = \sigma_{eq}^{Tr} - 3\mu x - 2\mu \sum_{i=1}^{3} \gamma_i \left(p^- + x\right)^{m_i} x^{N_i}$$

$$x^{k+1} = x^k - \frac{F(x^k)}{F'(x^k)}$$

éq. 5.2.2-4

Soit :

$$x^{k+1} = x^k - \frac{\sigma_{eq}^{Tr} - 3\mu x^k - 2\mu \sum_{i=1}^{3} \gamma_i \left(p^- + x^k\right)^{m_i} x^{k\,N_i}}{-3\mu - 2\mu \sum_{i=1}^{3} \gamma_i \left[m_i \left(p^- + x^k\right)^{m_i - 1} x^{N_i} + N_i \left(p^- + x^k\right)^{m_i} x^{k\,N_i - 1} \right]}$$

éq. 5.2.2-5

5.3 Expression de la matrice tangente

Le système formé des équations du modèle écrit sous forme discrétisée $(G(y)=0)$ est vérifié en fin d'incrément. Pour une petite variation de G, en considérant cette fois $\Delta\varepsilon$ comme variable et non comme paramètre, le système reste à l'équilibre et on vérifie $dG=0$, c'est-à-dire :

$$\begin{bmatrix} \dfrac{\partial \mathbf{G^1}}{\partial \widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}} & \dfrac{\partial \mathbf{G^1}}{\partial \Delta p} \\ \dfrac{\partial G^2}{\partial \widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}} & \dfrac{\partial G^2}{\partial \Delta p} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta \widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} \\ \delta \Delta p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \delta \Delta \widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}} \\ 0 \end{bmatrix}$$

éq. 5.3-1

Les équations précédentes montrent que l'on est conduit à réutiliser la même matrice $\dfrac{\partial G}{\partial y}$ que précédemment pour évaluer l'opérateur tangent.
Il faut évidemment compléter par la partie trace. On peut au final écrire la matrice tangente H comme suit :

$$\delta\sigma_{ij} = H_{ijkl}\,\delta\Delta\varepsilon_{kl},\ D_{ijkl} = \left[\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{y}}\right]^{-1}_{ijkl}$$

$$H_{ijkl} = 2\mu D_{ijkl} + \frac{1}{3}\left(2\mu D_{ijpp} + 3K\delta_{ij}\right)\delta_{kl}$$

éq. 5.3-1

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

6 Description des versions

Indice document	Version Aster	Auteur(s) Organisme(s)	Description des modifications
A	9.4	V.Cano, R&D AMA	Texte initial

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

Annexe 1 : Expression du Jacobien

Afin d'obtenir le tenseur $\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{y}}$ qui servira pour la résolution de Newton, il suffit de linéariser chacune des expressions ci-dessous :

$$\mathbf{G^1} = \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} + \Delta p \frac{\mathbf{M} : \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}}{\sqrt{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} : \mathbf{M} : \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}}} - \frac{\tilde{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathbf{Tr}}}{2\mu} \qquad \textbf{éq. A1-1}$$

$$G^2 = \sqrt{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} : \mathbf{M} : \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}} - \sum_{i=1}^{3} \gamma_i \left(p^- + \Delta p\right)^{m_i} \Delta p^{1/n_i} \qquad \textbf{éq. A1-2}$$

- **Linéarisation de l'équation A1-1 :**

$$\mathbf{G^1} + \delta\mathbf{G^1} = \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} + \delta\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} + (\Delta p + \delta\Delta p) \frac{\mathbf{M} : \left(\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} + \delta\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}\right)}{\sqrt{\left(\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} + \delta\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}\right) : \mathbf{M} : \left(\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} + \delta\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}\right)}} - \frac{1}{2\mu}\tilde{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathbf{Tr}}$$

$$\Leftrightarrow \mathbf{G^1} + \delta\mathbf{G^1} = \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} + \delta\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} + \frac{(\Delta p + \delta\Delta p)\mathbf{M} : \left(\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} + \delta\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}\right)}{\sqrt{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} : \mathbf{M} : \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} + 2\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} : \mathbf{M} : \delta\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}}} - \frac{1}{2\mu}\tilde{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathbf{Tr}}$$

$$\Leftrightarrow \mathbf{G^1} + \delta\mathbf{G^1} = \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} + \delta\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} + \frac{1}{\varepsilon_{eq}^{e}}(\Delta p + \delta\Delta p)\mathbf{M} : \left(\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} + \delta\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}\right)\left(1 - \frac{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} : \mathbf{M} : \delta\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}}{\varepsilon_{eq}^{2e}}\right) - \frac{1}{2\mu}\tilde{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathbf{Tr}}$$

$$\Leftrightarrow \mathbf{G^1} + \delta\mathbf{G^1} = \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} + \delta\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} + \frac{1}{\varepsilon_{eq}^{e}}\left(\Delta p\,\mathbf{M} : \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} + \Delta p\,\mathbf{M} : \delta\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} + \delta\Delta p\,\mathbf{M} : \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}\right)\left(1 - \frac{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} : \mathbf{M} : \delta\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}}{\varepsilon_{eq}^{2e}}\right) - \frac{1}{2\mu}\tilde{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathbf{Tr}}$$

