

Manuel de Référence
Fascicule R4.04 : Comportement métallurgique
Document : R4.04.04

Modèles de comportement métallurgique du zircaloy dans le Code_Aster

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 800°C et 1000°C.

Table des matières

| | |
|---|---|
| 1 Introduction | 3 |
| 2 Proportion à l'équilibre. | 4 |
| 3 Equation d'évolution au chauffage | 4 |
| 4 Equation d'évolution au refroidissement..... | 5 |
| 5 Formulation numérique | 5 |
| 5.1 Sens de l'évolution métallurgique | 5 |
| 5.2 Proportion de phase et variables internes | 6 |
| 5.2.1 Les variables internes | 6 |
| 6 Bibliographie | 7 |

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 800°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, changement de volume lors des transformations, plus éventuellement d'autres phénomènes comme la plasticité de transformation.

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 le *Code_Aster* se font avec l'opérateur dédié `CALC_META`, en « post-traitement » d'un calcul d'évolution thermique. Avec le modèle dédié aux transformations austénite-ferritique de l'acier, on dispose aujourd'hui de deux modèles d'évolution métallurgique. Le choix du modèle se fait avec le mot-clé `RELATION` ; 'ZIRC' ou 'ACIER'. 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 présentés (au chauffage et au refroidissement) sont formulés dans le cadre des relations de comportement à variables internes (ou mémoratrices). Lorsque on effectue un enchaînement de calcul thermo-métallo-mécanique du zircaloy, on utilise les mêmes relations de comportement mécanique prenant en compte les effets de la métallurgie, développées pour l'acier : (elasto)viscoplastique ou elastoplastique, 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.

Les modèles implantés dans le *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) dans le cadre de collaborations EDF-CEA sur le comportement de la gaine en accident par perte de réfrigèrent primaire (programme EDGAR).

2 Proportion à l'équilibre.

Le Zircaloy a une structure hexagonale compacte appelée phase α , stable jusqu'à des températures de l'ordre de 800°C. Au delà d'environ 800°C s'amorce une transformation allotropique vers une phase cubique β , et qui est complète aux environs de 975°C.

Soit T_d^{eq} la température de début de transformation $\alpha \Leftrightarrow \beta$ à l'équilibre et T_f^{eq} la température de fin de transformation. La proportion de la phase Z_β^{eq} à l'équilibre est donné par l'équation, de type Johnson-Mehl-Avrami, suivante :

$$\begin{cases} Z_\beta^{eq} = 0 & \text{pour } T < T_d^{eq} \\ Z_\beta^{eq} = 1 - \exp\left\{-\left[K_C(T - T_d^{eq})\right]^n\right\} & \text{pour } T_d^{eq} < T < T_f^{eq} \\ Z_\beta^{eq} = 1 & \text{pour } T > T_f^{eq} \end{cases} \quad \text{éq 2-1}$$

avec :

T : température

K_C, n : paramètres matériaux.

3 Equation d'évolution au chauffage

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

Le modèle d'évolution de la phase Z_β^{eq} au chauffage est donné par l'équation différentielle (modèle de Holt) suivante :

Pour $T > T_d^{chauff}$:

$$\frac{dZ_\beta}{dt} = A \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) (T - T_{eq}(Z))^m \quad \text{éq 3-1}$$

avec :

$T_{eq}(Z)$: T à l'équilibre correspondant à la proportion Z

$A, \frac{E}{R}, m$: paramètres matériaux

4 Equation d'évolution au refroidissement

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

Le modèle d'évolution de la phase Z_β^{eq} au refroidissement est donné par l'équation différentielle suivante :

pour $T < T_d^{refr}$:

$$\frac{dZ_\beta}{dt} = K_R \cdot Z_\beta \cdot (1 - Z_\beta) \quad \text{éq 4-1}$$

avec

$$K_R = -|T - T_{eq}(Z)| \exp(Ar + Br \cdot |T - T_{eq}(Z)|)$$

NB :

Le modèle comporte des équations donnant les températures de début de transformation de phase en fonction des vitesses de chauffage et de refroidissement qui aujourd'hui ne sont pas opérationnelles.

5 Formulation numérique

L'intégration des équations différentielles se fait avec la méthode explicite de Runge-Kutta.

Remarque :

La discrétisation comporte en plus un découpage automatique du pas de temps lorsque $\Delta T > 5^\circ\text{C}$.

