DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE

CADARACHE

Loi de comportement micro-macro pour les combustibles oxydes mixtes Uranium - Plutonium

R. Masson (1), B. Seck (1,2)

(1) CEA, DEN, Fuel Studies Department

(2) Aix-Marseille-Université, LMA-CNRS

CLUB U MFRONT, 20 mai 2016

www.cea.fr

PLAN DE L'EXPOSE

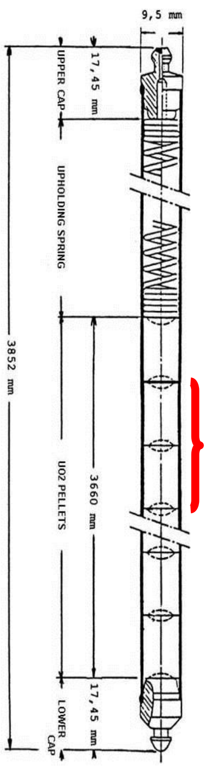
I. Problématique, les combustibles MOX

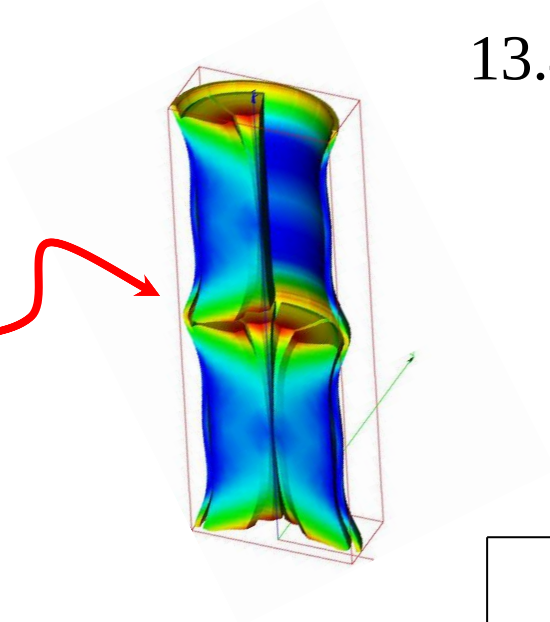
II. Un peu d'homogénéisation

III. Loi de comportement micro-macro pour le MOX

IV. Intégration MFRONT

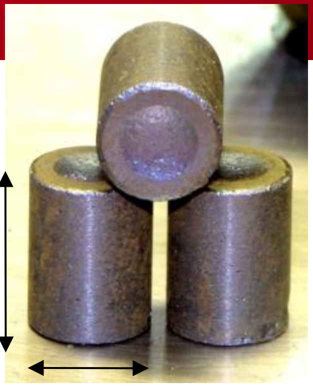
PROBLÉMATIQUE, LES COMBUSTIBLES MOX





Fuel Element, 3D PLEIADES (ALCYONE)
Simulation
Of pellet-cladding interactions

13.46 mm

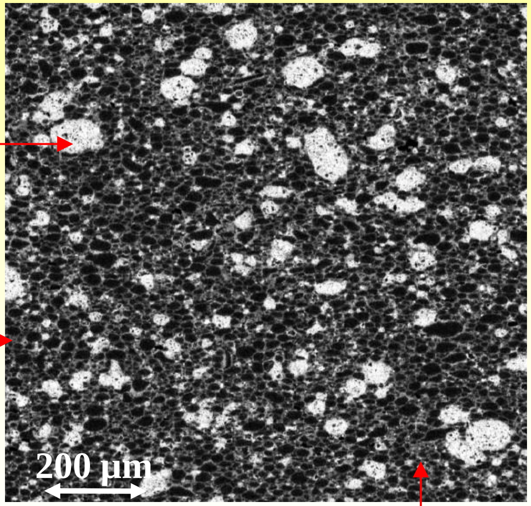


8.192 mm

MOX ADU : une distribution hétérogène en Pu

