

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

I. Ramière, R. Masson, B. Michel, S. Bernaud

CEA, Centre de Cadarache, DEN, DEC, SESC, F-13108 Saint-Paul-Lez-Durance.  
{isabelle.ramiere,renaud.masson,bruno.michel,stephane.bernaud}@cea.fr

**Résumé** — Nous proposons ici de mettre en place un algorithme multi-échelles de type Éléments Finis au carré dans un code de calcul industriel existant afin de pouvoir simuler précisément le comportement mécanique hétérogène de certaines microstructures. Une stratégie de couplage multi-physiques/multi-échelles efficace est proposée et les résultats obtenus permettent d'apprécier les différents apports de la stratégie multi-échelles.

**Mots clés** — Éléments finis au carré, multi-échelles, multi-physiques, hétérogénéités, homogénéisation.

## 1 Contexte et objectifs

Dans les réacteurs électronucléaires du parc français, deux types de combustibles sont utilisés : des céramiques de dioxyde d'uranium ( $\text{UO}_2$ ) ou des céramiques d'oxydes mixtes (MOX), à savoir du dioxyde d'uranium et du dioxyde de plutonium issu du retraitement du combustible usé. Le procédé d'élaboration des céramiques MOX MIMAS (MICronized MASTer blend) conduit à un combustible avec une microstructure hétérogène : des amas plutonifères et uranifères sont présents dans un enrobage uranifère.

À l'échelle du crayon combustible, la simulation numérique du comportement mécanique des combustibles MOX s'appuie sur des lois empiriques (cf. [1]) ou, plus récemment, sur des lois déduites par homogénéisation (cf. [11]). L'approche par homogénéisation permet de représenter l'effet de paramètres microstructuraux sans avoir à mailler la microstructure, ce qui rendrait les temps de calculs de telles simulations très prohibitifs vis-à-vis d'une utilisation industrielle. Des simulations locales à l'échelle microscopique sur des Volumes Élémentaires Représentatifs (VER) permettent par ailleurs d'obtenir la répartition locale des contraintes mécaniques dans les amas ainsi que dans la matrice [4, 8].

L'idée de ce travail est de coupler les deux échelles de modélisation dans un même schéma de calcul afin de pouvoir obtenir à façon des informations moyennées ou complètes sur l'état mécanique local de la microstructure lors d'un calcul macroscopique à l'échelle du crayon combustible.

## 2 Méthode des Éléments Finis au carré

### 2.1 Algorithme standard

La méthode des éléments finis au carré ( $\text{EF}^2$ ), introduite dans les années 2000 [5, 6], permet de décrire le comportement des hétérogénéités de structure par une approche à deux échelles : macroscopique et microscopique, cf. figure 1. Le maillage macroscopique correspond à celui de la structure à modéliser tandis qu'à l'échelle microscopique, un VER représentatif de la microstructure est utilisé.

L'algorithme  $\text{EF}^2$  consiste alors à coupler un calcul homogénéisé à l'échelle macroscopique avec des calculs locaux de microstructure, ces calculs locaux étant réalisés autour de chaque point de Gauss du maillage macroscopique. Cet algorithme repose sur 4 étapes principales qui sont enchaînées de manière itérative jusqu'à convergence du champ des contraintes homogénéisées à l'échelle macroscopique :

- un calcul d'équilibre sur le maillage macroscopique basé sur des propriétés homogènes équivalentes ;
- une étape de *localisation* qui permet de déterminer, à partir du tenseur des déformations macroscopiques, les conditions aux limites des différents calculs microscopiques ;

- des calculs d'équilibre sur le VER utilisant une modélisation du comportement non-linéaire à l'échelle de la microstructure ;
- une étape d'*homogénéisation* qui permet d'obtenir le tenseur des contraintes macroscopiques à partir de l'état de contrainte micromécanique.

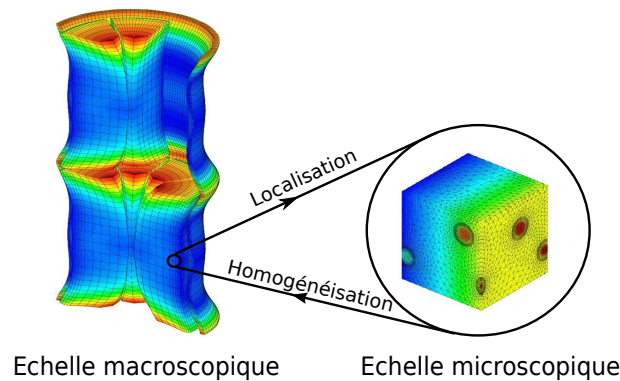


FIGURE 1 – Principe d'un calcul EF<sup>2</sup>.

Le nom de la méthode provient du fait que les calculs d'équilibre sont effectués à chaque échelle à l'aide de la méthode des éléments finis. Cette méthode multi-échelles ne nécessite aucune loi constitutive à l'échelle macroscopique grâce à l'appel récursif du calcul microscopique dans le calcul homogénéisé macroscopique. Ce type d'approche permet ainsi également de pouvoir faire des calculs de référence pour construire et valider des lois homogénéisées représentatives de la microstructure.

