



**HAL**  
open science

## Génération de microstructures de combustible nucléaire hétérogène et homogénéisation mécanique

Akram El Abdi, Étienne Castelier, Antoine Bouloré, Jean-Claude Michel, Christian Lantuéjoul, Rodrigue Largenton, Pierre Mailhé

► **To cite this version:**

Akram El Abdi, Étienne Castelier, Antoine Bouloré, Jean-Claude Michel, Christian Lantuéjoul, et al.. Génération de microstructures de combustible nucléaire hétérogène et homogénéisation mécanique. Colloque national Mécamat "Matériaux Numériques", Jan 2018, Aussois, France. pp.6 Pages, Actes du Colloque Mécamat "Matériaux Numériques". hal-01901247

**HAL Id: hal-01901247**

**<https://hal.science/hal-01901247>**

Submitted on 22 Oct 2018

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

## GÉNÉRATION DE MICROSTRUCTURES DE COMBUSTIBLE NUCLÉAIRE HÉTÉROGÈNE ET HOMOGÉNÉISATION MÉCANIQUE

A. el Abdi #1 <sup>a</sup>, É. Castelier #2 <sup>a</sup>, A. Bouloré #3 <sup>a</sup>, J.-C. Michel #4 <sup>b</sup>, C. Lantuéjoul #5 <sup>c</sup>  
R. Largeton #6 <sup>d</sup>, P. Mailhé #7 <sup>e</sup>

<sup>a</sup> CEA, DEN, DEC, SESC, akram.elabdi@cea.fr #1, etienne.castelier@cea.fr #2 ; Antoine.boulоре@cea.fr #3 ;

<sup>b</sup> CNRS, LMA michel@lma.cnrs-mrs.fr #4, <sup>c</sup> ENSMP CG Christian.Lantuejoul@ensmp.fr #5 ;

<sup>d</sup> EDF R&D rodrigue.largeton@edf.fr #6, <sup>e</sup> AREVA NP pierre.mailhe@areva.com #7

**Mots-clefs :** Microstructures, Ensembles aléatoires, fonctions aléatoires, homogénéisation mécanique, NTFA

### 1 Introduction

Certains combustibles nucléaires sont constitués d'un mélange d' $\text{UO}_2$  et de  $\text{PuO}_2$  ; ils présentent une microstructure hétérogène complexe [1] telle que présentée en figure 1 : la cartographie de la teneur en Pu (plutonium) obtenue par mesure microsonde exhibe des amas respectivement riches et pauvres en Pu, inclus dans une matrice à teneur Pu intermédiaire. Dans les codes combustibles, cette hétérogénéité est traitée en considérant une répartition du Pu en une, deux ou trois phases à teneur homogène. Pour valider cette hypothèse simplificatrice et améliorer la précision des calculs, l'effet d'une distribution hétérogène de teneur est maintenant étudié. Pour cela, il faut pouvoir générer des microstructures 3D, sur lesquelles seront réalisés des calculs thermiques, neutroniques, mécaniques, etc.