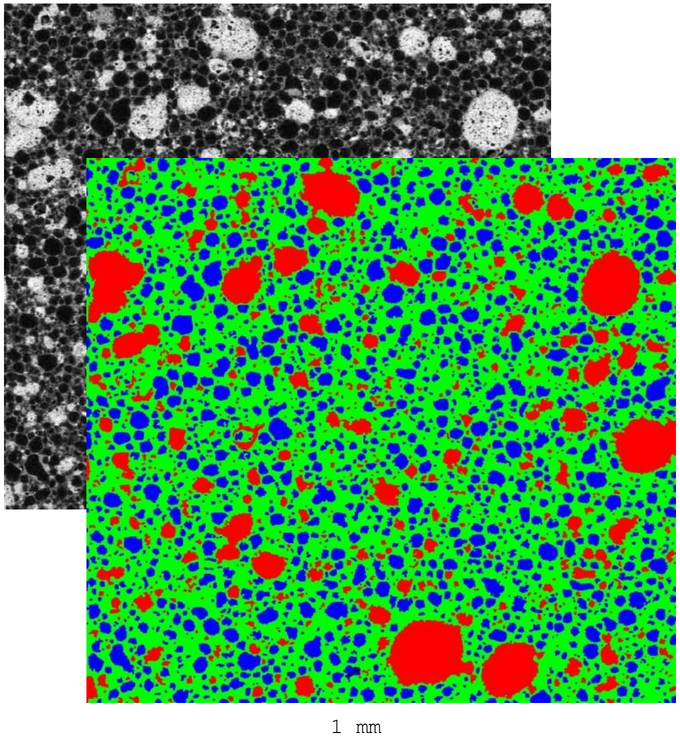
Amas plutonifère

Amas uranifère



Enrobage

PROBLÉMATIQUE, LES COMBUSTIBLES MOX



$$\underline{\underline{\dot{e}}}(x,t) = \frac{1}{2\mu^e}\underline{\underline{\dot{s}}}(x,t)$$

$$\dot{\varepsilon}_m(x,t) = \frac{1}{3k^e}\dot{\sigma}_m(x,t)$$

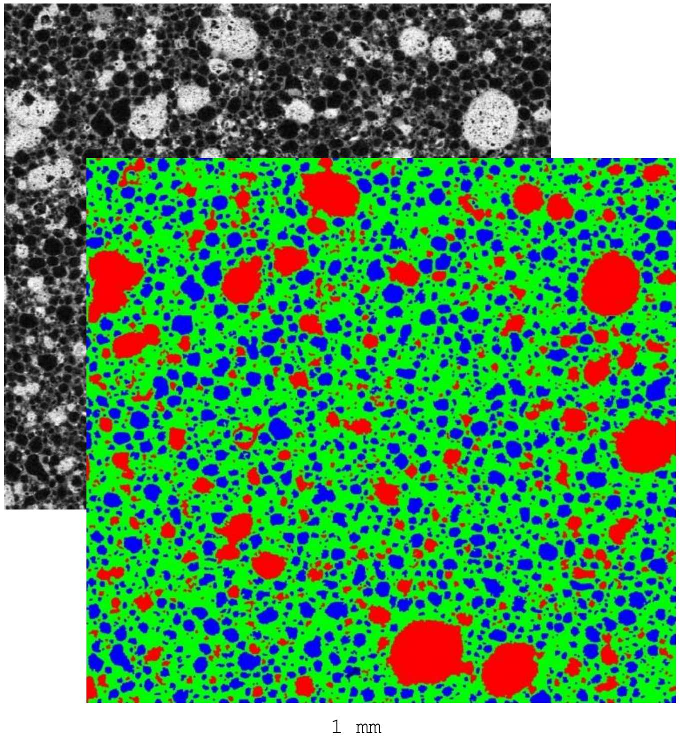
Matériau hétérogène :

- Morphologie :
  3 phases distribuées aléatoirement
  Une phase continue (matrice)

Type : **matrice – inclusions (70/30)**

- Comportement des phases :
  Élasticité homogène

PROBLÉMATIQUE, LES COMBUSTIBLES MOX



$$\underline{\underline{\dot{e}}}(x,t)=\frac{1}{2\mu^{e}}\,\underline{\underline{\dot{s}}}(x,t)+\frac{1}{2\mu_i^{v}}\,\underline{\underline{s}}(x,t)$$

$$\dot{\varepsilon}_m(x,t)=\frac{1}{3k^{e}}\,\dot{\sigma}_m(x,t)$$

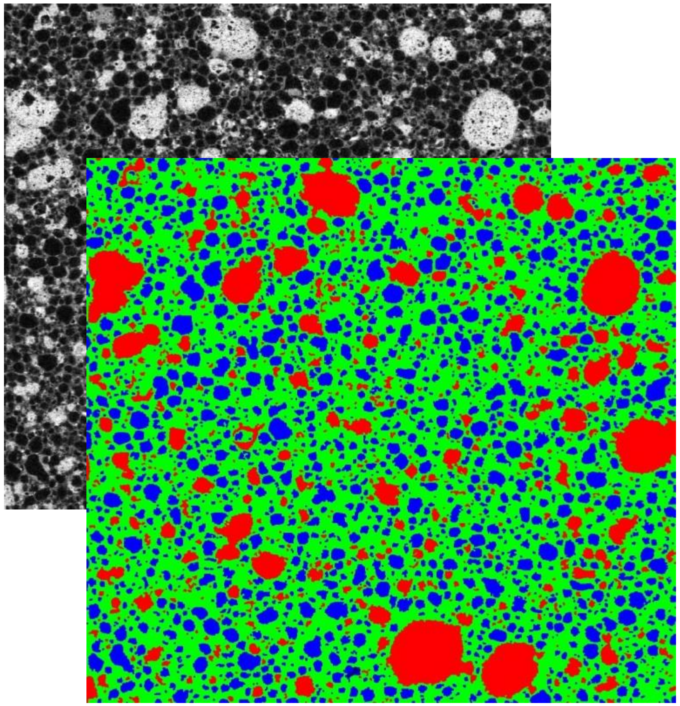
Matériau hétérogène :

