

DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE



Un schéma de calcul multi-échelles de type Éléments Finis au carré pour la simulation de combustibles nucléaires hétérogènes.

CSMA2017 | [I. RAMIÈRE](#), R. MASSON, B. MICHEL, S. BERNAUD

DEN, DEC, SESC

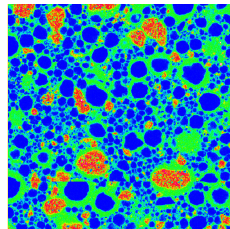
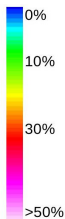
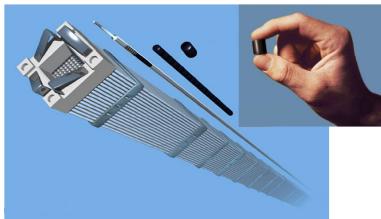
18 MAI 2017

Approches multi-échelles et homogénéisation

- **Contexte et objectifs industriels**
- **Calcul mécanique hybride à deux échelles**
- **Vérification du modèle proposé**
- **Résultats industriels**
- **Conclusions et perspectives**

Contexte et objectifs

- Simulation du comportement du combustible des réacteurs à eau sous pression (parc électronucléaire français)
- Un problème multi-échelles
- Une microstructure hétérogène (MOX MIMAS)



- Simulation du comportement mécanique multi-échelles du combustible hétérogène :

- Simulation du comportement mécanique multi-échelles du combustible hétérogène :

A l'échelle macroscopique

- Lois empiriques
- Lois déduites par homogénéisation (depuis 2010)

A l'échelle microscopique

- Calculs sur des Volumes Élémentaires Représentatifs (VER)
 - ↔ répartition locale des variables mécaniques (contraintes, déformations,...)
 - pour vérifier les lois homogénéisées
 - en post-traitement (relocalisation) d'un calcul macroscopique.

- Simulation du comportement mécanique multi-échelles du combustible hétérogène :

A l'échelle macroscopique

- Lois empiriques
- Lois déduites par homogénéisation (depuis 2010)

A l'échelle microscopique

- Calculs sur des Volumes Élémentaires Représentatifs (VER)
↔ répartition locale des variables mécaniques (contraintes, déformations,...)

- Objectif :

Coupler les 2 échelles dans un même calcul industriel.

Calcul mécanique industriel à deux échelles

■ Résolution du **problème quasi-statique non linéaire** :

$$(\mathcal{P}) \quad \begin{cases} -\operatorname{div} \underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{f}} & \text{dans } \Omega, \\ \underline{\underline{\sigma}} = \mathcal{F}(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{u}})) & \text{dans } \Omega, \\ \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{u}}) = \frac{1}{2} (\operatorname{grad} \underline{\underline{u}} + (\operatorname{grad} \underline{\underline{u}})^T) & \text{dans } \Omega, \\ \underline{\underline{u}} = \underline{\underline{u}}_D & \text{sur } \Gamma_D, \\ \underline{\underline{\sigma}} \underline{\underline{n}} = \underline{\underline{F}}_N & \text{sur } \Gamma_N \end{cases}$$

■ Algorithme de type **prédicteur/correcteur en contraintes** :

- Prédiction linéaire de la contrainte

$$\underline{\underline{\sigma}}^{*k} = \underline{\underline{\sigma}}^{k-1} + \underline{\underline{H}}|_{\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{u}}^{k-1})} : (\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{u}}^k - \underline{\underline{u}}^{k-1}))$$

- Correcteur via l'équation constitutive

$$\underline{\underline{\sigma}}^k = \mathcal{F}(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{u}}^k))$$

■ Méthode de **type Newton** ou **quasi-Newton**

- Résolution du problème quasi-statique non linéaire :

Algorithme de résolution EF

Pour $k = 1$ jusqu'à convergence faire

- Un calcul d'équilibre global

$$[\underline{\underline{K}}^{k-1}][\delta \underline{U}^k] = -[\underline{R}^{k-1}]$$

