Modèles de comportement métallurgique du zircaloy

Résumé :

Ce document présente les modèles de comportement métallurgique décrivant les transformations structurales, au chauffage et au refroidissement, que subit le zircaloy (gaine de crayon de combustible) entre environ $700\,°C$ et $1000\,°C$.

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

Table des matières

1Introduction....3
2Présentation du modèle....4
2.1Proportion à l'équilibre....4
2.2Équation d'évolution au chauffage....4
2.3Équation d'évolution au refroidissement....4
2.4Conditions d'utilisation du modèle métallurgique pour des transitoires quelconques de température....5
2.4.1Quelques règles....5
2.4.2Algorithme....5
3Formulation numérique....7
3.1Détermination du sens de l'évolution....7
3.2Intégration des équations....7
3.2.1Modèle pour META_LEMA_ANI....7
3.3Modèles pour les autres cas....7
4Modèle ZIRC dans Code_Aster....9
4.1Variables internes....9
4.2Utilisation du modèle....9
5Bibliographie....10

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

1 Introduction

Les gaines de combustibles des réacteurs nucléaires à eau pressurisée sont constituées d'alliage de zirconium. Ces alliages subissent des transformations métallurgiques entre $700\,°C$ et $1000\,°C$, où ils passent d'une phase de structure hexagonale compacte à une phase de structure cubique. Dans certains cas d'analyse tels les scénarios d'accident de cœur par perte de réfrigérant primaire (APRP), la gaine atteint des températures de l'ordre $1000\,°C$ et subit alors des transformations métallurgiques. Pour analyser le comportement mécanique de la gaine dans ces situations, il est nécessaire de prendre en compte l'influence de la métallurgie sur la mécanique (modification des caractéristiques mécaniques).
Le présent document concerne la modélisation des transformations structurales du Zircaloy au chauffage et au refroidissement et ce, à une échelle qui, tout en restant "raisonnable" pour le métallurgiste, soit facilement utilisable par le mécanicien.

Les calculs de métallurgie dans *code_aster* se font soit lors de l'intégration de la loi de comportement mécanique, soit avec l'opérateur dédié CALC_META, en « post-traitement » d'un calcul d'évolution thermique. Dans ce second cas ; le choix du modèle se fait avec le mot-clé RELATION = 'ZIRC' sous COMPORTEMENT. Ce type de modélisation est réalisable au sein du *Code_Aster* pour l'ensemble des éléments (PLAN, AXIS, 3D) du PHENOMENE "THERMIQUE". Pour la définition du comportement métallurgique du Zircaloy le renseignement du mot clé facteur META_ZIRC sous la commande DEFI_MATERIAU [U4.43.01] est nécessaire. Enfin, la définition de l'état métallurgique initial est réalisable à l'aide de la commande CREA_CHAMP, sous le mot clé facteur ETAT_INIT de l'opérateur CALC_META.

Les modèles implantés dans *Code_Aster* pour modéliser les transformations métallurgiques du Zircaloy sont des modèles développés par le CEA. Ces modèles ont été identifiés sur la base d'essais de dilatométrie et de calorimétrie pour les alliages de gaines (standard et nouveaux).

Pour le comportement mécanique avec effet des transformations structurales, on a le choix entre plusieurs modèles :

- soit les mêmes relations de comportement mécanique développées initialement pour l'acier de cuve 16MND5. Il s'agit de toutes les relations déclarées dans l'opérateur STAT_NON_LINE sous le mot clé COMPORTEMENT du type META_XX_XX. Ces sont des modèles élastoplastique ou élastoviscoplastique, écrouissage isotrope (linéaire ou non linéaire) ou cinématique, prise en compte ou non des phénomènes de plasticité de transformation et de restauration d'écrouissage d'origine métallurgique (cf. R4.04.02 et R4.04.03).
- soit la loi spécifique au Zircaloy. Il s'agit d'un modèle élastovisqueux sans seuil et anisotrope (matrice de Hill). Le mot clé sous COMPORTEMENT est META_LEMA_ANI (cf. R4.04.05) dans ce cas, la phase métallurgique est une variable interne de la loi de comportement et est déterminée lors de l'intégration de celle-ci.