5.1 Sens de l'évolution métallurgique

On adopte le même principe que les modèles dédiés à l'acier. On considère que dans un calcul de structure, certaines zones peuvent subir un échauffement pendant que d'autres se refroidissent. On considère donc qu'il n'y a qu'un seul modèle de transformations métallurgiques pour le Zircaloy qui selon la température considérée et le signe de la vitesse d'évolution thermique est décrit soit par le modèle $\alpha \Rightarrow \beta$, soit par le modèle $\beta \Rightarrow \alpha$.

| $T(t + \Delta t)$ | $< T_d^{eq}$ | $\in [T_d^{eq}, T_f^{eq}]$ | | $> T_f^{eq}$ |
|-------------------|----------------------------|--|---|----------------------------|
| $\dot{T}(t) > 0$ | $\alpha \Rightarrow \beta$ | | | |
| $\dot{T}(t) = 0$ | $\beta \Rightarrow \alpha$ | si $\mathbf{z}_\beta \geq Z_{eq} \rightarrow \beta \Rightarrow \alpha$ | si $\mathbf{z}_\beta < Z_{eq} \rightarrow \alpha \Rightarrow \beta$ | $\alpha \Rightarrow \beta$ |
| $\dot{T}(t) < 0$ | $\beta \Rightarrow \alpha$ | | | $\alpha \Rightarrow \beta$ |

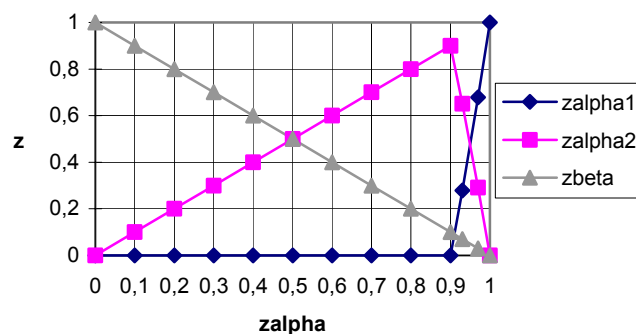
5.2 Proportion de phase et variables internes

Le programme d'étude de la gaine en situation d'APRP (EDGAR) comporte un volet mécanique. Dans le modèle mécanique on considère que le Zircaloy comporte 3 phases distinctes de caractéristiques mécaniques différentes ; α , $\alpha-\beta$, β . La proportion des trois phases « mécaniques » dépend de la proportion initiale α/β donné par les équations [éq 2-1], [éq 3-1] et [éq 4-1]. Les caractéristiques mécaniques d'un point multiphasé s'obtient à l'aide d'une loi des mélanges sur les caractéristiques des (pseudo)phases présentes. Ceci nécessite au point de vue métallurgique d'effectuer un complément de développement permettant à l'issue du calcul métallurgique de pouvoir récupérer 3 phases : une phase β et une phase α qui se met soit sous la forme α_1 (α_1 : est la phase alpha pure ayant la caractéristique de α) soit sous la forme α_2 . (α_2 : alpha dans mélange et qui aura les caractéristiques mécaniques de la phase $\alpha-\beta$).

Les modèles présentés précédemment donne la proportion de la phase α et β telle que $z\alpha=1-z\beta$. La phase à froid α est ensuite réparti sous 2 formes avec les proportions $z\alpha_1$ et $z\alpha_2$ telle que : $z\alpha=z\alpha_1+z\alpha_2$.

| | |
|---|-----------------------|
| $1 > z\alpha > 0.9$ | $0.9 > z\alpha > 0$ |
| $z\alpha_1 = \frac{(z\alpha - 0.9)}{0.1} \cdot z\alpha$ | $z\alpha_1 = 0$ |
| $z\alpha_2 = z\alpha - z\alpha_1$ | $z\alpha_2 = z\alpha$ |

*répartition de la proportion de phase
en fonction de la proportion alpha*



5.2.1 Les 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 : TPG, température aux points de Gauss

L'utilisation du modèle de métallurgie dédié au Zircaloy nécessite de renseigner les paramètres du modèle sous le mot-clé facteur META_ZIRC de DEFI_MATERIAU.

6 Bibliographie

- [1] RAZAKANAIVO A., DONORE A-M, WAECKEL F. : Modélisation elasto-viscoplastique prenant en compte des transformations métallurgiques. Doc. de Référence *Code_Aster* [R4.04.02].
- [2] WAECKEL F, RAZAKANAIVO A : Modèles de comportement métallurgiques des aciers dans le *Code_Aster*. Doc. de Référence *Code_Aster* [R4.04.01].
- [3] RAZAKANAIVO A. : Introduction d'un modèle de transformation métallurgique pour le Zircaloy Compte rendu MMN, 97/005, Janvier 1997.

Page laissée intentionnellement blanche.