- Morphologie :
  3 phases distribuées aléatoirement
  Une phase continue (matrice)

Type : **matrice – inclusions (70/30)**

- Comportement des phases :
  Élasticité homogène
  Fluage d'irradiation hétérogène

PROBLÉMATIQUE, LES COMBUSTIBLES MOX



$$\underline{\underline{\dot{e}}}(x,t) = \frac{1}{2\mu^e}\,\underline{\underline{\dot{s}}}(x,t) + \frac{1}{2\mu_i^v}\,\underline{\underline{s}}(x,t)$$

$$\dot{\varepsilon}_m(x,t) = \frac{1}{3k^e}\,\dot{\sigma}_m(x,t) + \dot{\varepsilon}^{g}_{m(i)}(x,t)$$

Matériau hétérogène :

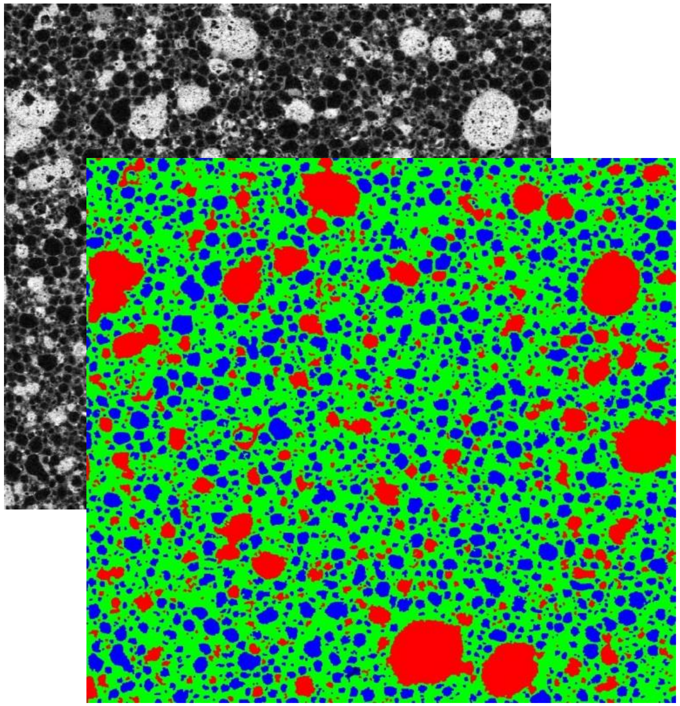
- Morphologie :
  3 phases distribuées aléatoirement
  Une phase continue (matrice)

Type : **matrice – inclusions (70/30)**

- Comportement des phases :
  Élasticité homogène
  Fluage d'irradiation hétérogène
  Gonflement induit par l'irradiation hétérogène

DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE

PROBLÉMATIQUE, LES COMBUSTIBLES MOX



1 mm

$$\underline{\underline{\dot{e}}}(x,t) = \frac{1}{2\mu^e}\,\underline{\underline{\dot{s}}}(x,t) + \frac{1}{2\mu_i^v}\,\underline{\underline{s}}(x,t)$$

$$\dot{\varepsilon}_m(x,t) = \frac{1}{3k^e}\,\dot{\sigma}_m(x,t) + \dot{\varepsilon}^{g}_{m(i)}(x,t)$$

Matériau hétérogène :

- Morphologie :
  3 phases distribuées aléatoirement
  Une phase continue (matrice)