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

2 Présentation du modèle

2.1 Proportion à l'équilibre

Le Zircaloy a une structure hexagonale compacte appelée phase α, stable jusqu'à des températures de l'ordre de $700\,°C$. Au delà d'environ $700\,°C$ s'amorce une transformation allotropique vers une phase cubique β, et qui est complète aux environs de $975\,°C$.

La proportion de la phase Z_β^{eq} à l'équilibre est donnée par l'équation, de type Johnson-Mehl-Avrami, suivante :

$$\begin{cases} Z_\beta^{eq}=0 & \text{pour} \quad T\leq T_d^{eq} \\ Z_\beta^{eq}=1-\exp\left(-\left(K\left(T-T_d^{eq}\right)\right)^n\right) & \text{pour} \quad T_d^{eq}\leq T\leq T_f^{eq} \\ Z_\beta^{eq}=1 & \text{pour} \quad T>T_f^{eq} \end{cases} \tag{1}$$

où T_d^{eq} est la température de début de transformation $\alpha\Leftrightarrow\beta$ à l'équilibre, T_f^{eq} la température de fin de transformation à l'équilibre, T la température et K et n deux paramètres matériaux.

De manière équivalente, en inversant l'équation 1, on obtient la température équivalente T^{eq} en fonction de la proportion Z_β de phase β :

$$\begin{cases} T^{eq}=T_d^{eq}+\dfrac{1}{K}\left(\log\left(\dfrac{1}{1-Z_\beta}\right)\right)^{1/n} & \text{pour } 0\leq Z_\beta\leq 0{,}99 \\ T^{eq}=T_f^{eq} & \text{pour } 0{,}99\leq Z_\beta\leq 1 \end{cases} \tag{2}$$

La température de fin de transformation à l'équilibre T_f^{eq} est choisie telle que correspondant à une proportion $0{,}99$ de phase β transformée, soit :

$$T_f^{eq}=T_d^{eq}+\frac{1}{K}\left(\log\left(\frac{1}{1-0{,}99}\right)\right)^{1/n} \tag{3}$$

2.2 Équation d'évolution au chauffage

La transformation au chauffage est la transformation $\alpha\Rightarrow\beta$.

La température de début de transformation de phases au chauffage T_c dépend de la vitesse de température au chauffage et est donnée par l'équation :

$$T_c=T_c^1\left(V_{ch}\right)^{T_c^2} \tag{4}$$

Avec V_{ch} la vitesse de chauffage en $°C/s$ et $T_c\geq T_d^{eq}$.

Le modèle d'évolution de la phase β au chauffage est donné par l'équation différentielle (modèle de Holt) suivante :

$$\frac{dZ_\beta}{dt}=A_c\exp\left(-\frac{E}{RT}\right)\left|T-T^{eq}\left(Z_\beta\right)\right|^M \tag{5}$$

$T^{eq}\left(Z_\beta\right)$ est la température d'équilibre correspondant à la proportion instantanée Z_β de phase β et donnée par l'équation 2. T_c^1, T_c^2, A_c, $\dfrac{E}{R}$ et M sont des paramètres matériaux.

2.3 Équation d'évolution au refroidissement

La transformation au refroidissement est la transformation $\beta\Rightarrow\alpha$.