Au niveau du schéma de calcul, le calcul EF à l'échelle microscopique remplace l'intégration de la loi de comportement au point de Gauss considéré. La stratégie multi-échelles EF<sup>2</sup> peut donc s'implanter facilement dans n'importe quel solveur EF mécanique existant. Par ailleurs, l'indépendance des calculs sur le VER après l'étape de localisation permet une parallélisation efficace des calculs à l'échelle microscopique.

## 2.2 Algorithme mixte

Les premiers travaux concernant la mise en place d'une stratégie de couplage multi-échelles EF<sup>2</sup> sur des combustibles hétérogènes ont été effectués dans [3]. Cependant dans le cadre d'une simulation industrielle, l'utilisation d'un schéma de calcul EF<sup>2</sup> standard est trop prohibitif en temps de calcul. En effet, malgré la très grande scalabilité de la méthode, le nombre de point de Gauss est vite important à l'échelle macroscopique.

La stratégie proposée ici est donc de faire des calculs de type EF<sup>2</sup> uniquement autour de points de Gauss d'intérêt et d'intégrer une loi de comportement homogénéisée aux autres points de Gauss. On a donc un algorithme mixte. Le champ de contraintes macroscopiques sera donc la composition de valeurs provenant de la modélisation par champs moyens et de la moyenne des valeurs obtenues par calculs à champs complets. La résolution de l'équilibre macroscopique permet alors que l'étape de localisation tienne compte de la combinaison des deux approches.

L'avantage évident de cette approche est un gain en temps de calcul par rapport à l'approche EF<sup>2</sup> standard tout en continuant à avoir des informations complètes sur l'état mécanique local en des points de Gauss stratégiques du calcul. En contre-partie, il faut disposer d'une loi de comportement homogénéisée à l'échelle macroscopique.

## 3 Simulations multi-physiques et multi-échelles de combustibles nucléaires hétérogènes

### 3.1 Couplage multi-physiques et multi-échelles

La simulation du comportement des combustibles nucléaires implique la prise en compte de plusieurs physiques : neutronique, thermique, thermo-hydraulique, physico-chimie, mécanique, etc. Dans

les applications de la plateforme PLEIADES [9] (Plateforme Logicielle pour les Éléments Irradiés dans les Assemblages, en Démonstration, en Expérimentation, ou en Service), un couplage multi-physiques de point fixe de type Gauss-Seidel est utilisé entre les différents composants physiques. Ce type d'approche permet d'utiliser des solveurs dédiés et efficaces pour chacune des physiques. En particulier, le logiciel Cast3M ([www.cast3m.cea.fr](http://www.cast3m.cea.fr)) est utilisé comme solveur mécanique et thermique. En contrepartie la convergence de point fixe peut être longue et difficile à obtenir, des outils numériques de type accélérateurs de convergence doivent alors être mis en place [10].

La simulation multi-échelles du comportement mécanique des combustibles hétérogènes via l'algorithme EF<sup>2</sup> mixte présenté dans la section précédente, peut donc se faire directement à l'intérieur du composant mécanique basé sur Cast3M. Le schéma de calcul présente alors une double boucle de type point fixe imbriquée, voir figure 2.

