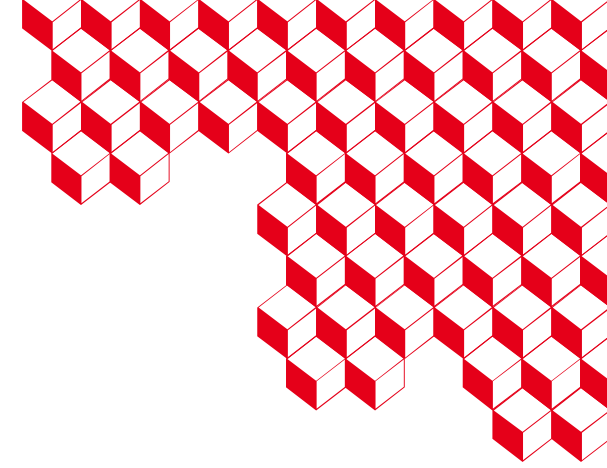




Mécanique des structures à l'échelle du matériau, exemple des éléments combustibles nucléaires

18h20 – 19h, le 30 janvier 2025

R. Masson, V. D'Ambrosi, J. Fauque, L. Portelette

CEA/DES/IRESNE/DEC/SESC, Centre de Cadarache

Colloque MECAMAT "Homogénéisation du comportement mécanique des matériaux hétérogènes", 27-31 janvier 2025

Sommaire

- Simulation multi-physique de l'élément combustible REP (PLEIADES)
- Les combustibles E-ATF, voie des additifs métalliques ... homogénéisation appliquée
- Loi à variables internes pour les CERMET(s) micro-cellulaires
- Simulation thermomécanique d'un « crayon REP du futur » grâce à l'homogénéisation
- Conclusions - perspectives

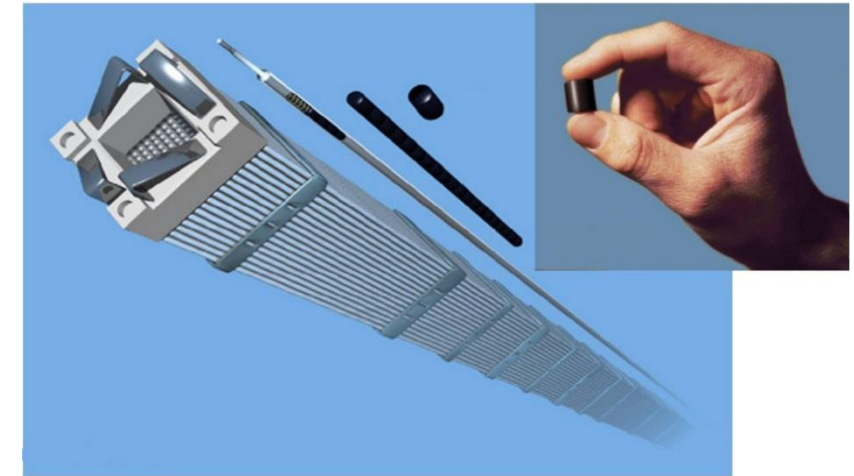
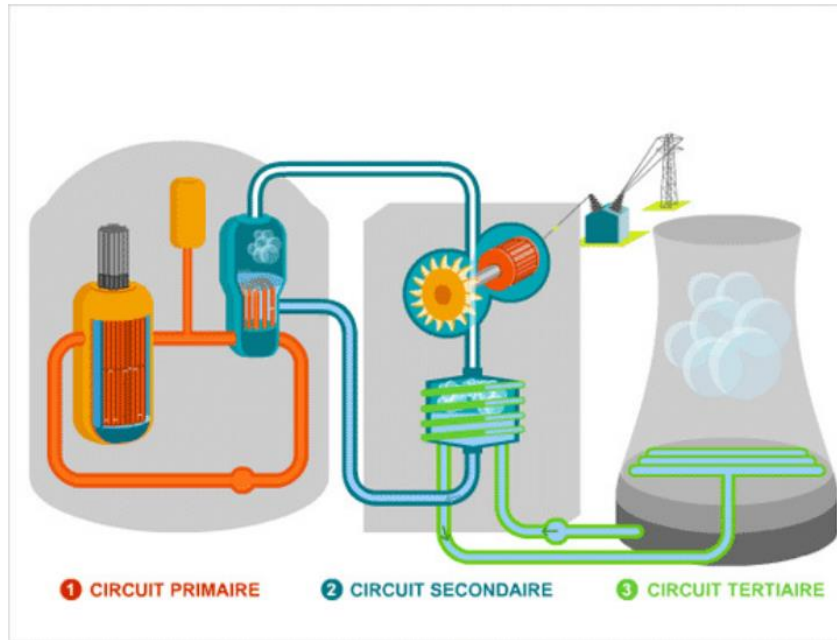
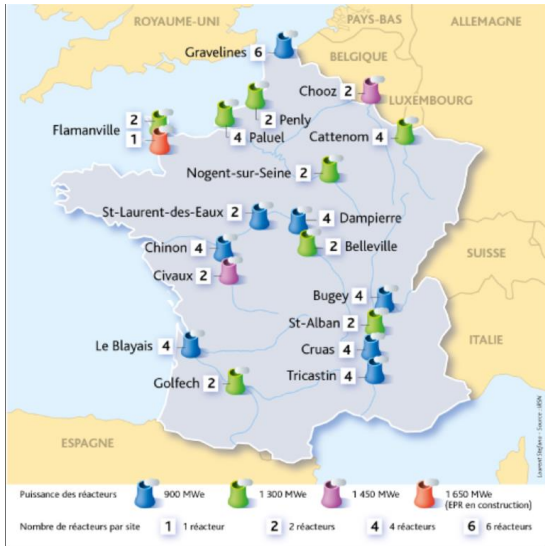