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

La température de début de transformation de phases au refroidissement T_r dépend de la vitesse de température au refroidissement et est donnée par l'équation :

$$T_r = T_r^1 + T_r^2 \ln(V_{ref}) \quad (6)$$

Avec V_{ref} la vitesse de refroidissement en $°C/s$ et $T_r \leq T_f^{eq}$.
Le modèle d'évolution de la phase β au refroidissement est donné par l'équation différentielle suivante :

$$\frac{dZ_\beta}{dt} = -|T - T^{eq}| \exp\left(A_r + B_r |T - T^{eq}|\right) Z_\beta (1 - Z_\beta) \text{ pour } T_d^{eq} \leq T \leq T_f^{eq} \quad (7)$$

T_r^1 , T_r^2 , A_r et B_r sont des paramètres matériaux.

2.4 Conditions d'utilisation du modèle métallurgique pour des transitoires quelconques de température

2.4.1 Quelques règles

- Lors des calculs, si la proportion de phase β est supérieure stricte à $0{,}99$, on arrondit à un. Pour une vitesse au chauffage inférieure à $0.1\,°C/s$, on utilise $T_c = T_d^{eq}$.
- Si $0 \leq Z_\beta \leq 0{,}99$, on doit appliquer la règle suivante :
  - Si $T > T^{eq} \Leftrightarrow Z_\beta < Z_\beta^{eq}$, on applique le modèle au chauffage (même si la vitesse de température est négative)
  - Si $T < T^{eq} \Leftrightarrow Z_\beta > Z_\beta^{eq}$, on applique le modèle au refroidissement (même si la vitesse de température est positive)

2.4.2 Algorithme

On considère un transitoire quelconque de température $T(t)$.

> *Remarque : pour calculer les températures de début de transformation au chauffage T_c et au refroidissement T_r , il est nécessaire de calculer les vitesses de chauffage et de refroidissement, respectivement. Pour les calculer, on utilise la méthode de la sécante glissante (et non la vitesse instantanée) d'où les étapes 1 et 2 ci-dessous.*

> *Remarque : une fois les températures seuil T_c ou T_r dépassées et tant que la transformation n'est pas totale (au chauffage ou au refroidissement), on intègre les équations d'évolution même si la température repasse par le seuil.*

- **Étape 1** : Recherche de l'instant t_d^{eq} (ou t_f^{eq}) correspondant à la température de début T_d^{eq} (ou de fin T_f^{eq} , respectivement) de transformation à l'équilibre.
  - Cas où $Z_\beta = 0$ initialement : recherche de t_d^{eq}
  - Cas où $Z_\beta = 1$ initialement : recherche de t_f^{eq}

- **Étape 2** : Recherche de l'instant t_c (ou t_r) correspondant à la température de début de transformation T_c (ou T_r , respectivement) en utilisant la méthode de la sécante glissante :
  - Cas où $Z_\beta = 0$ initialement : recherche de l'instant où la température $T(t)$ dépasse T_c .
    - Si $T(t) > T_d^{eq}$, on incrémente le temps, on calcule T_c et on teste la condition suivante :

$$(C1) : T(t) > T_c = T_c^1 \left(\frac{T(t) - T_d^{eq}}{t - t_d^{eq}} \right)^{T_c^2} \quad (8)$$

Si la condition $(C1)$ est vraie on passe à l'étape (3).

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

- Si $T(t) \leq T_d^{eq}$ sans que l'on atteint T_c, il faut alors actualiser t_d^{eq} en recommençant l'étape 1 à partir de l'instant courant.

- Cas où $Z_\beta = 1$ initialement : recherche de l'instant où la température $T(t)$ repasse par T_r.
  - Si $T(t) < T_f^{eq}$, on incrémente le temps, on calcule T_r et on teste la condition suivante :

$$(\mathrm{C2}) : T(t) < T_r = T_r^1 + T_r^2 \ln\left(\frac{|T(t) - T_f^{eq}|}{t - t_f^{eq}}\right) \quad (9)$$

    Si la condition $(C2)$ est vraie on passe à l'étape (3).
  - Si $T(t) \geq T_f^{eq}$ sans que l'on atteint T_r, il faut alors actualiser t_f^{eq} en recommençant l'étape 1 à partir de l'instant courant.