- En chaque point de Gauss, une intégration locale de l'équation constitutive

$$\underline{\underline{\Sigma}}^k = \mathcal{F}(\underline{E}([\underline{U}^k]))$$

- Résolution du **problème quasi-statique non linéaire** :

Algorithme de résolution EF

Pour $k = 1$ jusqu'à convergence faire

- Un calcul d'équilibre global

$$[\underline{\underline{K}}^{k-1}][\delta \underline{U}^k] = -[\underline{R}^{k-1}]$$

- En chaque point de Gauss, une intégration locale de l'équation constitutive

$$\underline{\underline{\Sigma}}^k = \mathcal{F}(\underline{E}([\underline{U}^k]))$$

- Principe de la méthode EF² ¹ :

- étape intégration locale →

{ résolution d'un **problème quasi-statique local sur un VER**,
 { **moyenne des contraintes sur le VER** (correcteur)

1. F. Feyel, Computational Materials Science, 1999

■ Principe de la méthode EF² :

Algorithme de résolution EF²

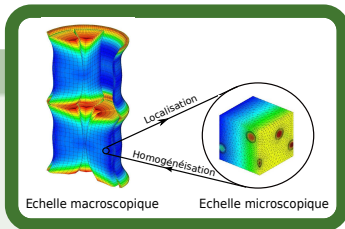
Pour $k = 1$ jusqu'à convergence faire

- Un calcul d'équilibre global

$$[\underline{\underline{K}}^{k-1}][\delta \underline{U}^k] = -[\underline{\underline{R}}^{k-1}]$$

- En chaque point de Gauss : résolution du « modèle EF² »

- *localisation* : C.L. sur ∂VER à partir de $\underline{\underline{E}}([\underline{U}^k])$
- Résolution EF d'un problème quasi-statique non-linéaire sur le VER
- *homogénéisation* : $\underline{\underline{\Sigma}}^k = \langle \underline{\underline{\sigma}}^k \rangle_{VER} = \frac{1}{|VER|} \int_{VER} \underline{\underline{\sigma}} dV$



■ Principe de la méthode EF² :

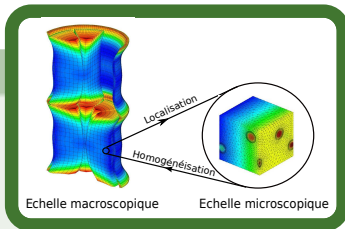
Algorithme de résolution EF²

Pour $k = 1$ jusqu'à convergence faire

- Un calcul d'équilibre global

$$[\underline{K}^{k-1}][\delta \underline{U}^k] = -[\underline{R}^{k-1}]$$

- En chaque point de Gauss : résolution du « modèle EF² »



■ Méthode :

- **parallélisable** : par point de Gauss
- **récursive** : d'où le nom EF² pour 2 échelles...
- **générique** : solveur sur l'échelle micro (EF, FFT,...)

■ Principe de la méthode EF² :

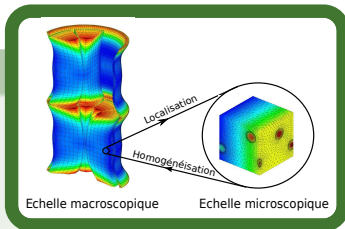
Algorithme de résolution EF²

Pour $k = 1$ jusqu'à convergence faire

- Un calcul d'équilibre global

$$[\underline{K}^{k-1}][\delta \underline{U}^k] = -[\underline{R}^{k-1}]$$

- En chaque point de Gauss : résolution du « modèle EF² »



■ Intérêts ☺ :

- aucune équation constitutive macroscopique
- répartition spatiale locale des variables mécaniques

■ Principe de la méthode EF² :

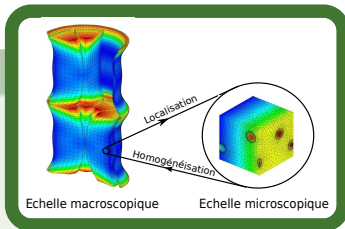
Algorithme de résolution EF²

Pour $k = 1$ jusqu'à convergence faire

- Un calcul d'équilibre global

$$[\underline{K}^{k-1}][\delta \underline{U}^k] = -[\underline{R}^{k-1}]$$

- En chaque point de Gauss : résolution du « modèle EF² »



■ Intérêts ☺ :

- aucune équation constitutive macroscopique
- répartition spatiale locale des variables mécaniques

■ Inconvénients ☹ :

- temps de calcul et espace mémoire très importants.