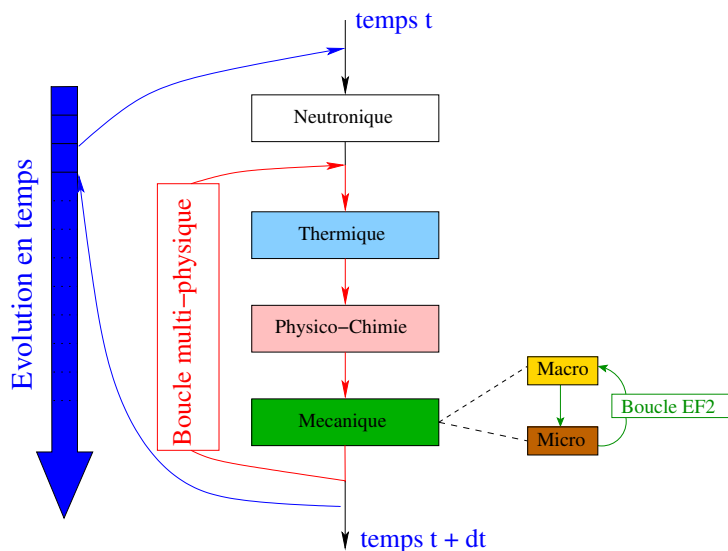


FIGURE 2 – Couplage multi-physiques et multi-échelles

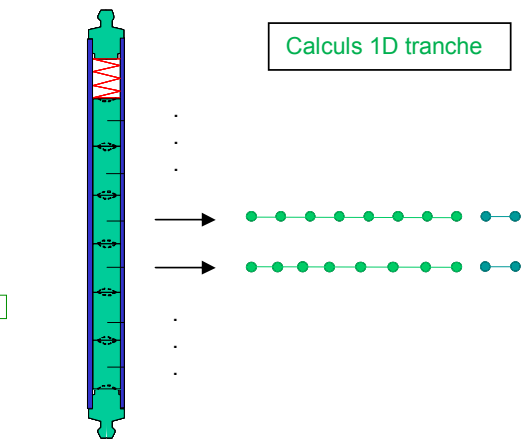


FIGURE 3 – Modélisation 1D du crayon combustible

Par ailleurs le couplage multi-échelles EF<sup>2</sup> proposé ici est aussi un couplage multi-dimensionnel puisque le maillage macroscopique de la structure est 1D (représentation du crayon combustible à différentes hauteurs), cf. figure 3, alors que le maillage du VER est 3D. Il s'agit d'un couplage mécanique multi-échelles 1D/3D géré de manière itérative contrairement aux méthodes de type Arlequin [2] où le système composite est résolu.

## 3.2 Représentation de la microstructure, lois constitutives et homogénéisation

### 3.2.1 VERs représentatifs de la microstructure MOX

Des microstructures représentatives 3D du combustible MOX ont pu être générées à partir d'images 2D de la microstructure réelle (images microsondes). Cette méthodologie tout comme sa validation (comparaison des covariances expérimentales et numériques) est décrite en détails dans [7]. Dans ce travail, nous adoptons une description 2-phases de cette microstructure, description dans laquelle les inclusions représentatives des amas plutonifères sont conservées tandis que la matrice est constituée des amas uranifères et de l'enrobage, le comportement de cette deuxième phase appelée matrice étant homogène. Cette microstructure est au final une microstructure aléatoire de type matrice-inclusions avec des inclusions présentant une distribution de tailles (inclusions polydispersées). Pour une même fraction volumique, d'autres types de microstructures de type matrice-inclusions peuvent être considérées (cf. [7]) : des microstructures aléatoires dans lesquelles une seule taille d'inclusions est considérée (inclusions monodispersées) ou encore une microstructure périodique dans laquelle les inclusions ne sont pas réparties aléatoirement mais périodiquement (milieu périodique). Afin de simuler ces différentes microstructures, les trois VERs MOX représentés sur la figure 4 ont été générés grâce à l'application VER de la plateforme PLEIADES avec la méthodologie décrite dans [3, 7]. La fraction volumique totale de la ou des inclusions plutonifères varie entre 10 et 14%, de sorte à respecter les caractéristiques de fabrication. Le

rapport de taille (côté du VER)/(diamètre de la plus grande inclusion) varie entre 2 et 3.

Inclusions  
Matrice

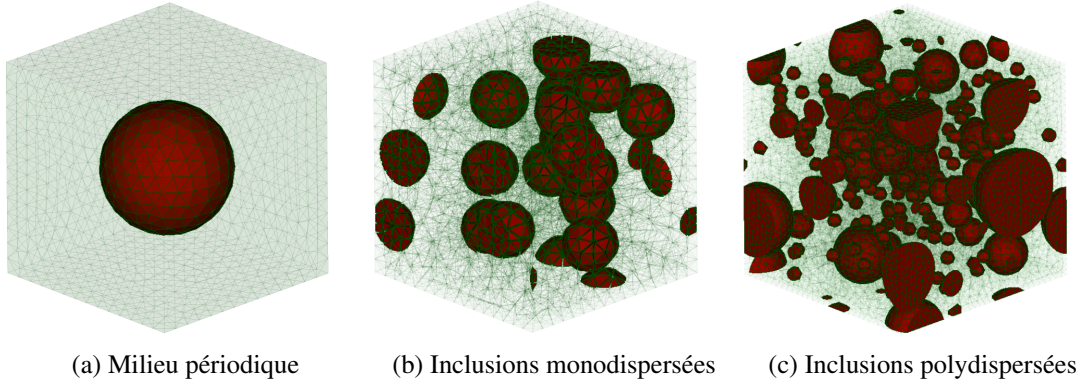


FIGURE 4 – VERs utilisés dans le couplage multi-échelles

### 3.2.2 Lois constitutives et chargements

Concernant le comportement mécanique du matériau, chaque phase (inclusion ou matrice) suit la loi de comportement suivante :

$$\underline{\underline{\underline{\sigma}}} = \underline{\underline{\underline{C}}}^e : \left( \underline{\underline{\underline{\varepsilon}}} - \underline{\underline{\underline{\alpha}}} - \underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}^g - \underline{\underline{\underline{E}}}^{th} \right), \quad \underline{\underline{\underline{\dot{\alpha}}}} = K \dot{\phi} \underline{\underline{\underline{\sigma}}}^d \quad (1)$$