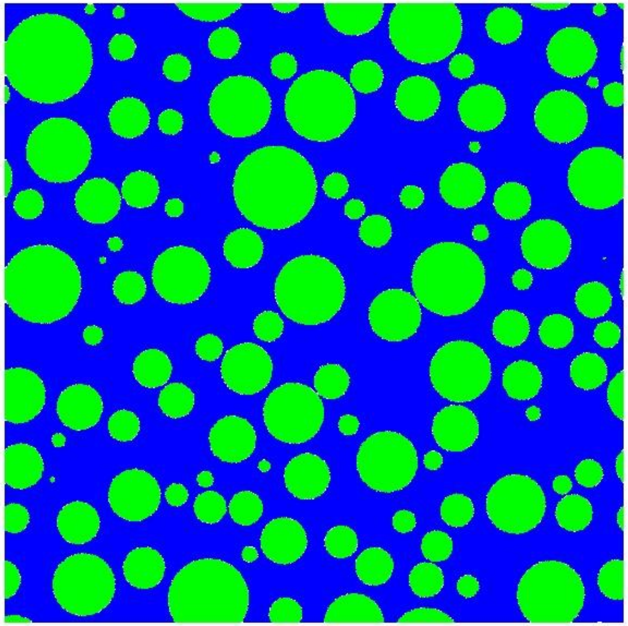
Type : **matrice – inclusions (70/30)**

- Comportement des phases :
  Élasticité homogène
  Fluage d'irradiation hétérogène
  Gonflement induit par l'irradiation hétérogène
  Propriétés dépendent du temps (température, taux de fission, …)

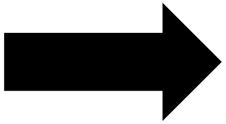
Nature : **thermo-viscoélastique linéaire vieillissant**

Un peu d’homogénéisation (…)

Homogénéisation en élasticité linéaire

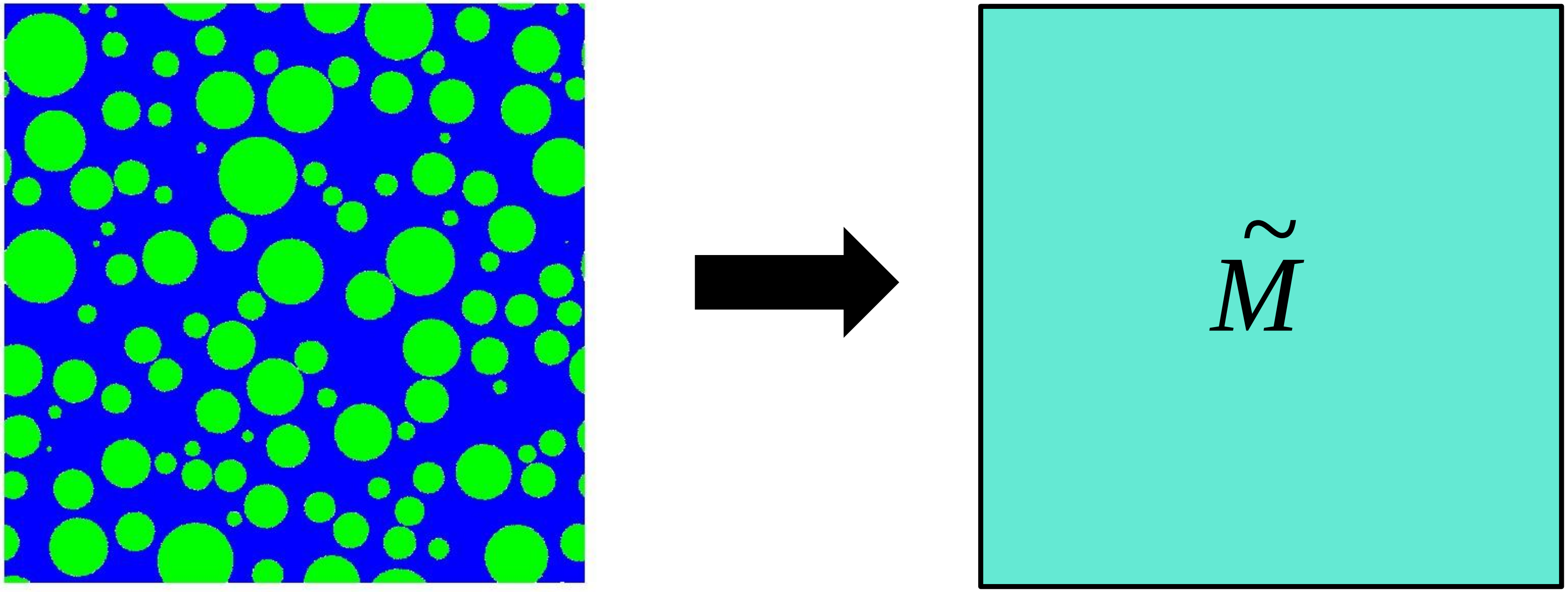


M_1 M_2

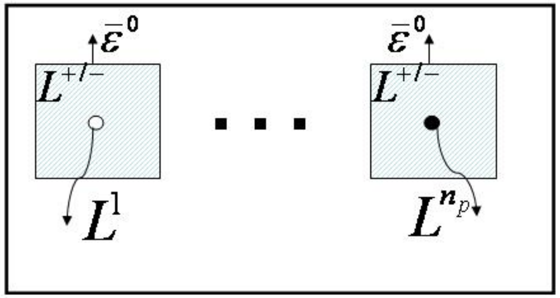


$\tilde{M}$????