$$\Leftrightarrow \mathbf{G^1} + \delta\mathbf{G^1} = \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} + \delta\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} + \frac{1}{\varepsilon_{eq}^{e}}\left(\Delta p\,\mathbf{M} : \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} + \Delta p\,\mathbf{M} : \delta\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} + \mathbf{M} : \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}\,\delta\Delta p - \Delta p\,\mathbf{M} : \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}\frac{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} : \mathbf{M} : \delta\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}}{\varepsilon_{eq}^{2e}}\right) - \frac{1}{2\mu}\tilde{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathbf{Tr}}$$

$$\Leftrightarrow \delta\mathbf{G^1} = \delta\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} + \frac{1}{\varepsilon_{eq}^{e}}\left(\Delta p\,\mathbf{M} : \delta\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} + \mathbf{M} : \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}\,\delta\Delta p - \Delta p\,\mathbf{M} : \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}\frac{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} : \mathbf{M} : \delta\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}}{\varepsilon_{eq}^{2e}}\right)$$

$$\Leftrightarrow \delta\mathbf{G^1} = \left(\mathbf{C} + \frac{\Delta p}{\varepsilon_{eq}^{e}}\mathbf{M} - \frac{\Delta p}{\varepsilon_{eq}^{3e}}(\mathbf{M} : \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}) \otimes (\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} : \mathbf{M})\right) : \delta\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}} + \frac{1}{\varepsilon_{eq}^{e}}\mathbf{M} : \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}\,\delta\Delta p$$

d'où sous forme indicielle :

$$\frac{\partial G_{ij}^{1}}{\partial \tilde{\varepsilon}_{kl}^{e}} = C_{ijkl} + \frac{\Delta p}{\varepsilon_{eq}^{e}} M_{ijkl} - \frac{\Delta p}{\varepsilon_{eq}^{3e}} M_{ijpq}\,\tilde{\varepsilon}_{pq}^{e}\,\tilde{\varepsilon}_{rs}^{e} M_{rskl} \;;\; \frac{\partial G_{ij}^{1}}{\partial \Delta p} = \frac{1}{\varepsilon_{eq}^{e}} M_{ijkl}\,\tilde{\varepsilon}_{kl}^{e}$$

avec $C_{ijkl} = \frac{1}{2}\left(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{jk}\delta_{il}\right)$

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

- **Linéarisation de l'équation A1-2 :**

$$G^2+\delta G^2=\sqrt{\left(\widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}+\delta\widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}\right):\mathbf{M}:\left(\widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}+\delta\widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}\right)}-\sum_{i=1}^{3}\gamma_i\left(p^-+\Delta p+\delta\Delta p\right)^{m_i}(\Delta p+\delta\Delta p)^{1/n_i}$$

$$\Leftrightarrow G^2+\delta G^2=\sqrt{\widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}:\mathbf{M}:\widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}+2\widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}:\mathbf{M}:\delta\widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}}-\sum_{i=1}^{3}\gamma_i\left(p^-+\Delta p\right)^{m_i}\left(1+\frac{\delta\Delta p}{p^-+\Delta p}\right)^{m_i}\Delta p^{1/n_i}\left(1+\frac{\delta\Delta p}{\Delta p}\right)^{1/n_i}$$

$$\Leftrightarrow G^2+\delta G^2\cong\sqrt{\widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}:\mathbf{M}:\widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}\left(1+\frac{2\widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}:\mathbf{M}:\delta\widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}}{\widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}:\mathbf{M}:\widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}}\right)}-\sum_{i=1}^{3}\gamma_i\left(p^-+\Delta p\right)^{m_i}\left(1+\frac{m_i\delta\Delta p}{p^-+\Delta p}\right)\Delta p^{1/n_i}\left(1+\frac{\delta\Delta p}{n_i\Delta p}\right)$$

$$\Leftrightarrow G^2+\delta G^2\cong\varepsilon_{eq}^{e}\left(1+\frac{\widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}:\mathbf{M}:\delta\widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}}{\varepsilon_{eq}^{2e}}\right)-\sum_{i=1}^{3}\gamma_i\left(p^-+\Delta p\right)^{m_i}\Delta p^{1/n_i}\left(1+\frac{\delta\Delta p}{n_i\Delta p}+\frac{m_i\delta\Delta p}{p^-+\Delta p}\right)$$

$$\Leftrightarrow \delta G^2\cong\frac{\widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}:\mathbf{M}:\delta\widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathbf{e}}}{\varepsilon_{eq}^{e}}-\sum_{i=1}^{3}\gamma_i\left(p^-+\Delta p\right)^{m_i}\Delta p^{1/n_i}\left(\frac{1}{n_i\Delta p}+\frac{m_i}{p^-+\Delta p}\right)\delta\Delta p$$

d'où

$$\frac{\partial G^2}{\partial\widetilde{\varepsilon}_{kl}^{e}}=\frac{\widetilde{\varepsilon}_{ij}^{e}M_{ijkl}}{\varepsilon_{eq}^{e}}\ ;\quad\frac{\partial G^2}{\partial\Delta p}=-\sum_{i=1}^{3}\gamma_i\left(p^-+\Delta p\right)^{m_i}\Delta p^{1/n_i}\left(\frac{1}{n_i\Delta p}+\frac{m_i}{p^-+\Delta p}\right)$$

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