$\underline{\underline{\underline{\alpha}}}$  étant l'unique variable interne du modèle, égale au fluage induit par l'irradiation et dépendant linéairement du taux de fission  $\dot{\phi}$  et du déviateur des contraintes  $\underline{\underline{\underline{\sigma}}}^d$ . Le paramètre  $K$  est un paramètre matériau qui dépend de la température. Par ailleurs,  $\underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}^g = \varepsilon^g \delta_{ij}$  désigne le gonflement induit par l'irradiation (cf. modèle de physico-chimie dans la figure 2) et  $\underline{\underline{\underline{E}}}^{th}$  la déformation due à la dilatation thermique, homogène dans la microstructure. La densité de fission tout comme le gonflement dépendent de la teneur en plutonium au point considéré : le matériau considéré présente bien un comportement mécanique hétérogène. Le tenseur des modules élastiques  $\underline{\underline{\underline{C}}}^e$  est considéré uniforme et isotrope.

La température, la densité de fission et les chargements de type déformations imposées provenant du couplage multi-physiques (gonflement, dilatations thermiques) seront donc passés dans l'étape de localisation en plus des déformations macroscopiques.

### 3.2.3 Localisation et homogénéisation

La méthode EF<sup>2</sup> converge quel que soit le couple localisation/homogénéisation choisi [6]. Ici, les conditions aux limites imposées sur les bords du VER lors de l'étape de localisation sont des déplacements obtenus à partir du tenseur des déformations macroscopiques  $\underline{\underline{\underline{E}}}$  au point de Gauss considéré :

$$\underline{\underline{\underline{u}}} = \underline{\underline{\underline{x}}} \cdot \underline{\underline{\underline{E}}}, \quad (2)$$

où  $\underline{\underline{\underline{x}}}$  est le vecteur position. L'étape d'homogénéisation consiste à obtenir le tenseur des contraintes macroscopique  $\underline{\underline{\underline{\Sigma}}}$  au point de Gauss considéré par une simple moyenne spatiale sur le VER du champ de contraintes microscopique obtenu après la résolution EF locale :

$$\underline{\underline{\underline{\Sigma}}} = \langle \underline{\underline{\underline{\sigma}}} \rangle = \frac{1}{|V|} \int_V \underline{\underline{\underline{\sigma}}} dV \quad (3)$$

où  $V$  désigne le VER. Par ailleurs, comme dans notre cas le couplage multi-physiques mécanique/physico-chimie repose sur l'échange des contraintes moyennes par phase et des gonflements par phase, l'étape d'homogénéisation consiste également à fournir la contrainte hydrostatique moyenne par phase.

Aux points de Gauss où des informations locales spatiales ne sont pas requises, une loi homogénéisée MOX bi-phase [11] dite MTI (Mori Tanaka Incremental) modélisant des milieux aléatoires de type

matrice-inclusions avec une distribution isotrope des phases, est utilisée :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \underline{\underline{C}}^e \left( \underline{\underline{E}} - \sum_{i=1}^{i=3} \underline{\underline{\alpha}}^i - \underline{\underline{E}}^g - \underline{\underline{E}}^{th} \right), \quad \underline{\underline{\dot{\alpha}}}^i + \frac{1}{\tau^i} \underline{\underline{\alpha}}^i = \beta^i \underline{\underline{E}}^d \quad \text{et} \quad \underline{\underline{E}}^g = \langle \underline{\underline{\epsilon}}^g \rangle \quad (4)$$

où  $\underline{\underline{E}}^d$  est le déviateur de la déformation macroscopique. Les trois variables internes macroscopiques  $\underline{\underline{\alpha}}^i$  sont entièrement définies par leur équation d'évolution et leur valeur initiale (en général nulle). Les 6 constantes  $(\tau^i, \beta^i)_{i=1..3}$  sont déduites par homogénéisation, voir [11]. Ces constantes dépendent des propriétés mécaniques des phases et de leur fraction volumique. Cette loi permet d'estimer également par homogénéisation l'évolution temporelle des contraintes hydrostatiques moyennes par phase. Cette loi est donc adaptée au couplage multi-physique hétérogène proposé.

### 3.3 Vérification de la stratégie multi-échelles proposée

#### 3.3.1 Convergence en maillage à l'échelle microscopique

Nous avons voulu dans un premier temps évaluer l'influence du maillage de la microstructure sur les propriétés homogènes obtenues par l'algorithme EF<sup>2</sup>. Le maillage macroscopique 1D est fixé à environ 50 éléments. Afin de se ramener à un cas d'un couplage multi-physique assez trivial, un historique de puissance plat représenté sur la figure 5 est simulé.

Un calcul multi-échelles EF<sup>2</sup> est uniquement effectué au point de Gauss le plus proche du noeud central, là où la température est maximale. La convergence en maillage est étudiée pour la microstructure de type milieu périodique, cf. figure 4a. Nous avons généré 4 raffinements de maillage différents résumés dans le tableau 1.