Homogénéisation en élasticité linéaire



M_1 M_2



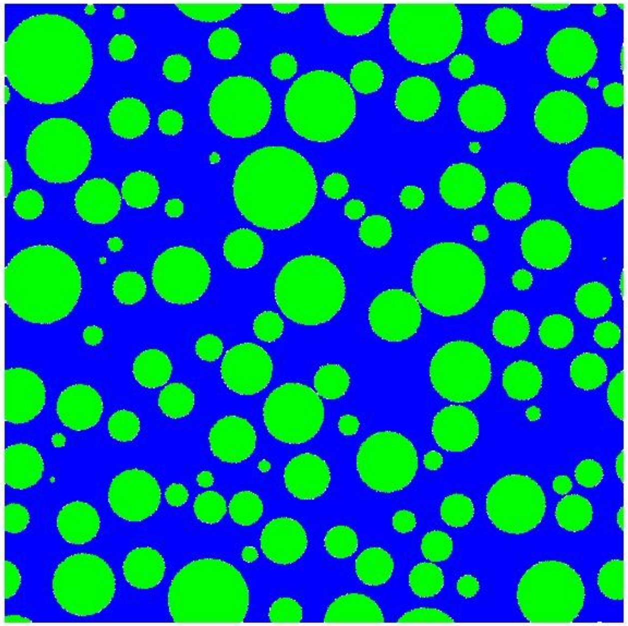
Bornes de Hashin-Shtrikman

<u>Modèle (Mori-Tanaka, 1973)</u>

- Fraction volumique d'inclusions inférieure à 20-30%
- Distribution isotrope des inclusions dans la matrice

… équivalent borne Hashin et Shtrikman (1963)

Homogénéisation en viscoélasticité linéaire



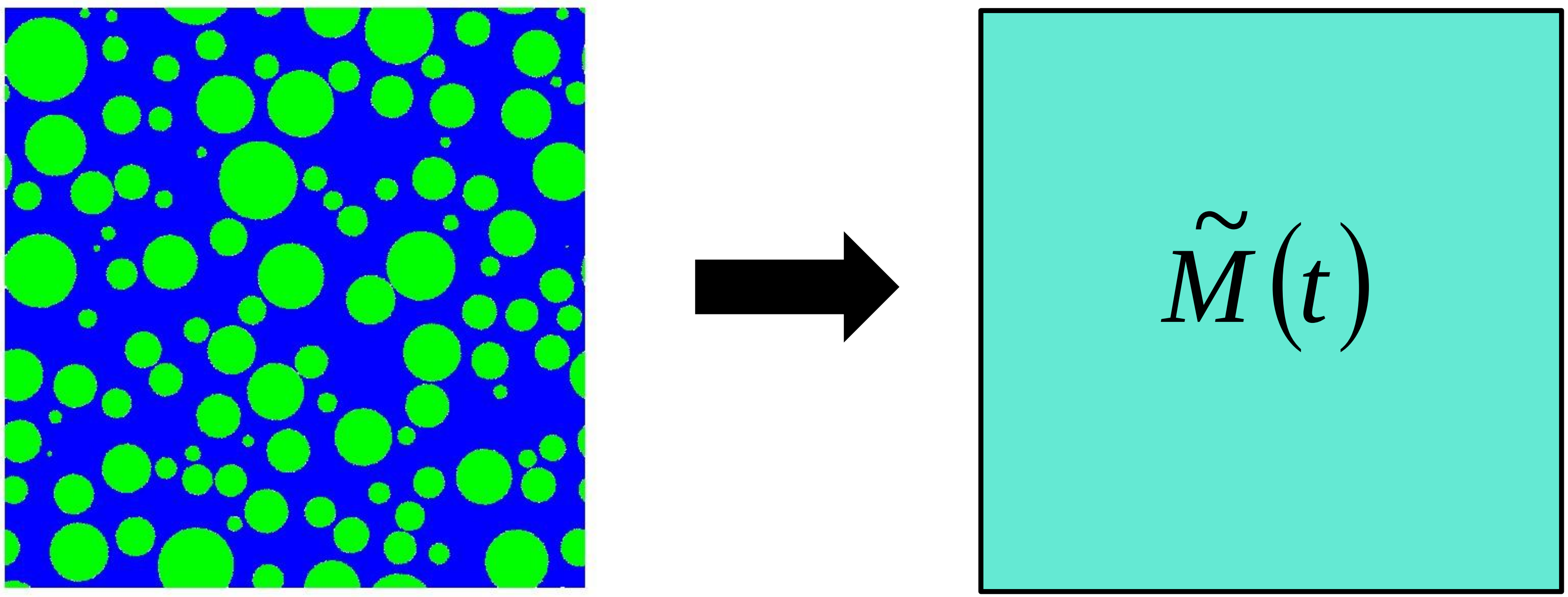
$\tilde{M}(t)$????