Sommaire

- **Simulation multi-physique de l'élément combustible REP (PLEIADES)**
- Les combustibles E-ATF, voie des additifs métalliques ... homogénéisation appliquée
- Loi à variables internes pour les CERMET(s) micro-cellulaires
- Simulation thermomécanique d'un « crayon REP du futur » grâce à l'homogénéisation
- Conclusions - perspectives



De la chaudière ... au pastilles combustibles

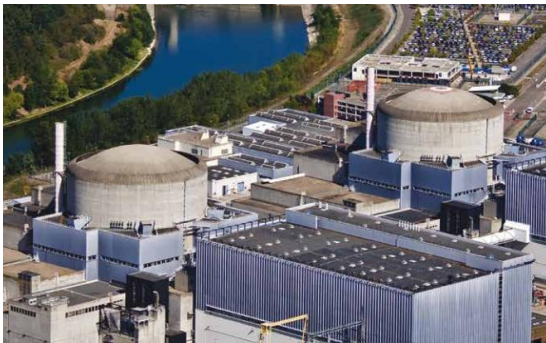


Les pastilles combustibles :

Une pastille combustible ~7g
Céramique UO_2 , obtenue par frittage

Autant d'énergie qu'une tonne de charbon
Par fission Isotope 235 de l'Uranium

Exemple :



REP GEN2 1300 :

193 assemblages combustibles

264 crayons / assemblage

~ 100 tonnes de combustible

Le crayon REP

Comportement sous irradiation des pastilles combustibles (regime nominal)

Effet de la temperature

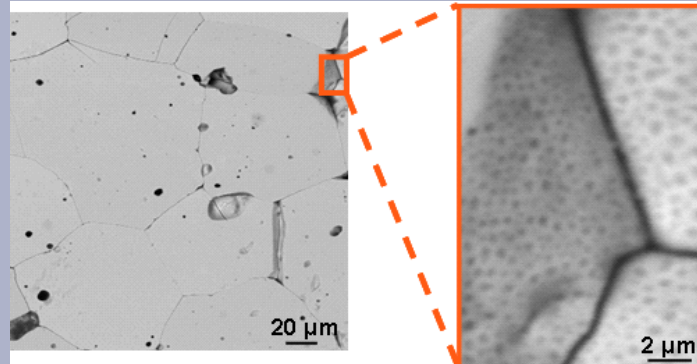
- ⇒ contraintes “thermiques”
- ⇒ Fragmentation radiale & axiale



Effet de l'irradiation

- ⇒ Fluage induit par l'irradiation
- ⇒ Densification / Gonflement

$$\epsilon = \epsilon^e + \epsilon^{th} + \epsilon^v + \epsilon^g$$



Et la gaine : fluage et croissance axiale



Le crayon REP

Comportement sous irradiation des pastilles combustibles (regime nominal)

Effet de la temperature

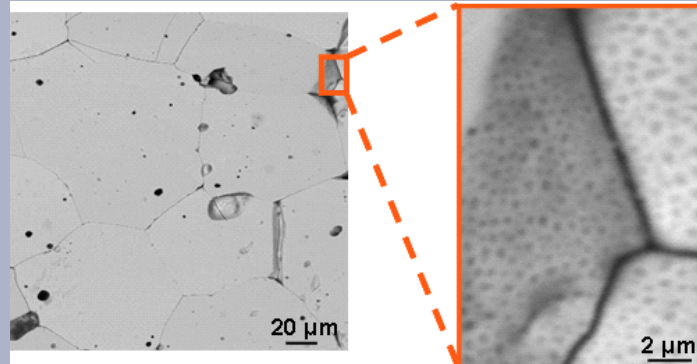
- ⇒ contraintes “thermiques”
- ⇒ Fragmentation radiale & axiale



Effet de l'irradiation

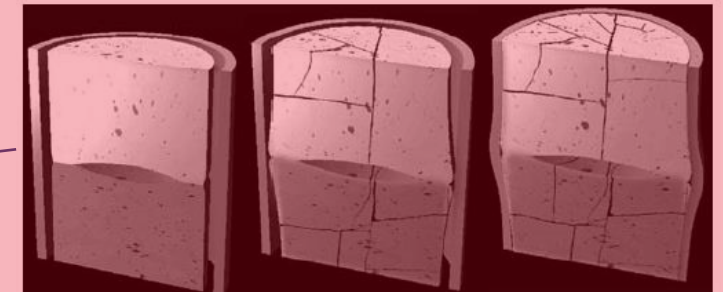
- ⇒ Fluage induit par l'irradiation
- ⇒ Densification / Gonflement