- **Étape 3** : Une fois T_c (ou T_r atteint, on calcule pas à pas l'évolution de la fraction de phase β apparaissant à l'aide de l'équation de Holt (au chauffage) ou de l'équation au refroidissement suivant le signe de $(Z - Z_{eq})$ et ceci tant que la fraction de phase β demeure inférieure à $0{,}99$ et supérieure à zéro. et même si l'on passe par un pic de température.
- **Étape 4** : Si au cours de l'étape 3, la fraction de phase β devient égale à 1 (ou 0), on recommence l'étape 1 à partir de l'instant courant.

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

3 Formulation numérique

Connaissant à l'instant précédent la température et la proportion de phase β et à l'instant courant la température, on cherche à déterminer la proportion de phase β à l'instant courant Z_β^t.
A un instant donné, on cherche la solution Z_β^t telle que $G(Z_\beta^t)=0$, équation qui est résolue par une méthode de Newton avec bornes contrôlées :

$$Z_\beta^{i+1}=Z_\beta^i-\frac{G(Z_\beta^i)}{G'(Z_\beta^i)} \tag{10}$$

Le critère d'arrêt est donné par la condition suivante :

$$\text{Si } G(Z_\beta^{i+1})\leq 10^{-6} \text{ alors } Z_\beta^{i+1}=Z_\beta^t \tag{11}$$

3.1 Détermination du sens de l'évolution

Pour savoir quel est le modèle à intégrer à un instant t donné, il suffit de faire les constatations suivantes :

- Si $Z_\beta^{t-1}<Z_\beta^{eq}(T^t)$ et si on intègre le modèle au refroidissement, on aura obligatoirement $Z_\beta^t<Z_\beta^{t-1}<Z_\beta^{eq}(T^t)$. Or, ceci est contraire à la condition d'application du modèle au refroidissement qui suppose que $Z_\beta^t>Z_\beta^{eq}(T^t)$. Il faut donc choisir le modèle au chauffage.
- Si $Z_\beta^{t-1}>Z_\beta^{eq}(T^t)$ et si on intègre le modèle au chauffage, on aura obligatoirement $Z_\beta^t>Z_\beta^{t-1}>Z_\beta^{eq}(T^t)$. Or, ceci est contraire à la condition d'application du modèle au chauffage qui suppose que $Z_\beta^t<Z_\beta^{eq}(T^t)$. Il faut donc choisir le modèle au refroidissement.

3.2 Intégration des équations

3.2.1 Modèle pour META_LEMA_ANI

Dans le cas d'une utilisation de la loi de comportement mécanique `META_LEMA_ANI`, la phase métallurgique est une variable interne de la loi de comportement. Elle est donc déterminée lors de l'intégration de celle-ci. La résolution de ces équations est alors assurée par le générateur de code MFront.

3.3 Modèles pour les autres cas

Dans tout autre cas, l'intégration est réalisée de la manière suivante :

- **Modèle au chauffage** : la solution est telle que $Z_\beta^{t-1}\leq Z_\beta^t<Z_\beta^{eq}(T^t)$. La fonction $G_c(Z_\beta)$ et sa dérivée sont données par :

$$G_c(Z_\beta)=Z_\beta-Z_\beta^{t-1}-\Delta t\, A_c\exp\left(-\frac{E}{RT}\right)|T-T_{eq}|^M \tag{12}$$

$$G'_c(Z_\beta)=1+M\,\Delta t\, A_c\exp\left(-\frac{E}{RT}\right)|T-T_{eq}|^{M-1}T'_{eq} \tag{13}$$

- **Modèle au refroidissement** : la solution est telle que $Z_\beta^{eq}(T^t)<Z_\beta^t\leq Z_\beta^{t-1}$. La fonction $G_r(Z_\beta)$ et sa dérivée sont données par :