$M_1(t)$ $M_2(t)$

Exemple (Maxwell) :

$$M_i(t) = M_i^e + M_i^v \, t$$

Homogénéisation en viscoélasticité linéaire



$M_1(t)$ $M_2(t)$

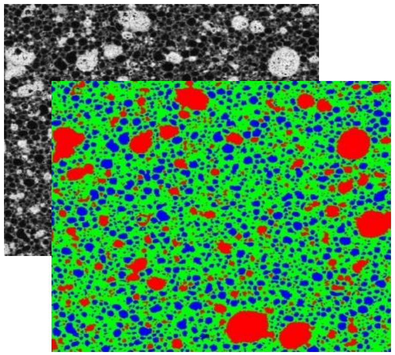
<u>Théorème de correspondance (Mandel, 1966)</u>
Transformée de Laplace
-> Milieu pseudo élastique

Homogénéisation en linéaire
-> Exemple : Mori-Tanaka (Wang et weng, 1992)

Représentation par variables internes (Ricaud et Masson, 2009)
-> Comportements vieillissants

(…) une loi de comportement micro-macro

Loi de comportement micro-macro pour les MOX



Composite particulaire isotrope (3 phases) :

$$\bar{s}(t) = 2\int_0^t \bar{\mu}(t-u)\dot{\bar{e}}(u)\,du$$

Fonction de relaxation – Prony :

- Comportement Maxwell
- Estimation de Mori-Tanaka

$$\bar{\mu}^*(p) \quad \text{rational function of (p)} \quad \rightarrow \quad \bar{\mu}(t) = \sum_{i=1}^{6} \mu_{\tau_i^d}\, e^{-\frac{t}{\tau_i^d}}$$

Equivalence (exacte) formulation à VI :

$$\bar{s}(t) = 2\mu^e\left(\bar{e}(t) - \sum^{6} \alpha^d_{\tau_i^d}(t)\right)$$

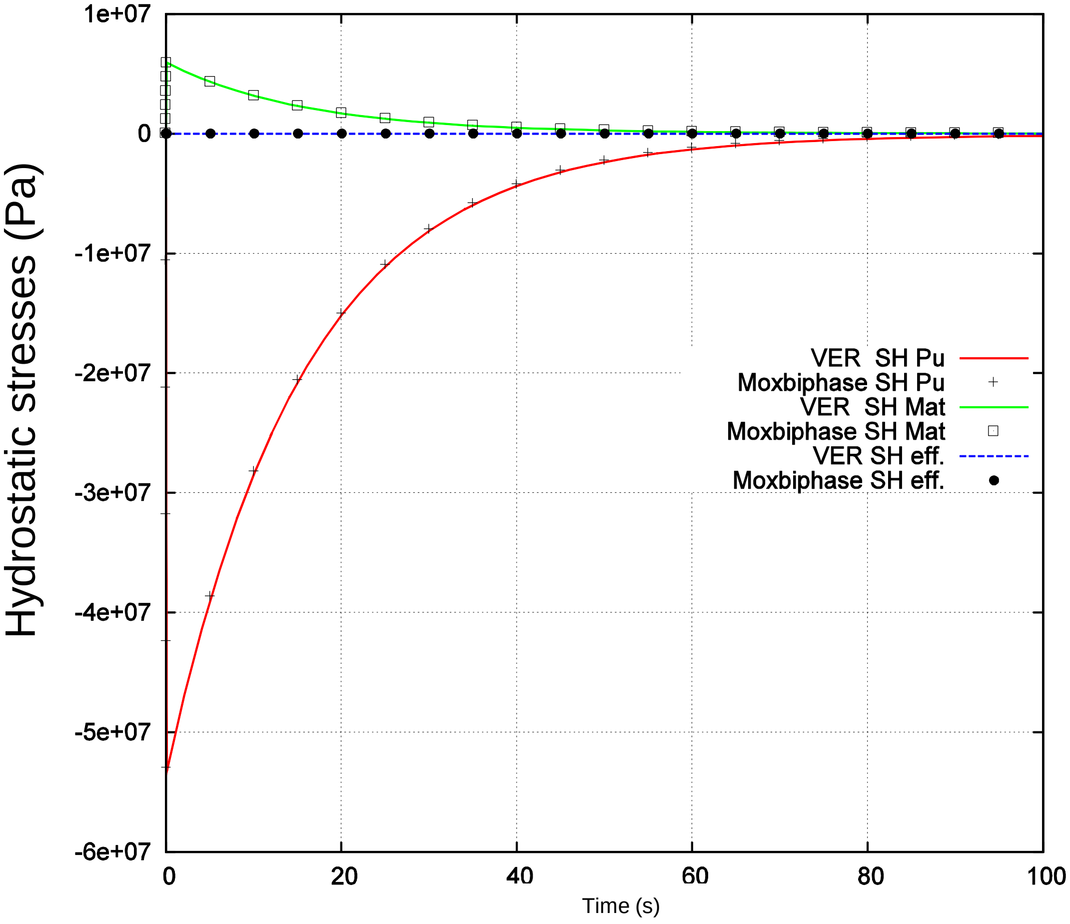
$$\dot{\alpha}(t) + \frac{1}{\tau_i^d}\alpha(t) = \frac{1}{\tau_i^d}\frac{\mu_{\tau_i^d}}{\mu^e}\bar{e}(t) \quad 1 \le i \le 6$$