$$\epsilon = \epsilon^e + \epsilon^{th} + \epsilon^v + \epsilon^g$$



Et la gaine : fluage et croissance axiale

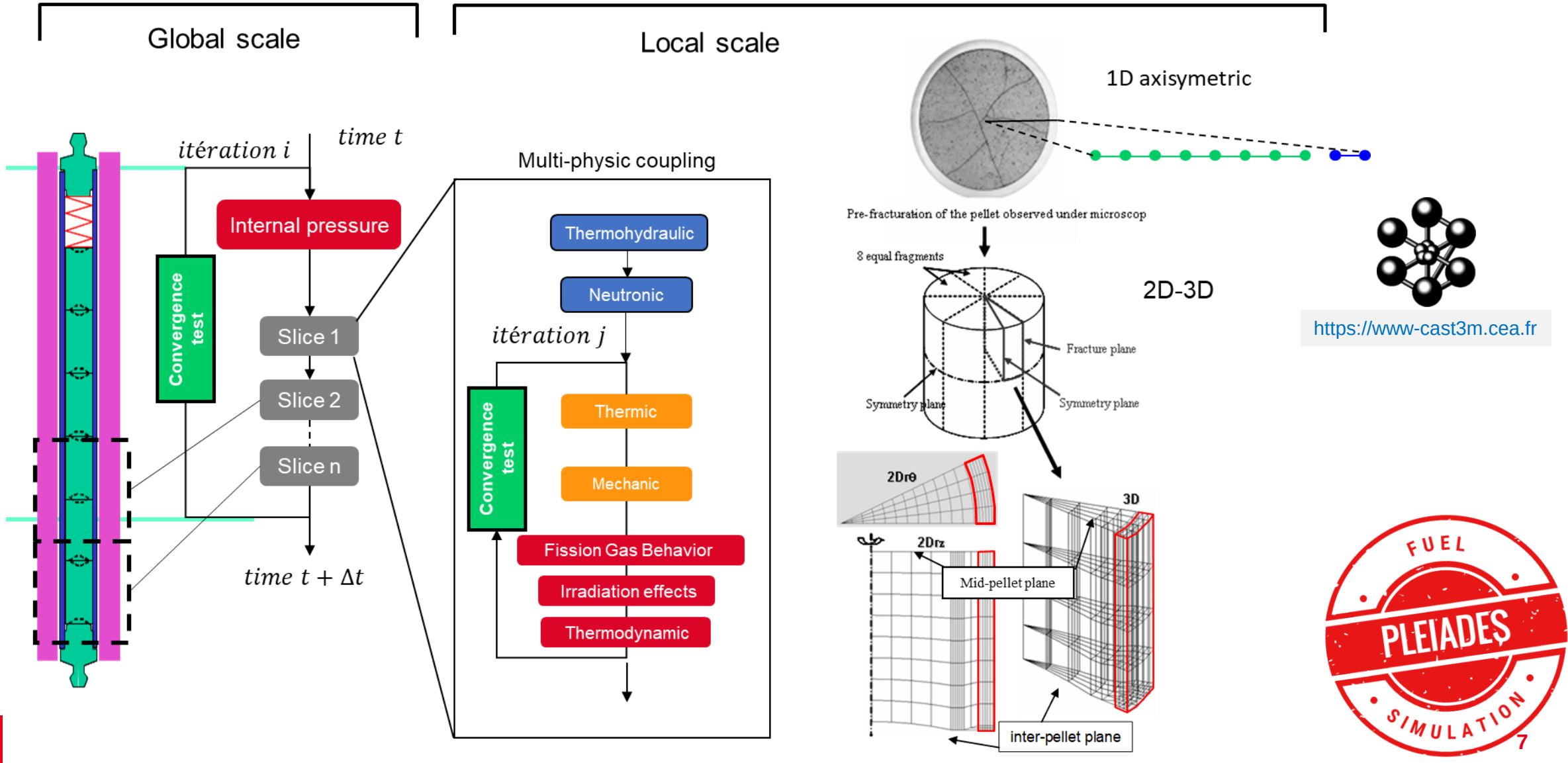
Évolution jeu P-G



=> Interaction P-G

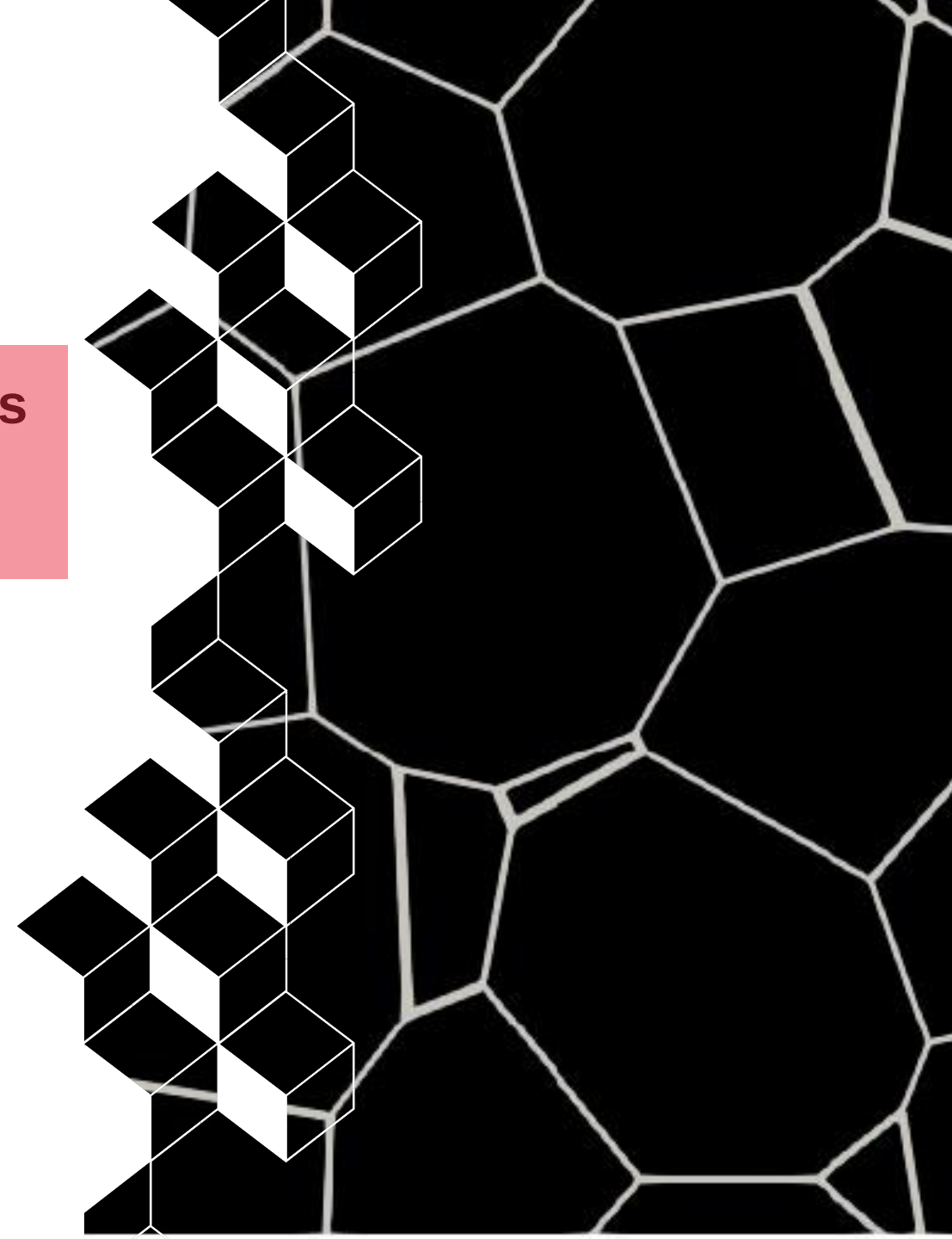
Problème mécanique non linéaire et multi-physique