↪ **Incompatible avec une utilisation industrielle**

- Principe de la méthode EF² hybride :
 - Appeler le modèle EF² que sur des points de Gauss d'intérêt,
 - Utilisé un modèle homogénéisé ailleurs

- Principe de la **méthode EF² hybride** :

Algorithme de résolution EF²

Pour $k = 1$ jusqu'à convergence faire

- Un calcul d'équilibre global

$$[\underline{K}^{k-1}][\delta \underline{U}^k] = -[\underline{R}^{k-1}]$$

- **Si point de Gauss d'intérêt alors faire** appel du **modèle EF²**

- *localisation* : C.L. sur ∂VER à partir de $\underline{E}([\underline{U}^k])$
- Résolution EF d'un problème quasi-statique non-linéaire sur le VER
- *homogénéisation* : $\underline{\underline{\Sigma}}^k = \langle \underline{\underline{\sigma}}^k \rangle_{VER} = \frac{1}{|VER|} \int_{VER} \underline{\underline{\sigma}}^k dV$

- **Sinon faire** appel du **modèle homogénéisé**

$$\underline{\underline{\Sigma}}^k = \mathcal{F}(\underline{E}([\underline{U}^k]))$$

■ Principe de la méthode EF² hybride :

Algorithme de résolution EF²

Pour $k = 1$ jusqu'à convergence faire

- Un calcul d'équilibre global
- **Si point de Gauss d'intérêt alors faire** appel du **modèle EF²**
- **Sinon faire** appel du **modèle homogénéisé**

■ Intérêts 😊 :

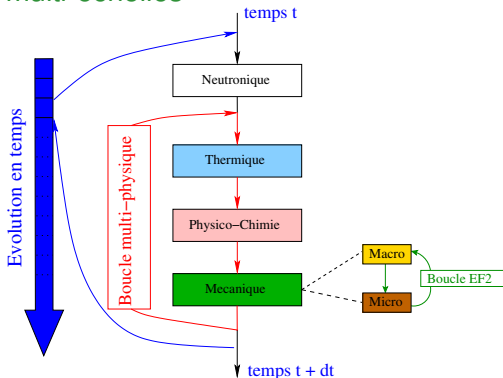
- gain en temps de calcul, espace mémoire et/ou en processeurs nécessaires vs EF² standard
- répartition spatiale locale autour des points de Gauss d'intérêt
- dégénère naturellement en algo EF ou EF² standard.

■ Inconvénients 😞 :

- nécessite une loi homogénéisée macroscopique représentative du comportement moyen de la microstructure

Vérification du modèle hybride

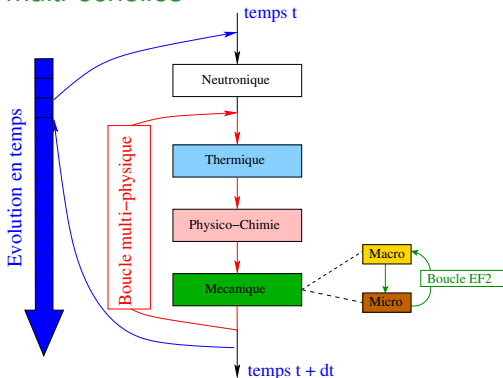
■ Couplage multi-physiques et multi-échelles



■ Plateforme logicielle : **PLEIADES**

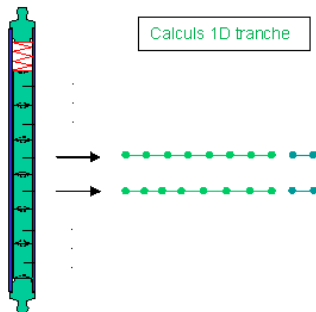
■ Solveur mécanique : **Cast3M**

■ Couplage multi-physiques et multi-échelles



- Plateforme logicielle : **PLEIADES**
- Solveur mécanique : **Cast3M**

■ Couplage multi-dimensionnel



- **Couplage 1D/3D itératif** (vs. Arlequin : système composite)