Blanc et al. Proc. Engineering, 2011

Loi de comportement micro-macro pour les MOX, comparaisons calculs en champ complets

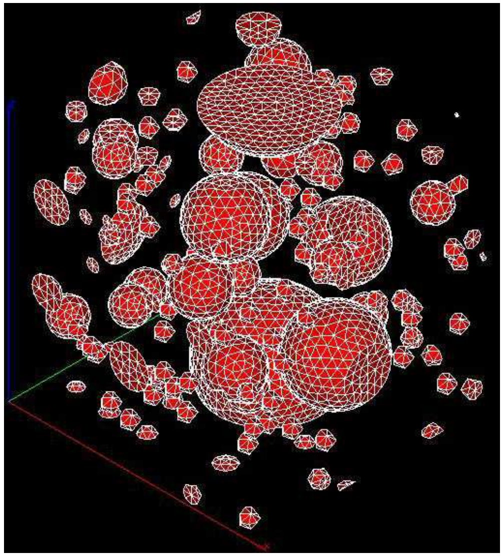
Free swelling of a RVE

- Two-phases composite,
- 15% inclusions (uniform swelling)



Full field calculations :

- 120 inclusions poly-dispersed (10-70 μm) ;
- FE (CAST3M)/FFT



Thèse R. Largenton, 2012
Application VER-PLEIADES

Loi de comportement micro-macro pour les MOX

Extension aux situations transitoires

Fluage « thermique » prépondérant

$$\dot{\underline{\underline{e}}}(x,t) = \frac{1}{2\mu^e}\dot{\underline{\underline{s}}}(x,t) + \frac{1}{2\mu_i^v}\underline{\underline{s}}(x,t) + \dot{e}_0(T)\left[\sigma_{eq}(x,t)\right]^{2,67}\underline{\underline{s}}(x,t)$$

$$\approx \frac{1}{2\mu^e}\dot{\underline{\underline{s}}}(x,t) + \frac{1}{2\mu_i^v}\underline{\underline{s}}(x,t) + \frac{1}{2\mu_i^{th}\left(\sigma_{S(i)}\right)}\underline{\underline{s}}(x,t)$$

Contraintes de référence par phase ?