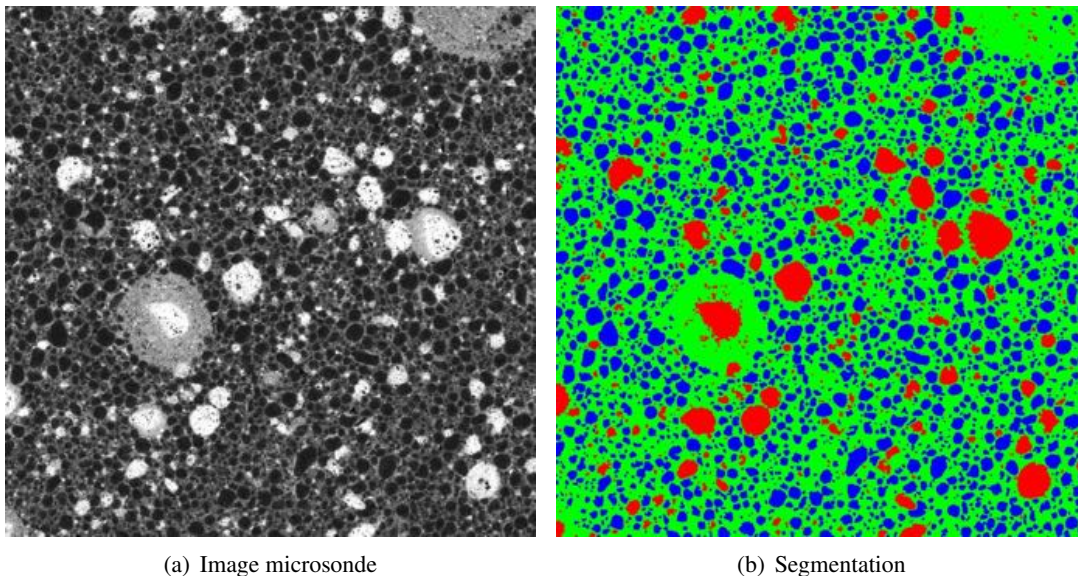


FIGURE 1 – Microstructure réelle (Image microsonde) et simplification par segmentation.

### 2 Génération de microstructures

Plusieurs modèles ont été proposés pour générer ce type de microstructures.

- Une première approche [2] est basée sur les ensembles aléatoires. Une segmentation de l'image (figure 1(b)) permet d'identifier trois phases dans le combustible composite : des inclusions riches et pauvres en Pu dans une matrice à teneur intermédiaire. En assimilant ces inclusions à des sphères ou des ellipsoïdes, il est possible d'obtenir des microstructures comme celle présentée en figure 2(a).
- Une autre technique consiste à assimiler la cartographie de teneur en Pu à la réalisation d'une fonction aléatoire [3]. Il existe des techniques [4] pour générer des microstructures par des fonctions aléatoires

multigaussiennes, qui respectent quelques propriétés statistiques, caractéristiques de la texture : l'histogramme et le variogramme (équivalent de la covariance spatiale). Ces propriétés mesurées sur la cartographie microsonde sont présentées en figure 3. La figure 2(b) montre une microstructure obtenue.

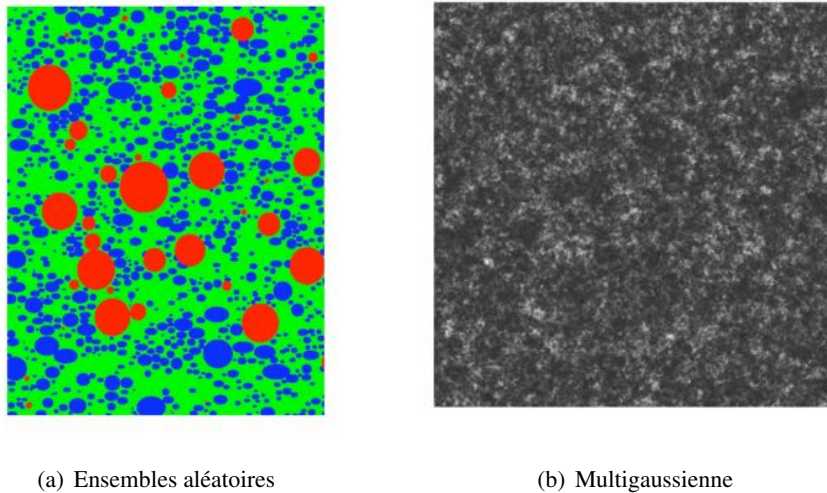


FIGURE 2 – Microstructures générées par des ensembles aléatoires (gauche) et des fonctions aléatoires multigaussiennes (droite).