■ Hypothèses :

- localisation : hypothèse de déformations homogènes
- propriétés élastiques homogènes
- chargement externes homogènes par phase
- déformations imposées homogènes par phase ou sur le VER
- homogénéisation : moyennes spatiales sur le VER et sur les phases (couplage multi-physiques)

■ Loi constitutive microscopique : Norton linéaire

Pour chaque phase i :

$$\underline{\underline{\underline{\sigma}}} = \underline{\underline{\underline{C}}}_{el} : \left(\underline{\underline{\underline{\varepsilon}}} - \underline{\underline{\underline{\alpha}}}^i - \underline{\underline{\underline{E}}}^{g,i} - \underline{\underline{\underline{E}}}^{hom} \right)$$

avec $\underline{\underline{\underline{\dot{\alpha}}}}^i = K \dot{\phi}^i \underline{\underline{\underline{\sigma}}}^d$ et $\underline{\underline{\underline{E}}}_{kl}^{g,i} = E^{g,i} \delta_{kl}$.

■ Loi Mori Tanaka Incremental (MTI)² :

- Microstructures régies par des lois constitutives de type Norton linéaire

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \underline{\underline{C}}_{el} : \left(\underline{\underline{E}} - \sum_{j=1}^3 \underline{\underline{A}}^j - \underline{\underline{E}}^g - \underline{\underline{E}}^{hom} \right).$$

avec $\dot{\underline{\underline{A}}}^j + \frac{1}{\tau^j} \underline{\underline{A}}^j = \beta^j \underline{\underline{E}}^d$ et $\underline{\underline{E}}_{kl}^g = (c^1 E^{g,1} + c^2 E^{g,2}) \delta_{kl}$

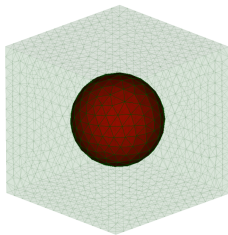
- Permet d'estimer l'évolution temporelle des contraintes hydrostatiques moyennes par phase.
- Vérifiée avec succès sur des calculs VER autonomes avec lois locales par phase.

2. J.M. Ricaud et R. Masson, International Journal of Solids and Structure, 2009

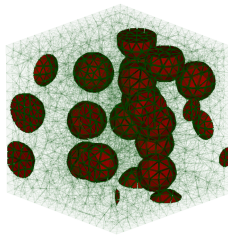
- VERs 3D générés à partir d'images 2D de la microstructure réelle (images microsonde)³.
 - Description 2-phases de la microstructure
 - amas plutonifères
 - matrice = amas uranifères et enrobage
- ↪ microstructure aléatoire de type **matrice-inclusions**.

3. R. Largenton, Thèse de doctorat, 2012.

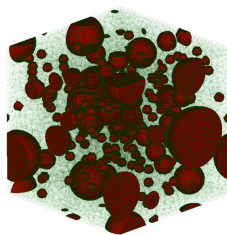
- VERs 3D générés à partir d'images 2D de la microstructure réelle (images microsonde)³.
- Description 2-phases de la microstructure
 ↪ microstructure aléatoire de type **matrice-inclusions**.
- 3 types de microstructures testés :



Milieu périodique
L = 100 μm



Inclusions monodispersées
L = 150 μm



Inclusions polydispersées
L = 150 μm

Inclusions
Matrice

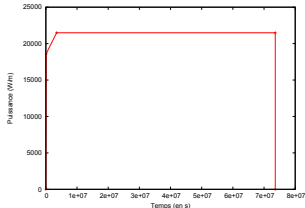
3. R. Largeton, Thèse de doctorat, 2012.