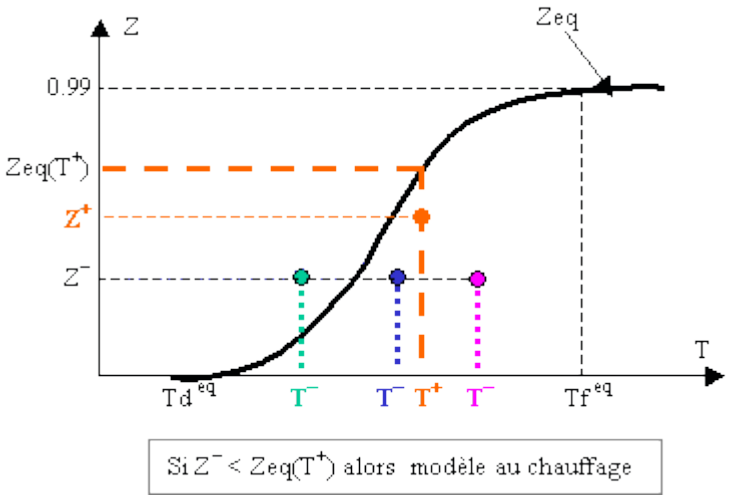
$$G_r(Z_\beta)=Z_\beta-Z_\beta^{t-1}+\Delta t|T-T_{eq}|\exp\left(A_r+B_r|T-T_{eq}|\right)Z_\beta|1-Z_\beta| \tag{14}$$

$$\begin{aligned}G'_c(Z_\beta)&=1+\Delta t|T-T_{eq}|\exp\left(A_r+B_r|T-T_{eq}|\right)(1-2Z_\beta)\\&-\Delta t\,sig(T-T_{eq})T'_{eq}\exp\left(A_r+B_r|T-T_{eq}|\right)Z_\beta(1-Z_\beta)\{1+B_r|T-T_{eq}|\}\end{aligned} \tag{15}$$

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

Avec :

$$\begin{cases} \text{Si } Z_\beta = 0 & \text{pour } T'_{eq} = 1000 \\ \text{Si } 0 < Z_\beta \leq 0.99 & \text{pour } T'_{eq} = \dfrac{1}{K\,n}\left(\log\left(\dfrac{1}{1-Z_\beta}\right)\right)^{\frac{1}{n}-1}\dfrac{1}{1-Z_\beta} \\ \text{Si } 0{,}99 < Z_\beta \leq 1 & \text{pour } T'_{eq} = T'_{eq}(0{,}99) \end{cases} \quad (16)$$



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

4 Modèle ZIRC dans *Code_Aster*

4.1 Variables internes

Les variables internes de la relation de comportement 'ZIRC' sont :

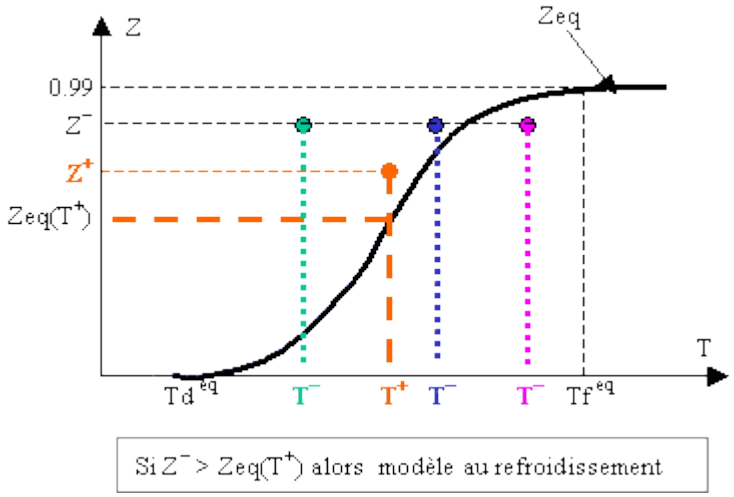
V1 : $Z_{\alpha 1}$ proportion de la phase alpha1,

V2 : $Z_{\alpha 2}$ proportion de la phase alpha2,

V3 : TP, température aux nœuds,

V4 : t_d^{eq} ou t_f^{eq} correspondant à T_d^{eq} ou T_f^{eq}, respectivement.