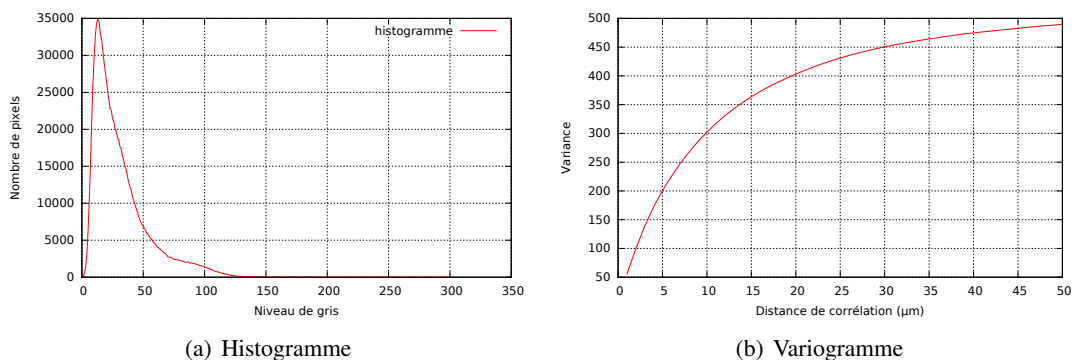


FIGURE 3 – Histogramme et variogramme de la texture du composite, calculés sur l'image microsonde.

Finalement, la comparaison de l'image microsonde de départ (figure 1(a)) avec les microstructures générées (figure 2) montre les potentialités des deux méthodes de génération, par ensembles aléatoires ou fonctions aléatoires, ainsi que leurs limites. Pour améliorer cela, il faudra combiner ces deux techniques : utiliser des ensembles aléatoires pour représenter des objets, tels que les amas qui apparaissent sur les cartographies, mais permettre une variation de la teneur dans ces amas pour respecter l'histogramme.

### 3 Comportement mécanique

Les microstructures générées ci-dessus sont maintenant comparées pour leur comportement mécanique. Leur réponse mécanique est examinée d'un point de vue macroscopique, pour formuler un comportement homogénéisé ; et microscopique, pour étudier la répartition des contraintes dans le matériau. Les calculs mécaniques sont effectués en utilisant des transformées de Fourier rapides (FFT) [5], qui sont efficaces sur des grosses grilles.

**Loi de comportement locale** La loi de comportement mécanique locale est hétérogène. Elle dépend de la teneur en Pu. La déformation locale est la combinaison de plusieurs termes [6] :

$$\underline{\underline{\epsilon}}^{tot} = \underline{\underline{\epsilon}}^{el} + \underline{\underline{\epsilon}}^{vp} + \underline{\underline{\epsilon}}^{gl}, \quad (1a)$$

des déformations élastique  $\underline{\underline{\epsilon}}^{el}$  et visqueuse  $\underline{\underline{\epsilon}}^{vp}$ , et d'un gonflement  $\underline{\underline{\epsilon}}^{gl}$ .

- La contrainte et la déformation locales sont liées par le tenseur de rigidité  $\underline{\underline{C}}$ , ce tenseur est isotrope et ne dépend pas de la teneur en Pu, donc il est homogène dans le matériau :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\epsilon}}^{el}. \quad (1b)$$

- La déformation visqueuse, dépend de la température  $T$  et de la densité de fission  $\dot{\Phi}$ , par un coefficient  $A(T, \dot{\Phi})$  :

$$\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp} = A(T, \dot{\Phi}) \underline{\underline{s}}, \quad (1c)$$

où les déviateurs des déformations et contraintes sont définies par :

$$\underline{\underline{e}} = \underline{\underline{\epsilon}} - \frac{1}{3} \text{tr}(\underline{\underline{\epsilon}}) \underline{\underline{I}}, \quad \underline{\underline{s}} = \underline{\underline{\sigma}} - \frac{1}{3} \text{tr}(\underline{\underline{\sigma}}) \underline{\underline{I}}. \quad (1d)$$

Ce terme, qui dépend de la teneur en Pu à travers la densité de fission  $\dot{\Phi}$ , est source d'hétérogénéité pendant l'irradiation. Il est presque multiplié par 10 entre les régions pauvre et riche en Pu (voir tableau 1).