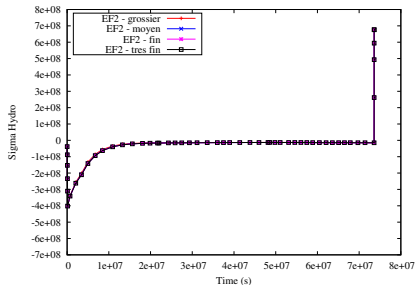
■ Milieu périodique - EF tétraédriques.

Nom	Nombre d'éléments	Nombre de nœuds Linéaire	Nombre de nœuds Quadratique	Fraction volumique
Grossier	1771	496	3104	0.09995
Moyen	8717	2174	14354	0.10994
Fin	27451	6070	42314	0.11178
Très fin	103781	21690	155038	0.11268

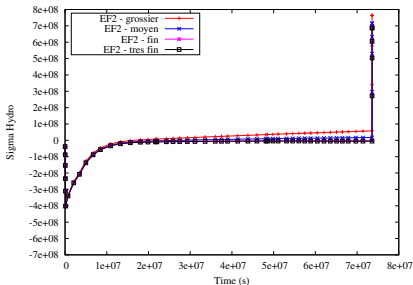
■ Couplage multi-physiques et multi-dimensionnel

■ Historique de puissance « plat » :

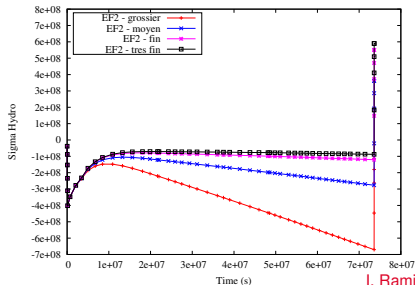




(a) Macroscopique

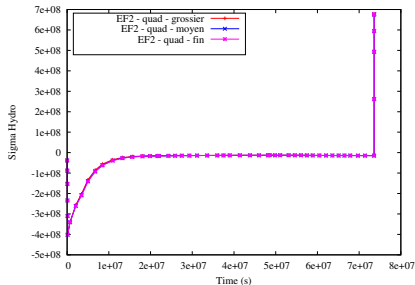


(b) Matrice

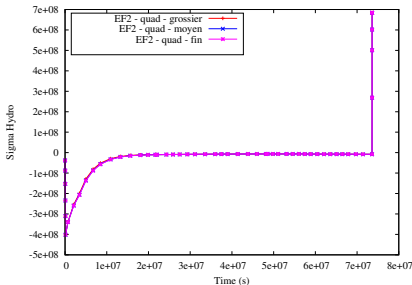


(c) Inclusion

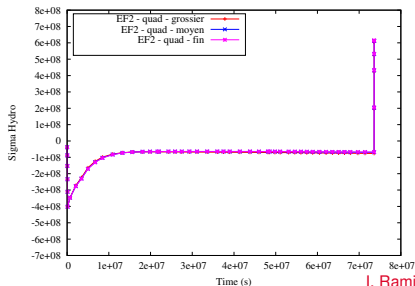
- Contrainte hydrostatique
- EF linéaires



(a) Macroscopique

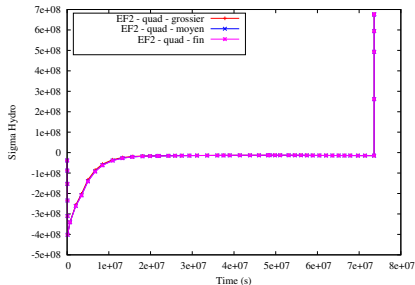


(b) Matrice

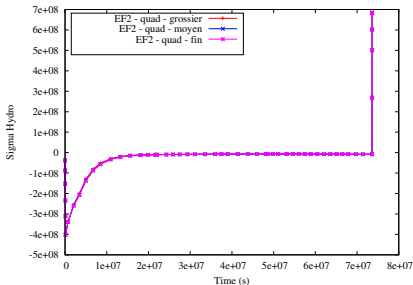


(c) Inclusion

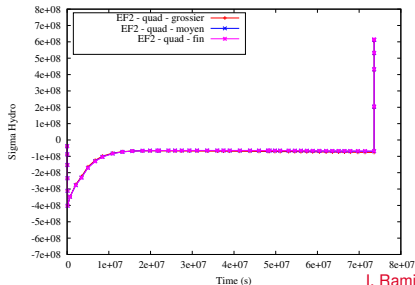
- Contrainte hydrostatique
- EF quadratiques