Introïni, C. (2024). ALCYONE: the fuel performance code of the PLEIADES platform dedicated to PWR fuel rods behavior. *Annals of Nuclear Energy*, 207, 110711.



Sommaire

- Simulation multi-physique de l'élément combustible REP (PLEIADES)
- Les combustibles E-ATF, voie des additifs métalliques ... homogénéisation appliquée
- Loi à variables internes pour les CERMET(s) micro-cellulaires
- Simulation thermomécanique d'un « crayon REP du futur » grâce à l'homogénéisation
- Conclusions - perspectives



Combustibles céramiques – métal : ajout de métal à l'échelle microscopique

- ❑ Objectif: améliorer la **conductivité thermique** de la céramique afin de diminuer l'enthalpie stockée avant l'accident
- ❑ Comment ? Fabriquer un composite en mélangeant l'UO₂ avec la phase métallique

Étude de cas :

- Conductivité du métal ~14 fois celle de l'oxyde
- Fraction volumique de métal ~ 5%

Question: quelle est la répartition spatiale optimale de la phase métallique ?

Homogénéisation en thermique ?

Contrainte

=> Densité de flux de chaleur

Déformation

=> Intensité :

$$e = -\nabla T$$

$$\sigma = l e$$

Modules élastiques

=> Conductivité thermique (loi de Fick)

Batchelor, Ann. Rev. Fluid Mech., 1974

Torquato, S., & Haslach Jr, H. W. Appl. Mech. Rev., 2002

Slide “La table des lois”, D. Kondo

Homogénéisation en thermique ?

❑ Table de correspondance entre les noms des différents modèles établis en élasticité linéaire versus « conduction » :

Bornes Classiques (Voigt / Reuss) => **Bornes de Wiener**

Bornes Hashin-Shtrikman => **modèle de Maxwell**

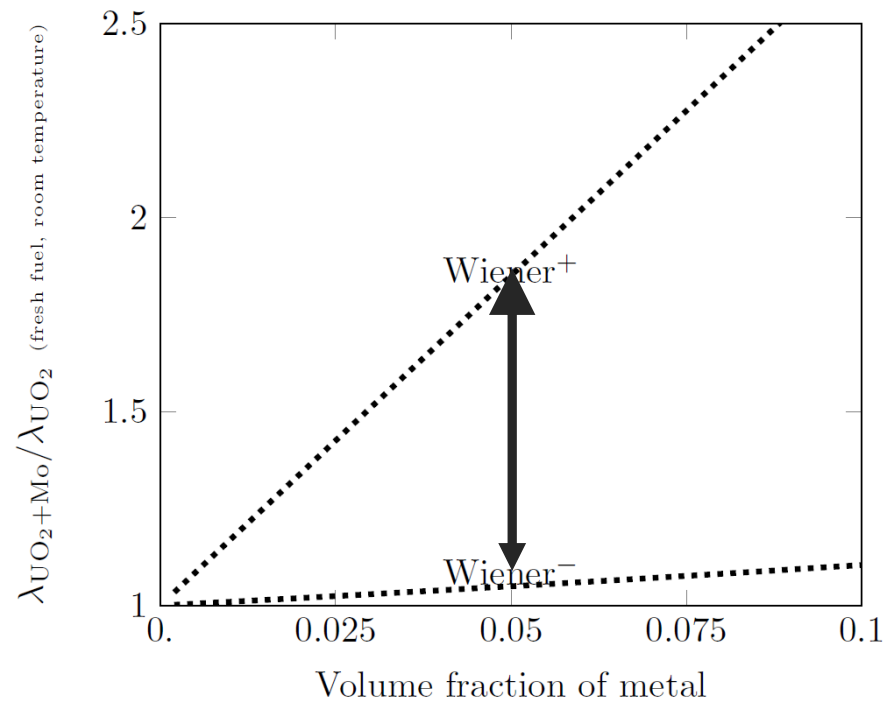
Bornes de Ponte-Castaneda et Willis (JMPS, 1995) => **Duan et al., Physical Review B, 2006**