- Le gonflement  $\underline{\underline{\epsilon}}^{gl}$  est induit par irradiation, et dépend de la teneur en Pu. Il est calculé à l'extérieur de la loi de comportement mécanique en tenant de lois physico-chimiques d'un matériau évoluant sous irradiation.

Finalement, le comportement local dépend de la teneur en plutonium pour deux raisons : le fluage d'irradiation et le gonflement d'irradiation.

Paramètre	Nom	Valeur	Unité
$E$	Module de Young	200	GPa
$\nu$	Coefficient de poisson	0.3	-
$A(T, \dot{\Phi})$	Coefficient de fluage (région pauvre en Pu)	4.9e-19	$s^{-1} \cdot Pa^{-1}$
	(région riche en Pu)	4.0e-18	

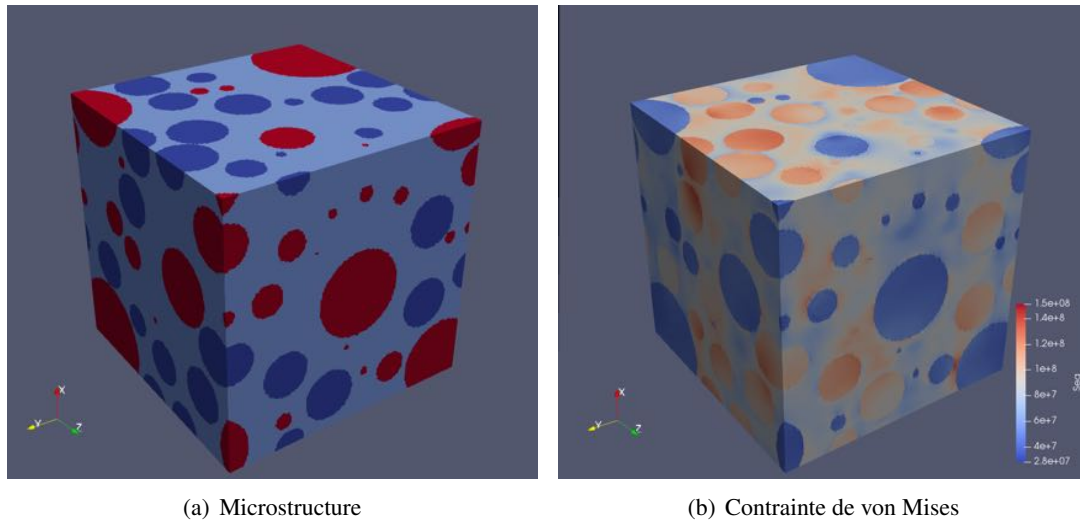
TABLE 1 – Paramètres de la loi de comportement.

**Homogénéisation** Ces combustibles hétérogènes ont déjà fait l'objet de travaux d'homogénéisation, tous s'appuyant sur une répartition du plutonium en trois phases homogènes : soit en utilisant un schéma d'homogénéisation de type Mori-Tanaka incrémental [7] ; soit en utilisant l'approche NTFA (Non uniform Transformation Field Analysis) [6] avec des calculs sur des microstructures telles que celle de la figure 2(a). Notre objectif est de poursuivre les travaux d'homogénéisation par l'approche NTFA [8] [9], en tenant compte d'une répartition du plutonium décrit par une variation continue de teneur. Cette méthode nécessite de réaliser des essais numériques par calcul mécanique sur microstructures, d'identifier des modes de déformation, pour finalement construire un modèle homogénéisé.

Pour l'instant, nous présentons des essais mécaniques sur les deux microstructures générées ci-dessus (ensembles aléatoires et fonctions aléatoires de la figure 2, avec deux types de chargement

**Traction uniaxiale** Le premier essai mécanique est une traction uniaxiale selon l'axe  $x$ , pilotée par une déformation macroscopique de vitesse constante  $10^{-10} s^{-1}$  pendant une durée de  $10^7$  s. Le gonflement n'est pas pris en compte dans ce calcul. Les champs de contraintes en fin de calcul pour les deux microstructures sont représentés sur les figures 4 et 5.