(a) Macroscopique



(b) Matrice



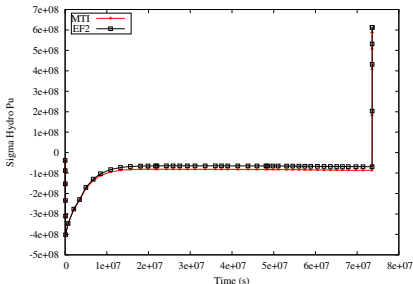
(c) Inclusion

■ Contrainte hydrostatique

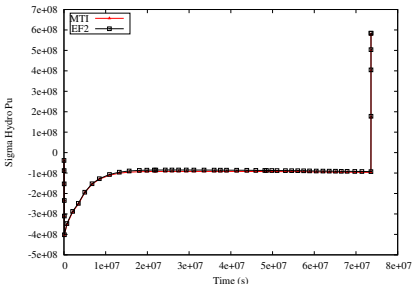
■ EF quadratiques

↪ Utilisés par la suite

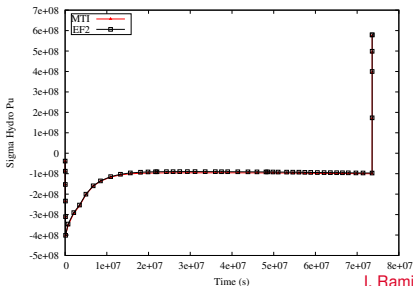
- Même exemple que précédemment
- **Comparaison** d'un calcul EF avec loi homogénéisée MTI et d'un calcul EF² hybride sur un point de Gauss d'intérêt.
- **Vérification du modèle EF²**



(a) Milieu périodique

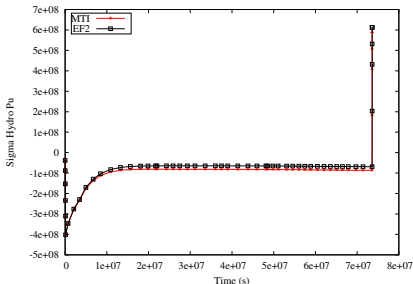


(b) Inclusions monodispersées

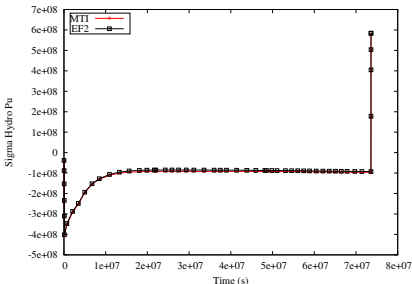


(c) Inclusions polydispersées

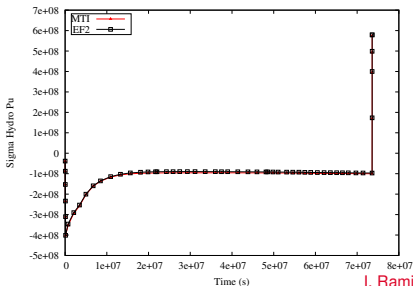
■ Contrainte hydrostatique dans les **amas Pu**



(a) Milieu périodique



(b) Inclusions monodispersées



(c) Inclusions polydispersées

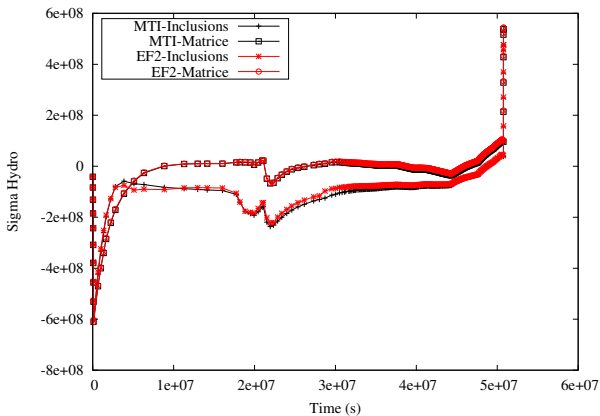
■ Contrainte hydrostatique dans les **amas Pu**