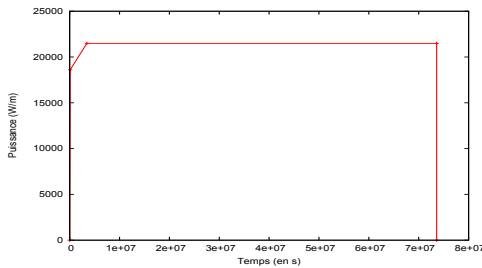


FIGURE 5 – Historique de puissance plat

Nom	Nombre d'éléments	Fraction volumique
Grossier	1771	0.09995
Moyen	8717	0.10994
Fin	27451	0.11178
Très fin	103781	0.11268

TABLE 1 – Caractéristiques des différents maillages du milieu périodique

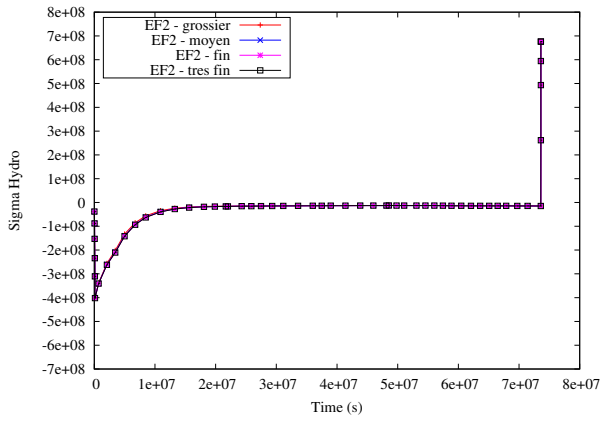
Dans un premier temps, des éléments fins tétraédriques linéaires ont été utilisés. La contrainte hydrostatique homogène moyenne totale et par phase obtenue au point de Gauss central après le calcul couplé multi-physiques et multi-échelles est représentée en fonction du temps et du maillage sur les figures 6a à 6c. On remarque que la contrainte hydrostatique moyenne est peu sensible au pas du maillage alors que sa moyenne par phase l'est plus, surtout pour la phase inclusionnaire. En effet, c'est la phase avec la plus petite partie connexe qui est évidemment la plus sensible aux variations de pas de maillage. Par ailleurs l'inclusion plutonifère représentant environ 10% du volume de la microstructure, les écarts sur cette dernière sont environ 10 fois plus importants que ceux sur la matrice.

Lorsque des éléments fins quadratiques sont utilisés sur les mêmes maillages que précédemment, les résultats sont beaucoup moins sensibles au maillage, même pour la phase inclusionnaire et la convergence en maillage est obtenue dès le maillage grossier, cf. figure 6d. Dans la suite des éléments fins quadratiques seront donc utilisés pour mailler le VER.

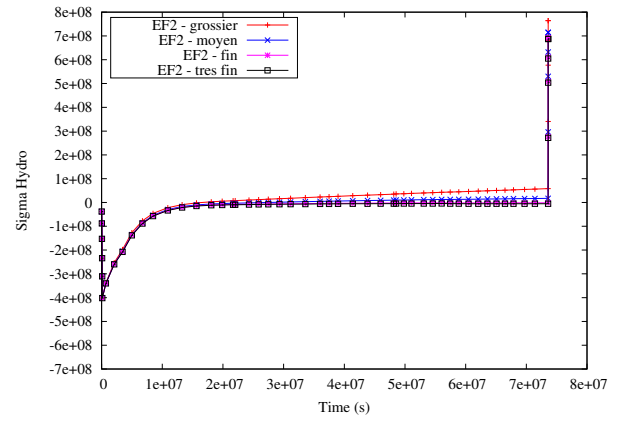
#### 3.3.2 Vérification de l'accord EF<sup>2</sup>/loi homogène MTI

Sur le même exemple, nous avons comparé les contraintes moyennes (totale ou hydrostatiques par phase) obtenues après convergence de l'algorithme EF<sup>2</sup> avec celles fournies par la loi homogène MTI décrite dans la section 3.2.3 au même point de Gauss (ici le point de Gauss central). Les simulations ont été réalisées sur les VERs présentés sur la figure 4 et maillés avec des éléments fins quadratiques<sup>1</sup>. Les contraintes hydrostatiques moyennes pour la phase inclusionnaire sont reportées sur la figure 7.