Modèle auto-cohérent => **Bruggeman (1935)**

Homogénéisation appliquée

- ❑ Objectif: améliorer la conductivité de la céramique afin de diminuer l'enthalpie stockée avant l'accident
- ❑ Comment ? Fabriquer un composite en mélangeant l'UO₂ avec la phase métallique
- ❑ Cas d'un comportement effectif anisotrope : **bornes de Wiener (1912)**

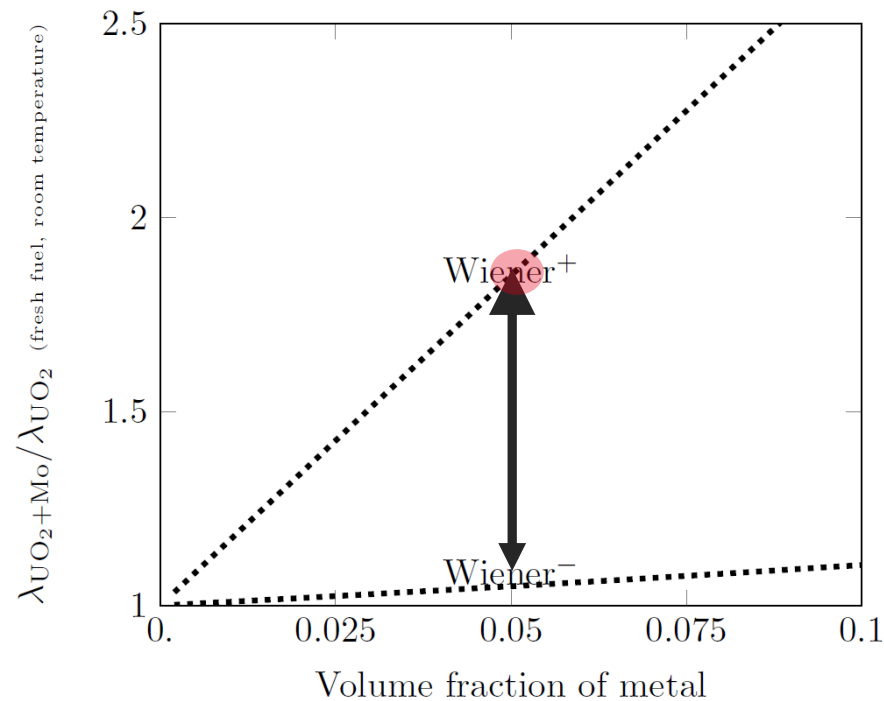
Vol.frac ~5% => gain max ~1.85



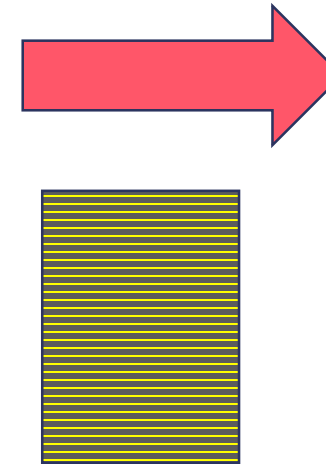
Homogénéisation appliquée

- ❑ Objectif: améliorer la conductivité de la céramique afin de diminuer l'enthalpie stockée avant l'accident
- ❑ Comment ? Fabriquer un composite en mélangeant l'UO₂ avec la phase métallique
- ❑ Cas d'un comportement effectif anisotrope : **bornes de Wiener (1912)**

Vol.frac ~5% => gain max ~1.85



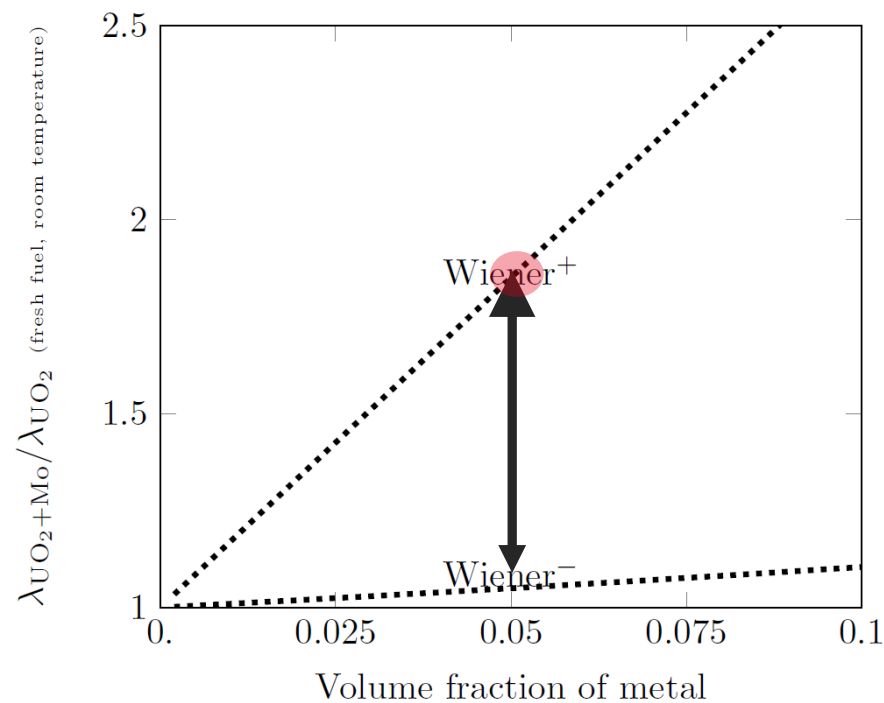
Heat flux
Radial direc.