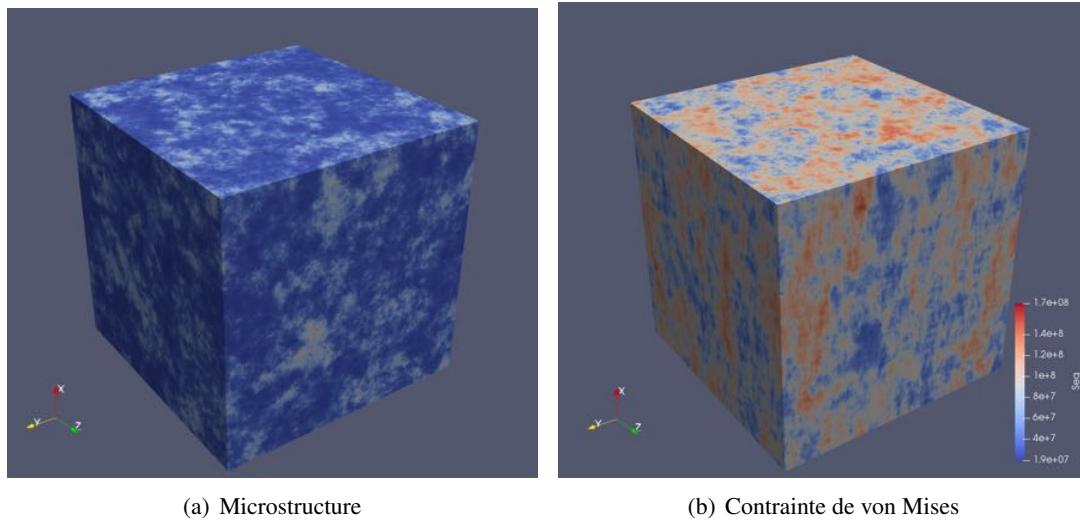
L'évolution des contraintes macroscopiques  $\Sigma_{xx}$  dans la direction de traction pour les deux microstructures sont ensuite comparées à la réponse d'un matériau homogène de même teneur moyenne en Pu. Les évolutions sur les microstructures, présentées en figure 6, sont parfaitement confondues. Elles diffèrent légèrement de l'évolution du milieu homogène. Les histogrammes des contraintes de von Mises pour les deux microstructures sont comparés en figure 8(a) : les valeurs sont plus étalées pour les fonctions aléatoires.



(a) Microstructure

(b) Contrainte de von Mises

FIGURE 4 – Champ des contraintes de von Mises  $\sigma_{eq}$  en fin de traction uniaxiale sur une microstructure générée par ensembles aléatoires (trois phases).



(a) Microstructure

(b) Contrainte de von Mises

FIGURE 5 – Champ des contraintes de von Mises  $\sigma_{eq}$  en fin de traction uniaxiale sur une microstructure générée par fonctions aléatoires.

**Gonflement bloqué** Le second test mécanique consiste à imposer des gonflements dépendant de la teneur en Pu, tout en imposant une déformation macroscopique nulle sur la microstructure. Le gonflement augmente linéairement sur une durée de  $10^7$  s jusqu'à une valeur de  $1.2e-3$  et  $6.4e-3$ , pour les régions respectivement pauvres et riches en Pu. Les champs de contrainte en fin d'essai pour les deux microstructures sont représentés en figure 7, et leur histogramme en figure 8(b).

Pour ces calculs, la contrainte hydrostatique macroscopique obtenue peut se calculer simplement par la formule analytique suivante, dépendant du module de compressibilité  $K$  du matériau :

$$\Sigma_m = K \operatorname{tr}(\underline{\underline{E}}^{el}) = -K \operatorname{tr}(\underline{\underline{E}}^{gl}), \quad (2a)$$

car la déformation macroscopique est nulle, et d'après le modèle (1c) la déformation visqueuse, purement déviatorique, est de trace nulle :

$$0 = \operatorname{tr}(\underline{\underline{E}}^{tot}) = \operatorname{tr}(\underline{\underline{E}}^{el}) + \operatorname{tr}(\underline{\underline{E}}^{gl}). \quad (2b)$$

Pour les calculs, le gonflement utilisé dépend de manière affine de la teneur en plutonium. Ainsi le gonflement macroscopique  $\underline{\underline{E}}^{gl}$  ne dépend que de la teneur moyenne. Les calculs donnent donc un tenseur des contraintes macroscopique égal pour les deux microstructures considérées.