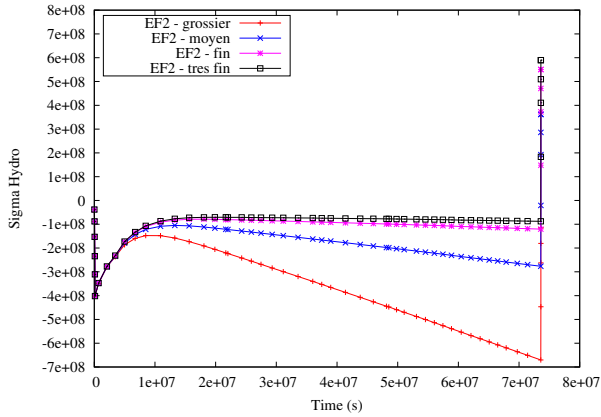
1. Milieu périodique : maillage "Moyen", 8717 éléments / fv = 0.10994 ; Inclusions monodispersées : 16745 éléments / fv = 0.13279 ; Inclusions polydispersées : 103608 éléments / fv = 0.13884



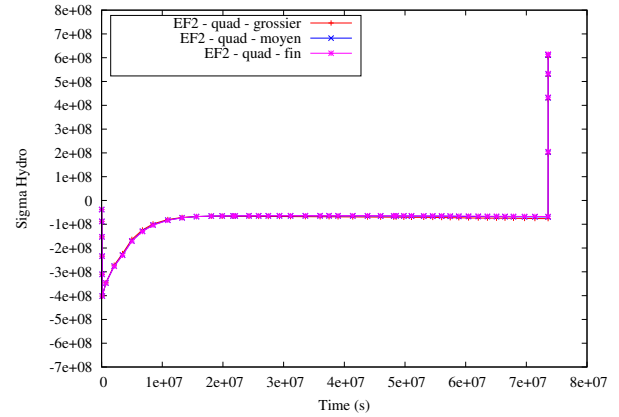
(a) Moyenne - EF linéaires



(b) Matrice - EF linéaires

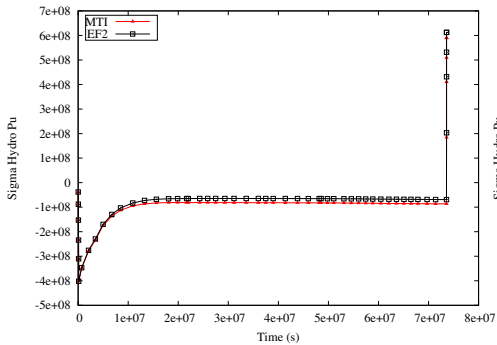


(c) Inclusion - EF linéaires

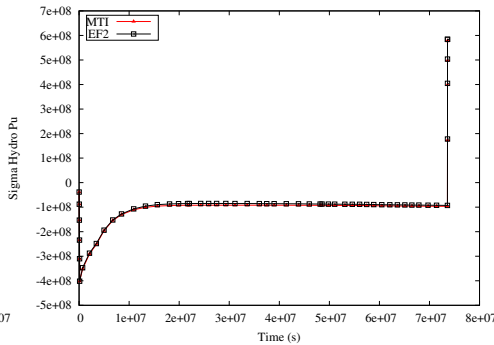


(d) Inclusion - EF quadratiques

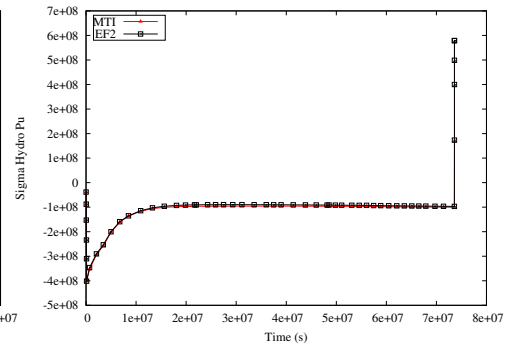
FIGURE 6 – Convergence en maillage de la contrainte hydrostatique obtenue par EF<sup>2</sup> - Milieu périodique



(a) Milieu périodique



(b) Inclusions monodispersées



(c) Inclusions polydispersées

FIGURE 7 – Comparaison EF<sup>2</sup>/MTI pour l'historique de puissance plate - Contrainte hydrostatique moyenne sur les inclusions.

On constate le très bon accord EF<sup>2</sup>/MTI sur le VER monodisperse et le VER polydisperse et un léger écart constant pour le VER contenant le motif périodique. L'effet de la répartition spatiale des inclusions (périodique ou aléatoire) reste donc limité, le modèle MTI étant construit pour des milieux aléatoires, cf. section 3.2.3, ce modèle est naturellement plus adapté à ce type de microstructures. Ce calcul permet donc de valider à la fois le modèle EF<sup>2</sup> proposé et la loi homogénéisée MTI.

### 3.4 Résultats industriels

Nous appliquons à présent l'algorithme mixte EF<sup>2</sup>/MTI sur un historique de chargement réel représentatif du chargement subi par le combustible MOX en réacteur. Les résultats présentés dans la suite

se focalisent autour du point Gauss central où le couplage multi-échelles  $EF^2$  est appliqué. La figure 8 permet de visualiser les contraintes hydrostatiques moyennes obtenues pour la microstructure avec inclusions monodispersées. Nous constatons un très bon accord entre le comportement homogénéisé MTI et le matériau homogène équivalent au calcul EF micromécanique.