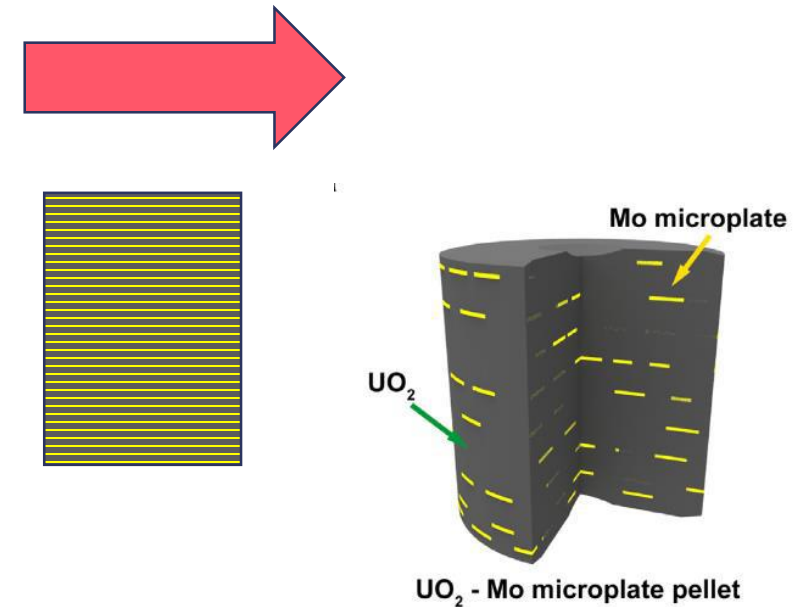
Homogénéisation appliquée

- ❑ Objectif: améliorer la conductivité de la céramique afin de diminuer l'enthalpie stockée avant l'accident
- ❑ Comment ? Fabriquer un composite en mélangeant l'UO₂ avec la phase métallique
- ❑ Cas d'un comportement effectif anisotrope : **bornes de Wiener (1912)**

Vol.frac ~5% => gain max ~1.85



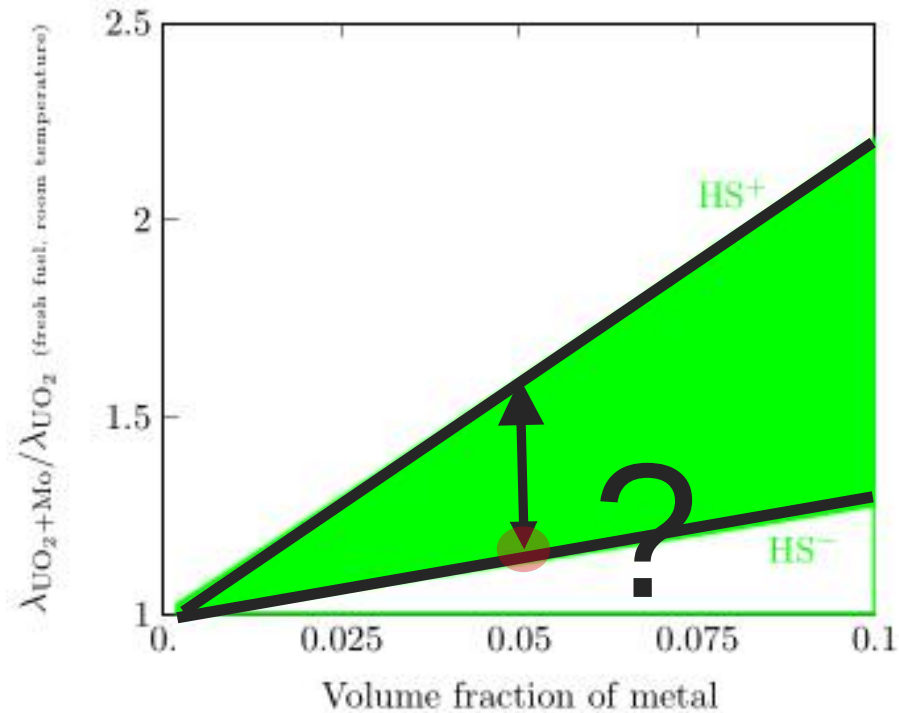
Heat flux
Radial direc.