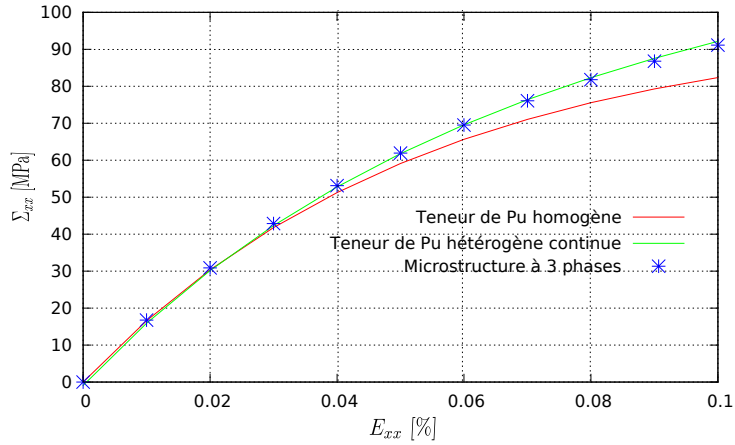
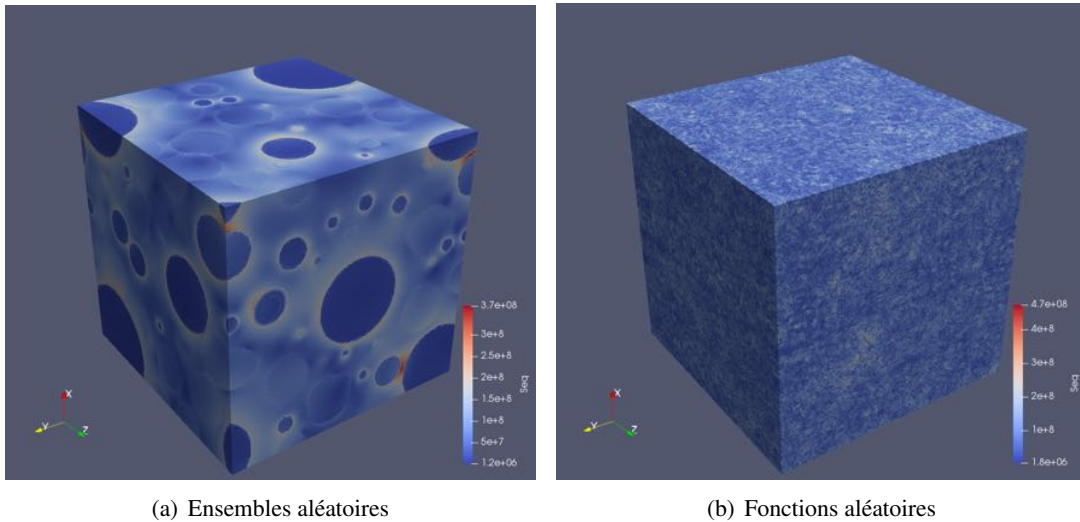