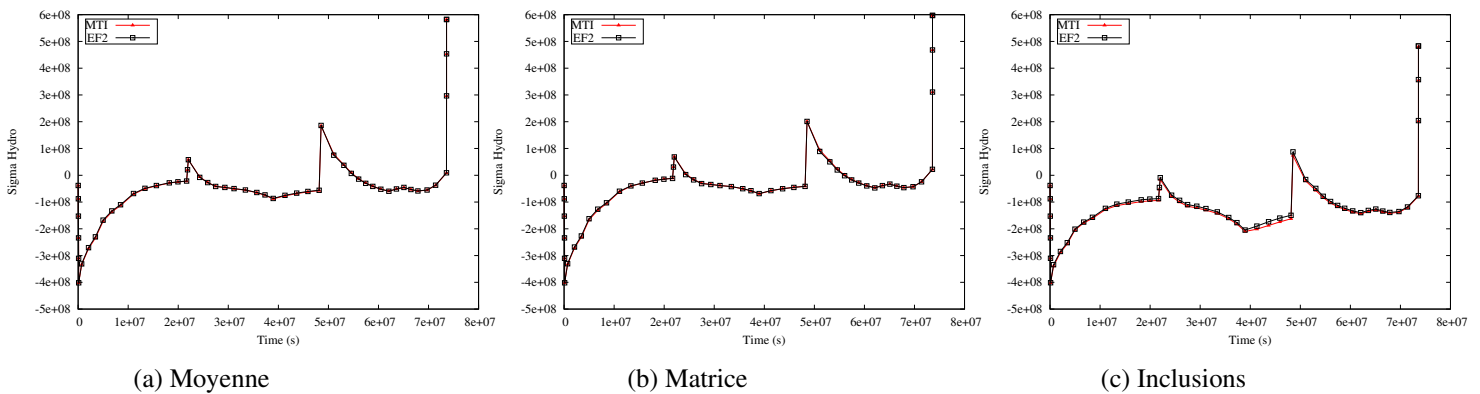


FIGURE 8 – Comparaison  $EF^2$ /MTI sur la contrainte hydrostatique pour un profil de puissance réel.

Le très bon accord  $EF^2$ /MTI sur les contraintes hydrostatiques moyennes est également obtenu pour le VER avec inclusions polydispersées. Cependant, à l’instar des résultats de la section précédente, cet exemple confirme que la loi MTI semble légèrement moins bien adaptée aux milieux périodiques, en particulier pour représenter la phase inclusionnaire.

Le calcul  $EF^2$  permet de plus d’avoir des informations locales dans la microstructure. A titre d’exemple, la figure 9 représente le champ de contraintes hydrostatiques obtenues au milieu du premier cycle, sur le plateau de maintien (période 14 du calcul) pour les 2 microstructures aléatoires. Sur les figures 9a et 9c, le champ de contraintes hydrostatique est visualisé sur le VER. On peut constater que conformément aux courbes précédentes, les amas plutonifères sont plus en compression que la matrice, ce qui est en cohérence avec un gonflement gazeux plus élevé dans ceux-ci. On remarque également que l’enrobage est en traction autour des amas. Les histogrammes des figures 9b et 9d permettent de visualiser la répartition statistique des contraintes hydrostatiques dans la microstructure. On constate que certains points de la matrice sont en traction (ceux autour des amas) mais que la valeur moyenne reste en compression. Dans les deux phases, la contrainte hydrostatique semble suivre une loi normale centrée sur la valeur moyenne. Cependant on constate que le VER polydisperse n’est pas assez grand pour représenter de manière parfaitement aléatoire la dispersion des amas.

## 4 Conclusion

Nous avons démontré la faisabilité de la mise en place d’un algorithme multi-échelles de type  $EF^2$  dans un code de calculs multi-physiques industriel existant. Cet algorithme impliquant la résolution complète du comportement micromécanique lors de la résolution de l’équilibre macroscopique, permet d’accéder à toutes les informations locales dans la microstructure. La mise en compression des amas plutonifères d’un combustible MOX et la mise en traction de l’enrobage autour de ceux-ci a pu ainsi être visualisée. Par ailleurs, cet algorithme à champ complet permet de vérifier la réponse donnée par des lois basées sur un matériau homogène équivalent sur des exemples industriels. Enfin l’algorithme mixte  $EF^2$ /loi homogène proposé rend cette stratégie de couplage multi-échelles accessible en temps de calcul pour un logiciel industriel.

La prochaine étape de développement concernera la prise en compte de la fissuration dans l’algorithme multi-échelles proposé. La comparaison de l’approche mixte avec une approche de type réduction de modèles comme la NTFA (voir [8]) est aussi envisagée.

## Remerciements

Le développement de la méthode  $EF^2$  a été réalisé dans le cadre du projet PLEIADES, co-développé par le CEA, EDF et AREVA. Les auteurs remercient Olivier Fandeur pour ses développements Cast3m qui ont permis l’implantation aisée de l’algorithme  $EF^2$  dans ce solveur.