Lee et al. *JNM*, 2021

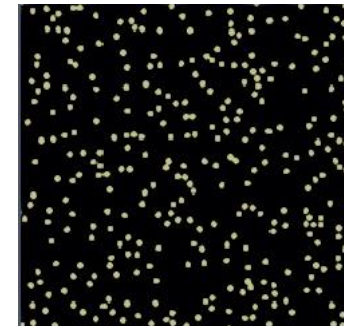
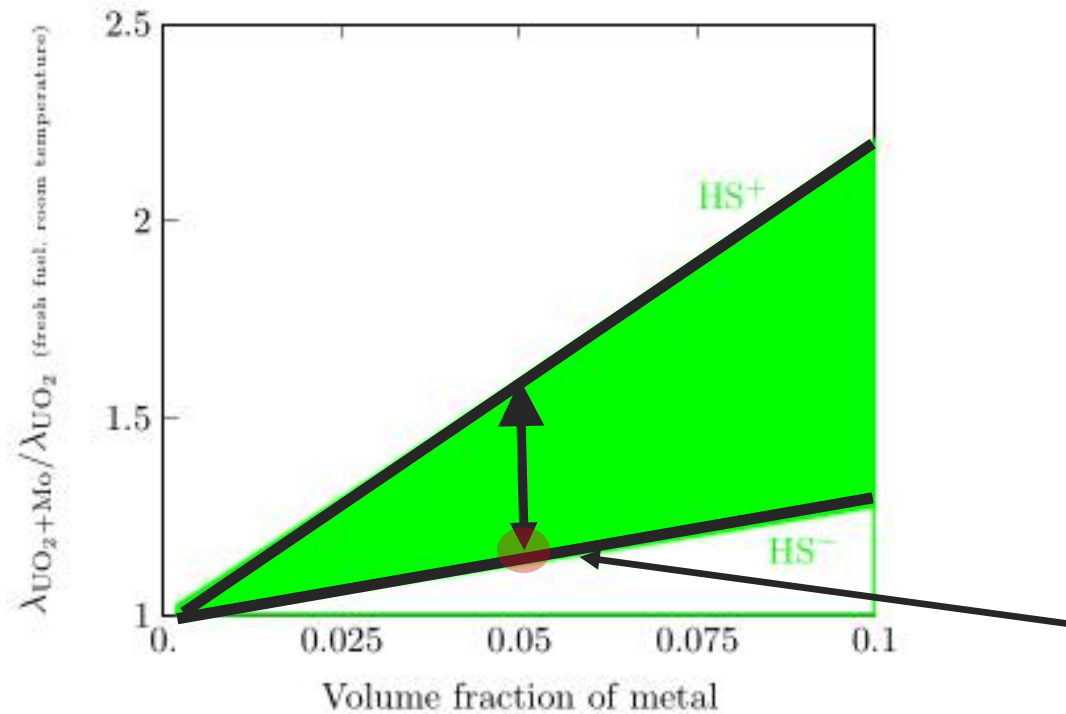
Homogénéisation appliquée

- ❑ Objectif: améliorer la conductivité de la céramique afin de diminuer l'enthalpie stockée avant l'accident
- ❑ Comment ? Fabriquer un composite en mélangeant l'UO₂ avec la phase métallique
- ❑ Cas d'un comportement effectif isotrope : bornes de Hashin-Shtrikman (1973)



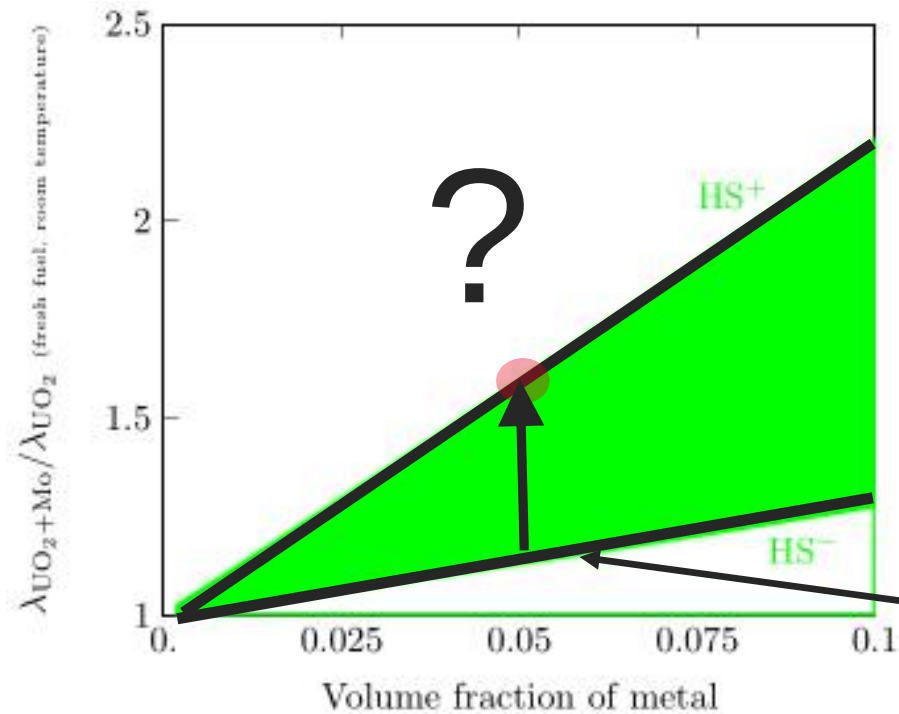
Homogénéisation appliquée

- ❑ Objectif: améliorer la conductivité de la céramique afin de diminuer l'enthalpie stockée avant l'accident
- ❑ Comment ? Fabriquer un composite en mélangeant l'UO₂ avec la phase métallique
- ❑ Cas d'un comportement effectif isotrope : bornes de Hashin-Shtrikman (1973)



