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....4
3 Notations....5
4 Présentation du modèle META_LEMA_ANI....6
4.1 Phases métallurgiques....6
4.2 Équations du modèle....6
5 Intégration du modèle....8
6 Bibliographie....8

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 (décrite dans le document R4.04.04) et pris en compte de l'anisotropie de la phase. 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 coordonnées cartésiennes, soit dans le repère cylindrique associé au tube $(1=e_r, 2=e_\theta, 3=z)$. Ceci est dû 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 plusieurs tubes doivent être modélisés ou bien si l'axe du tube ne correspond pas à celui du repère global, il est à ce jour nécessaire d'utiliser un script capitalisé dans le cas test hsnv134b pour prendre en compte cette différence.

2.3 Utilisation

Dans l'opérateur STAT_NON_LINE, on accède à ce modèle mécanique en utilisant le mot clé RELATION = 'META_LEMA_ANI' dans le mot-clef facteur COMPORTEMENT.
Les données matériaux relatives au modèle META_LEMA_ANI sont renseignées dans l'opérateur DEFI_MATERIAU en utilisant les mots clés facteur 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 :

$V1 \rightarrow VN$: les composantes du tenseur symétrique des déformations élastiques (N vaut 6 en 3D et 4 en 2D)
$VN+1$: déformation visqueuse cumulée p
$VN+2$: proportion de phase bêta Z_β

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

$VN+3$: déformation thermique ε^{th}
$VN+4$: contrainte équivalente de Hill A_{eq}
$VN+5,+6,+7$: contraintes visqueuses σ_{v1} , σ_{v2} et σ_{v3} , respectivement des phases α pure, $\alpha\beta$ et β
$VN+8$: indicateur de changement de phase (0 ou 1)
$VN+9$: instant auquel la température vaut TDEQ (initialisé à 0 en début de calcul)
$VN+10$: instant auquel la température vaut TFEQ (initialisé à 0 en début de calcul)

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 : $\mathbf{A}:\mathbf{B} = \sum_{i,j} A_{ij}B_{ij} = \mathrm{Tr}(\mathbf{A}\mathbf{B}^{\mathrm{T}})$
$\otimes$	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 :

$$\Delta Q = Q - Q^- \quad (1)$$

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

4 Présentation du modèle META_LEMA_ANI

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.

4.1 Phases métallurgiques

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 $0 \leq Z_\alpha \leq 0{,}01$ alors la phase 3 est la phase β
- Si $0{,}01 \leq Z_\alpha \leq 0{,}1$ alors la phase 3 est la phase β et la phase 2 est la phase mixte $\alpha\beta$ (loi linéaire des mélanges)
- Si $0{,}1 \leq Z_\alpha \leq 0{,}9$ alors la phase 2 est la phase mixte $\alpha\beta$
- Si $0{,}9 \leq Z_\alpha \leq 0{,}99$ alors la phase 1 est la phase α et la phase 2 est la phase mixte $\alpha\beta$ (loi linéaire des mélanges)
- Si $0{,}99 \leq Z_\alpha \leq 1{,}00$ alors la phase 1 est la phase α

4.2 Équations du modèle

On réalise la partition des déformations en des parties élastique $\boldsymbol{\varepsilon}^e$, thermique ε^{th} et visqueuse $\boldsymbol{\varepsilon}^v$:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^e + \varepsilon^{th}\boldsymbol{Id} + \boldsymbol{\varepsilon}^v \text{ avec } \varepsilon^{th} = \alpha\left(T - T_{ref}\right) \quad (2)$$

Pour la relation contrainte – déformation : on sépare la partie déviatorique de la partie sphérique :

$$\boldsymbol{\sigma} = \widetilde{\boldsymbol{\sigma}} + \frac{1}{3}\sigma_{pp}\boldsymbol{Id} \text{ Avec } \sigma_{pp} = 3K\left(\varepsilon_{pp} - 3\varepsilon^{th}\right) \quad (3)$$

Et on a :

$$\widetilde{\boldsymbol{\sigma}} = 2\mu\left(\widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}} - \boldsymbol{\varepsilon}^v\right) \quad (4)$$

Avec la loi d'écoulement de la déformation visqueuse telle que :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^v = \dot{p}\frac{\boldsymbol{M}:\boldsymbol{\sigma}}{\sigma_{eq}} \quad (5)$$

avec la contrainte équivalente au sens de Hill définie par :

$$\sigma_{eq} = \sqrt{\boldsymbol{\sigma}:\boldsymbol{M}:\boldsymbol{\sigma}} \quad (6)$$