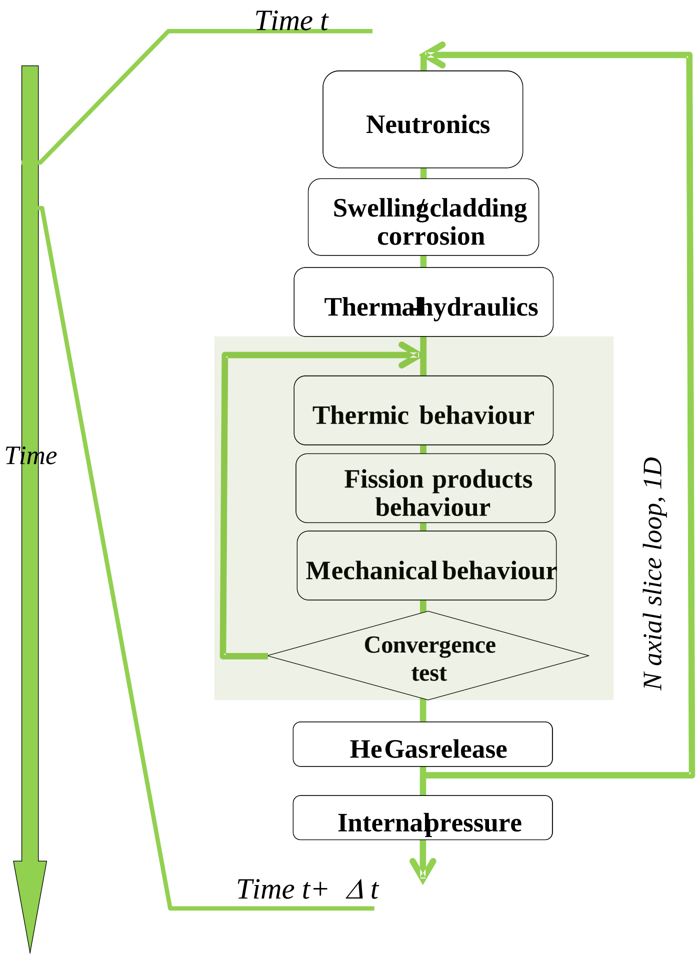
$$\sigma_{S(incl)}(t) = \sqrt{\frac{3}{2}\left\langle s_{ij}(t)\right\rangle_I \left\langle s_{ij}(t)\right\rangle_I} \qquad \sigma_{S(matrix)}(t) = \sqrt{\frac{3}{2}\left\langle s_{ij}(t)\, s_{ij}(t)\right\rangle_m}$$

Loi de comportement micro-macro pour les MOX

Intégration code crayon - couplages

- Modèles de comportement des gaz de fission (boucle multi-physique)

- Fissuration (1,5D)



INTÉGRATION MFRONT

Méthode implicite

- Vecteur inconnu de dimension 12 (représentation 3-phases) :

$$\left\{ \Delta \underline{\underline{\varepsilon}}^{el}, \Delta \varepsilon_i^{fis}, \Delta e_I = \frac{1}{\mu^e} \sigma_{S(I)} \right\}$$

Dans MFRONT (parser = implicit)

- Une douzaine de propriétés matériaux (MaterialProperty)
- 7 chargements : T, gonflements et densités de fission par phase (ExternalSateVariable)
- Près de 100 scalaires en sortie

Les 12 inconnues (StateVariable)

Des variables auxiliaires (les contraintes moyennes par phase, …) – AuxiliaryStateVariable

Loi intégrée dans ALCYONE

- Ancien format (UMAT-CAST3M) depuis 2009
- Format MFRONT depuis janvier 2016
- Trois échelles simulées : crayon, pastilles et phases

CONCLUSIONS – UTILISATION MFRONT

De façon générale

- Enfin, un outil OpenSource de mutualisation des lois de comportement entre codes de simulation en mécanique

- Application immédiate autour des codes combustibles (approche multi-échelle)

… attention aux dangers du plug and play

Dans le détail, j'ai apprécié

- La prise en main rapide de l'outil, sa robustesse
- La représentation « objet » des différentes variables, les vecteurs de variables internes (lisibilité du code)
- L'include de sources c/c++ (Homogénéisation)
- Test intégré des composantes (144!!) du Jacobien analytique / numérique (--@CompareToNumericalJacobian=true)

- MTEST : simplicité, mutualisation des tests possibles, …
- MTEST : l'option –UMATGenerateMTestFileOnFailure=true

PERSPECTIVES – UTILISATION MFRONT

Suggestions

- MFRONT : une mutualisation de la fissuration (application combustibles)
- MFRONT : Un Jacobien numérique par blocs
- MTEST / Test<file> : comparaison à des valeurs de référence s’appuyant sur des instants différents

MERCI À

CEA – DEN Fuel Department Study

- Modeling, Full Fields calculations: JM Ricaud, V. Blanc, L. Barbie, E. Castelier
- Software Integration (PLEIADES/MFRONT): B. Michel, T. Helfer, V. Marelle, I. Ramière, P. Goldbronn
- Validation: A. Boulore, L. Noirot

EDF R&D

- Modelling and Full Field Calculations: R. Largenton

LMA – CNRS / AMU

- Modeling, second-order moments computation: N. Lahellec, P. Suquet, JC Michel
- Jacobian calculation (B. Seck)

Institut d'Alembert (UPMC), PIMM (ENSAM)

- Modeling polycristalline microstructures: R. Brenner, O. Castelnau

Financial support

- OXYDES and PLEIADES Projects (EDF-AREVA-CEA)