↪ Très bon accord EF^2 /MTI

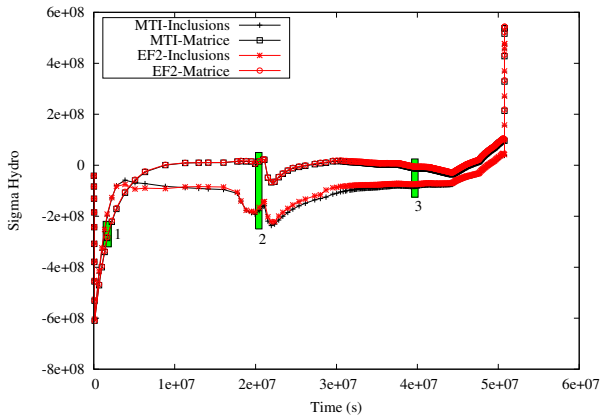
↪ Loi MTI représentative des milieux aléatoires

Application industrielle

- Issu de la **base de validation** du code ALCYONE :
 - 2 cycles d'irradiation en réacteur
 - Fraction volumique du Pu 6%
- Crayon découpé en **9 tranches axiales**
- **Temps de calcul x8 (25.000 nœuds), x40 (120.000 nœuds)** si 1 point de Gauss EF^2 par processeur (+ solveur itératif).

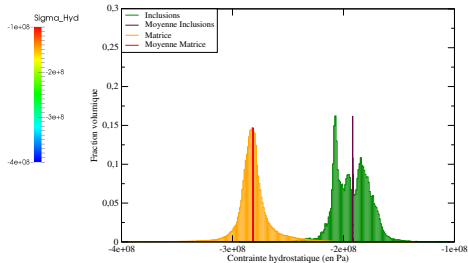
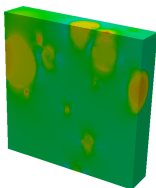
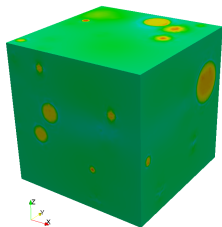


- Inclusions polydispersées
- Très bon accord EF²/ MTI



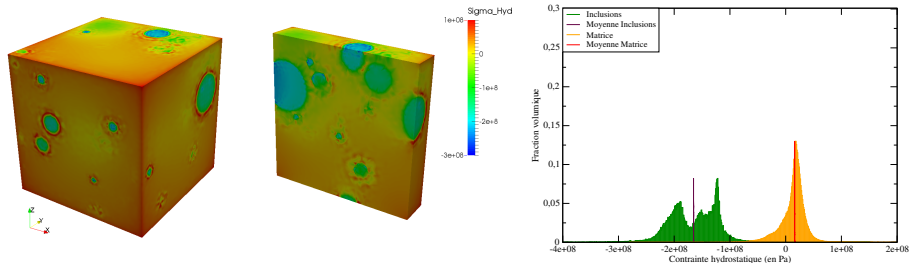
■ Observations de la microstructure à différents instants

1 - Début irradiation (Pas de temps 14/320) : début de la phase de relaxation par fluage d'irradiation



- Matrice plus en compression que les amas
- Amas non répartis de manière aléatoire

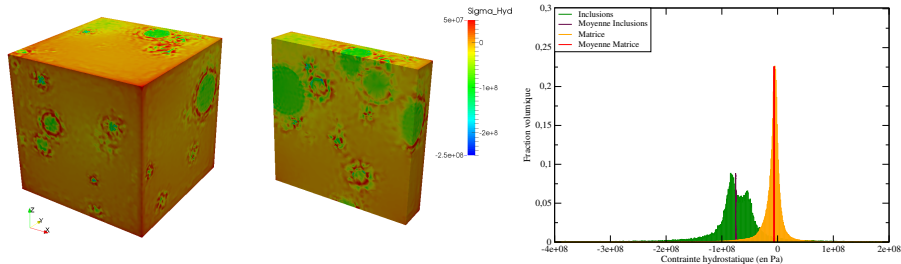
2 - Fin premier cycle (Pas de temps 30/320)



film_polyD_30.avi

- Matrice en moyenne en traction et amas en compression
↔ Gonflement gazeux plus élevé dans les amas
- Enrobage en traction autour des amas