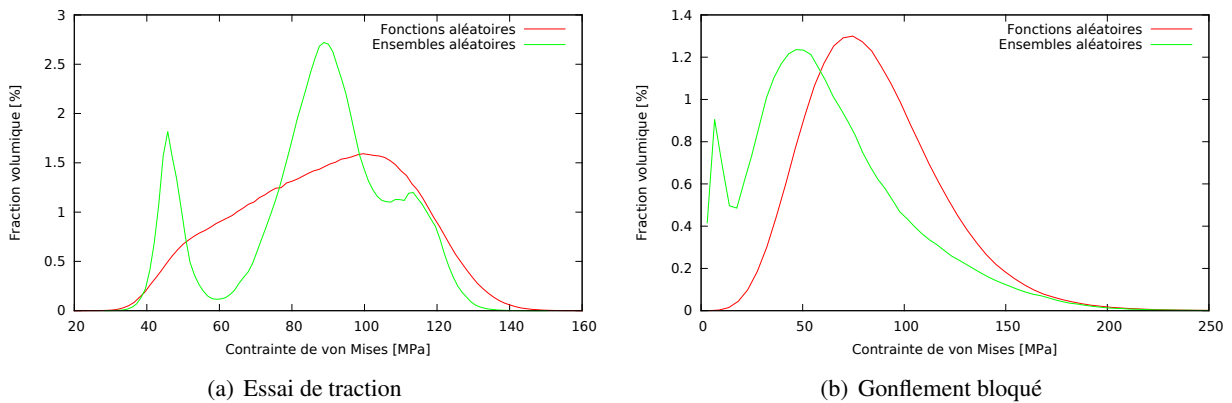
FIGURE 6 – Évolution de la contrainte macroscopique  $\Sigma_{xx}$  pour les deux microstructures hétérogènes et pour un milieu homogène.



(a) Ensembles aléatoires

(b) Fonctions aléatoires

FIGURE 7 – Champs des contraintes de von Mises  $\sigma_{eq}$  générés par un gonflement hétérogène sur les deux microstructures : ensembles et fonctions aléatoires.



(a) Essai de traction

(b) Gonflement bloqué

FIGURE 8 – histogrammes des contraintes de von Mises pour les deux calculs.

## 4 Conclusion

Pour étudier l'hétérogénéité de combustibles nucléaires mixtes, composés d'uranium et de plutonium, il faut pouvoir générer des microstructures représentatives de la distribution de teneur en plutonium. Les premières microstructures générées s'appuient soit sur des ensembles aléatoires, soit sur des fonctions aléatoires. Pour améliorer leur représentativité, il faudra combiner ces deux techniques.

Les premiers calculs mécaniques sur ces microstructures ont été réalisés par FFT pour optimiser le temps de calcul. Ils mettent en évidence une hétérogénéité locale des champs de contraintes et déformations. Cette information sera utilisée pour construire un modèle homogénéisé à base de NTFA.

## Références

- [1] A. Bouloré, C. Struzik, R. Masson, P. Mailhé, and R. Largeton. Approach to better assess fission gas behaviors, applicable to fuels with complex microstructure. *Water Reactor Fuel Performance Meeting*, 2017.
- [2] G. Oudinet. *Analyse d'images et modélisation 2D/3D de la microstructure du combustible MOX*. PhD thesis, Université de Saint-Étienne, 2003.
- [3] G. Matheron. *Les variables régionalisées et leur estimation*. Masson, Paris, 1965.
- [4] C. Lantuéjoul. *Geostatistical simulation. Models and algorithms*. Springer Verlag, Berlin, 2002.
- [5] H. Moulinec and P. Suquet. A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure. *Computer Methods in applied Mechanics and Engineering*, 157 :69–94, 1998.
- [6] R. Largeton, J.-C. Michel, and P. Suquet. Extension of the Nonuniform Transformation Field Analysis to linear viscoelastic composites in the presence of aging and swelling. *Mechanics of Materials*, 73 :73–100, 2014.
- [7] J.-M. Ricaud and R. Masson. Effective properties of linear viscoelastic heterogeneous media : Internal variables formulation and extension to ageing behaviours. *International Journal of Solids and Structures*, 46 :1599–1606, 2009.
- [8] J.-C. Michel and P. Suquet. Nonuniform transformation field analysis. *International Journal of Solids and Structures*, 40 :6937–6955, 2003.
- [9] J.-C. Michel and P. Suquet. A model-reduction approach in micromechanics of materials preserving the variational structure of the constitutive relations. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 90 :254–285, 2016.