La proportion des phases α et β est donnée par : $Z_\alpha = Z_{\alpha 1} + Z_{\alpha 2}$ et $Z_\beta = 1 - Z_\alpha$ avec les relations suivantes :



Si $0 \le Z_\alpha \le 0.9$ alors $Z_{\alpha 1} = 0, Z_{\alpha 2} = Z_\alpha$ et $Z_\beta = 1 - Z_\alpha$

- Si $0.9 \le Z_\alpha \le 1$ alors $Z_{\alpha 1} = \frac{Z_\alpha - 0.9}{0.1} 0, Z_{\alpha 2} = Z_\alpha - Z_{\alpha 1}$ et $Z_\beta = 1 - Z_\alpha$

A terme, les variables V1 et V2 disparaîtront pour ne stocker que Z_α dans V1.

Remarque : on considère pour les paramètres matériaux du modèle mécanique, 3 phases différentes : α, αβ et β, c'est pourquoi deux phases V1 et V2 sont stockées. Or les relations ci-dessus ne sont pas adaptées.

Dans le modèle mécanique META_LEMA_ANI, on considère les relations suivantes :

- Si $0 \le Z_\alpha \le 0.01$, on prend les données mécaniques de la phase β
- Si $0.01 \le Z_\alpha \le 0.1$, on prend les données mécaniques de la phase β et αβ
- Si $0.1 \le Z_\alpha \le 0.9$, on prend les données mécaniques de la phase αβ
- Si $0.9 \le Z_\alpha \le 0.99$, on prend les données mécaniques de la phase α et αβ
- Si $0.99 \le Z_\alpha \le 1$, on prend les données mécaniques de la phase α

4.2 Utilisation du modèle

Dans le cas d'une utilisation de la loi de comportement mécanique META_LEMA_ANI, la phase métallurgique est une variable interne de la loi de comportement. Elle est donc déterminée lors de l'intégration de celle-ci.

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

Pour toute autre loi de comportement, les consignes ci-dessous sont à respecter.
Pour activer ce modèle, il suffit de renseigner dans la commande CALC_META, sous le mot clé COMPORTEMENT, la relation 'ZIRC' (COMPORTEMENT=_F(RELATION='ZIRC')).
Les paramètres matériaux sont renseignés sous le mot-clé facteur META_ZIRC de DEFI_MATERIAU.
Enfin, la définition de l'état métallurgique initial est réalisable à l'aide de la commande CREA_CHAMP, sous le mot clé facteur ETAT_INIT de l'opérateur CALC_META. Il est obligatoire de renseigner les variables internes V1, V2 et V4.

Remarque : en principe, l'état initial métallurgique est soit $Z_\alpha = 1$, soit $Z_\alpha = 0$ et la variable V4 n'a pas besoin d'être renseignée initialement. Mais, si pour une raison quelconque, un utilisateur souhaite réaliser le calcul suivant : $Z_\alpha = 1$ initialement pour $T_d^{eq} < T(t) < T_c$ alors l'instant t_d^{eq} sera pris par défaut à zéro si V4 n'était pas renseignée obligatoirement. C'est pourquoi, la variable V4 est obligatoire et correspond au 1er instant du calcul métallurgique (par nécessairement égal à zéro).

5 Bibliographie

1) Forgeron, T., et al., "Experiment and modeling of advanced fuel rod cladding behavior under LOCA conditions: A-B phase transformation kinetics and EDGAR methodology", Zirconium in the Nuclear Industry: Twelth International Symposium, 1998, Toronto, ASTM STP 1354, ASTM

2) 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)