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

$$\boldsymbol{M}_{\left(\boldsymbol{e}_r,\boldsymbol{e}_\theta,\boldsymbol{e}_z\right)} = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} & M_{13} & 0 & 0 & 0 \\ M_{12} & M_{22} & M_{23} & 0 & 0 & 0 \\ M_{13} & M_{23} & M_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & M_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & M_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & M_{66} \end{bmatrix} \text{ avec } \begin{cases} M_{11}+M_{12}+M_{13}+0 \\ M_{12}+M_{22}+M_{23}+0 \\ M_{13}+M_{23}+M_{33}+0 \end{cases} \quad (7)$$

Avec :

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

$$\begin{cases} M_{11}+M_{12}+M_{13}+0 \\ M_{12}+M_{22}+M_{23}+0 \\ M_{13}+M_{23}+M_{33}+0 \end{cases} \text{ et donc } \begin{cases} M_{12}=\frac{1}{2}\left(-M_{11}-M_{22}+M_{33}\right) \\ M_{13}=\frac{1}{2}\left(-M_{11}+M_{22}-M_{33}\right) \\ M_{23}=\frac{1}{2}\left(M_{11}-M\,22-M_{33}\right) \end{cases} \quad (8)$$

Dans le cas isotrope, on a :

$$\begin{aligned} M_{11}&=M_{22}=M_{33}=1 \\ M_{12}&=M_{13}=M_{23}=-\frac{1}{2} \\ M_{44}&=M_{55}=M_{66}=\frac{3}{4} \end{aligned} \quad (9)$$

Les termes de cette matrices dépendent de la répartition en phase, avec :

$$\boldsymbol{M}=\begin{cases} \boldsymbol{M}^3 \text{ si } 0\leq Z_\alpha \leq 0{,}01 \\ \boldsymbol{M}^2=Z_\alpha \boldsymbol{M}^1+\left(1-Z_\alpha\right)\boldsymbol{M}^3 \text{ si } 0{,}01\leq Z_\alpha \leq 0{,}99 \\ \boldsymbol{M}^1 \text{ si } 0{,}99\leq Z_\alpha \leq 1 \end{cases} \quad (10)$$

La vitesse de déformation équivalente est donnée par :

$$\dot{p}=\left(\frac{\sigma_{eq}}{a p^m}\right)^n e^{-Q/T} \quad (11)$$

Ou de manière équivalente :

$$\sigma_{eq}=a\left(e^{Q/T}\right)^{1/n} p^m \dot{p}^{1/n}=\sigma_v \quad (12)$$

On applique la loi des mélanges sur la contrainte visqueuse σ_v :

$$\sigma_{eq}=\sigma_v=\sum_{i=1}^{3} f_i\left(Z_\alpha\right)\sigma_{v,i} \text{ avec } \sigma_{v,i}=a\left(e^{Q_i/T}\right)^{1/n_i} p^{m_i} \dot{p}^{1/n_i} \quad (13)$$

Avec :

$$\begin{aligned} f_1&=\begin{cases} 0 \text{ si } 0\leq Z_\alpha \leq 0{,}9 \\ \frac{Z_\alpha-0{,}9}{0{,}09} \text{ si } 0{,}9\leq Z_\alpha \leq 0{,}99 \\ 1 \text{ si } 0{,}99\leq Z_\alpha \leq 1 \end{cases} \\ f_3&=\begin{cases} 0 \text{ si } 0\leq Z_\alpha \leq 0{,}01 \\ \frac{0{,}1-Z_\alpha}{0{,}09} \text{ si } 0{,}01\leq Z_\alpha \leq 0{,}1 \\ 1 \text{ si } 0{,}1\leq Z_\alpha \leq 1 \end{cases} \\ f_2&=\begin{cases} 0 \text{ si } 0\leq Z_\alpha \leq 0{,}01 \\ 1-\frac{0{,}1-Z_\alpha}{0{,}09} \text{ si } 0{,}01\leq Z_\alpha \leq 0{,}1 \\ 1 \text{ si } 0{,}1\leq Z_\alpha \leq 0{,}9 \\ 1-\frac{Z_\alpha-0{,}9}{0{,}09} \text{ si } 0{,}9\leq Z_\alpha \leq 0{,}99 \\ 0 \text{ si } 0{,}99\leq Z_\alpha \leq 1 \end{cases} \end{aligned} \quad (14)$$

où $\left(a_i, Q_i, n_i, m_i\right)$ 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

L'intégration du modèle est assurée par le générateur de code MFront.

6 Bibliographie

1) Helfer T, Castelier E, « Le générateur de code mfront : presentation générale et application aux propriétés matériau et aux modèles »

En ligne : http://tfel.sourceforge.net/documents/mfront/mfront.pdf

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