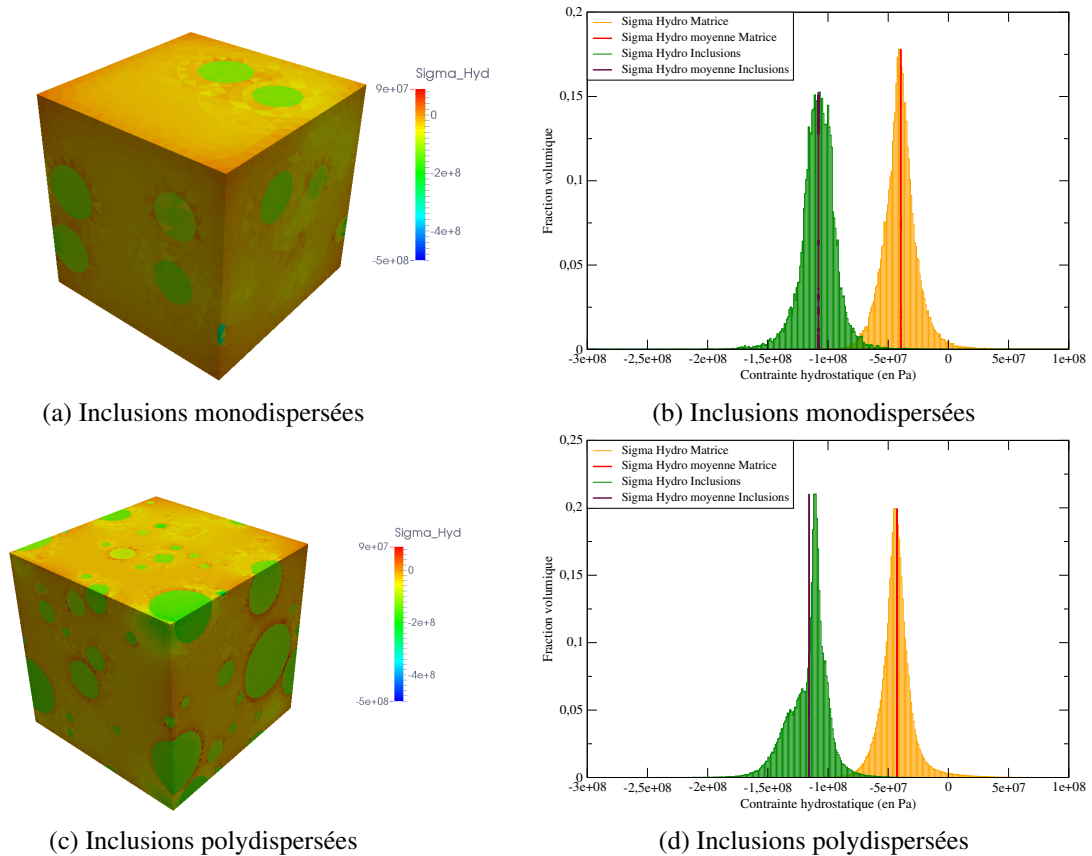


FIGURE 9 – Répartition des contraintes hydrostatiques dans la microstructure.

## Références

- [1] V. Basini and F. Bruguier. Etudes des propriétés mécaniques du lot industriel MOX-E. Note Technique SPUA/LMPC 2004-053, CEA, 2004.
- [2] H. Ben Dhia. Problèmes mécaniques multi-échelles : la méthode Arlequin. *Comptes rendus de l'Académie des Sciences de Paris Série II b*, 326 :899–904, 1998.
- [3] V. Blanc. *Modélisation du comportement thermomécanique des combustibles à particules par une approche multi-échelle*. PhD thesis, Université de Provence, 2009.
- [4] V. Blanc, L. Barbié, R. Largeton, and R. Masson. Homogenization of linear viscoelastic three phase media : Internal variable formulation versus full-field computation. *Procedia Engineering*, 10 :1889–1894, 2011.
- [5] F. Feyel. Multiscale FE<sup>2</sup> elastoviscoplastic analysis of composite structures. *Computational Materials Science*, 16(1–4) :344 – 354, 1999.
- [6] F. Feyel. A multilevel finite element method (FE<sup>2</sup>) to describe the response of highly non-linear structures using generalized continua. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192(28–30) :3233–3244, 2003.
- [7] R. Largeton. *Modélisation du comportement effectif du combustible MOX en service : analyse micromécanique en champs de transformation non uniformes*. PhD thesis, Université de Provence, 2012.
- [8] 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 :76–100, 2014.
- [9] B. Michel, C. Nonon, J. Sercombe, F. Michel, and V. Marelle. Simulation of pellet-cladding interaction with the PLEIADES fuel performance software environment. *Nuclear Technology*, 182, 2013.
- [10] I. Ramière and T. Helfer. Iterative residual-based vector methods to accelerate fixed point iterations. *Computers & Mathematics with Applications*, 70(9) :2210 – 2226, 2015.
- [11] 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 Structure*, 46 :1599–1606, 2009.