3 - Milieu second cycle (Pas de temps 150/320)



- Histogrammes se resserrent → contraintes homogènes.
- Enrobage toujours en traction autour des amas Pu

Conclusions et perspectives

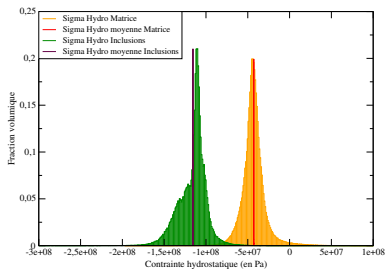
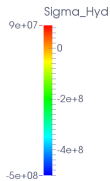
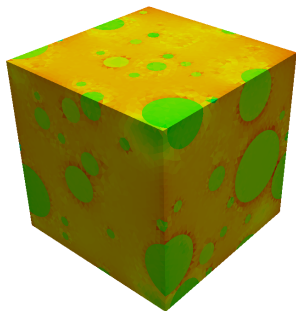
- Faisabilité d'un **calcul mécanique à deux échelles** dans un code multi-physiques industriel existant.
- **Stratégie hybride EF/EF²** proposée :
 - **informations locales spatiales** dans la microstructure à des endroits d'intérêt
 - **vérifiée** (cvg en maillage, vs. loi homogénéisée)
 - **appliquée sur un exemple industriel** (combustible MOX)

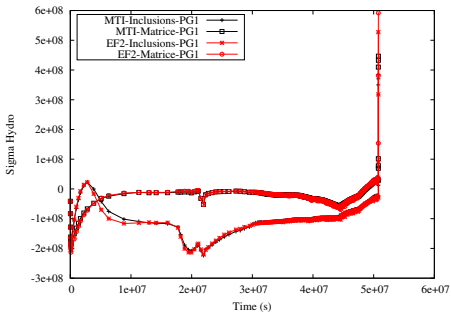
- Faisabilité d'un **calcul mécanique à deux échelles** dans un code multi-physiques industriel existant.
- **Stratégie hybride EF/EF²** proposée :
 - **informations locales spatiales** dans la microstructure à des endroits d'intérêt
 - **vérifiée** (cvg en maillage, vs. loi homogénéisée)
 - **appliquée sur un exemple industriel** (combustible MOX)
- **Perspectives** :
 - Tenir compte de la **fissuration** dans la microstructure : fragmentation locale du combustible
 - **Modes nécessaires** aux approches basées sur la réduction de modèle (NTFA,...) et comparaison champ complet/réduction modèle/champ moyen
 - **Solveur FFT** sur la microstructure : gain temps de calcul.

Merci pour votre attention

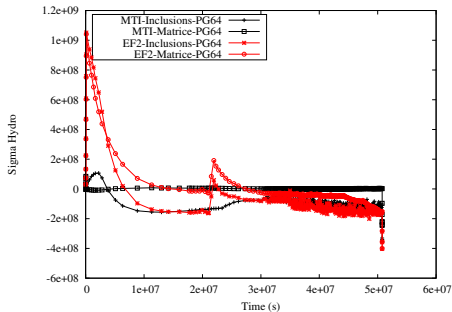
Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives
Centre de Cadarache | DEN/DEC/SESC b151 - 13108 Saint-Paul-Lez-Durance
T. +33 (0)4.42.25.23.66 | F. +33 (0)4.42.25.47.47
Établissement public à caractère industriel et commercial | RCS Paris B 775 685 019

Direction de l'Énergie Nucléaire
Département d'Études des Combustibles
Service d'Études et de Simulation du
comportement des Combustibles

Autre cas test - $P_u = 14\%$ 



(a) Point de Gauss central (sain)



(b) Point de Gauss périphérie (fissuré)