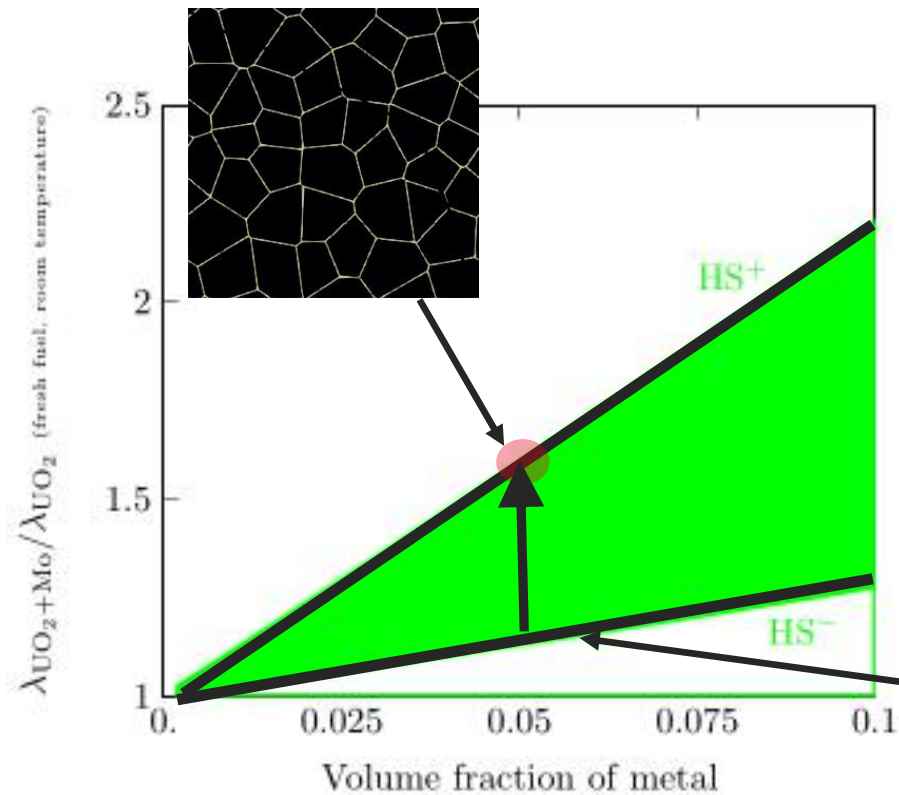
Homogénéisation appliquée

- ❑ Objectif: améliorer la conductivité de la céramique afin de diminuer l'enthalpie stockée avant l'accident
- ❑ Comment ? Fabriquer un composite en mélangeant l'UO₂ avec la phase métallique
- ❑ Cas d'un comportement effectif isotrope : bornes de Hashin-Shtrikman (1973)



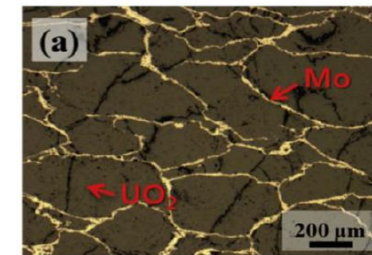
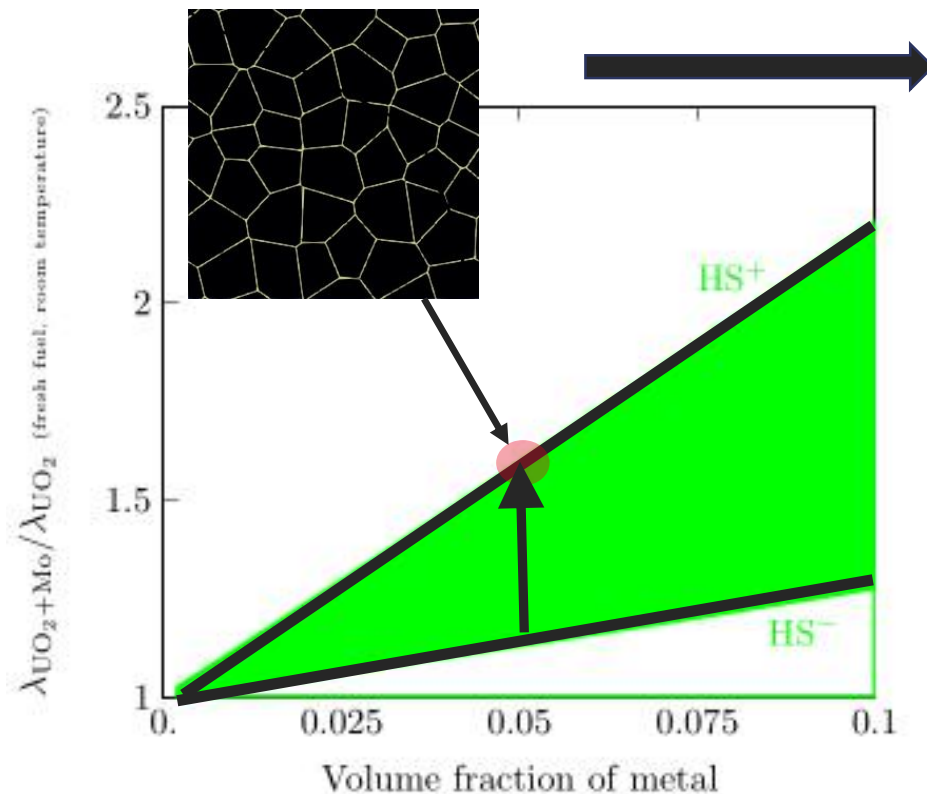
Homogénéisation appliquée

- ❑ Objectif: améliorer la conductivité de la céramique afin de diminuer l'enthalpie stockée avant l'accident
- ❑ Comment ? Fabriquer un composite en mélangeant l'UO₂ avec la phase métallique
- ❑ Cas d'un comportement effectif isotrope : bornes de Hashin-Shtrikman (1973)



Homogénéisation appliquée

- ❑ Objectif: améliorer la conductivité de la céramique afin de diminuer l'enthalpie stockée avant l'accident
- ❑ Comment ? Fabriquer un composite en mélangeant l'UO₂ avec la phase métallique
- ❑ Cas d'un comportement effectif isotrope : bornes de Hashin-Shtrikman (1973)



“Micro-cellulaire”

Kim et al. Development status of accident-tolerant fuel for light water reactors in Korea. *Nuclear Engineering and Technology*, 2016

Sommaire

- Simulation multi-physique de l'élément combustible REP (PLEIADES)
- Les combustibles E-ATF, voie des additifs métalliques ... homogénéisation appliquée
- Loi à variables internes pour les CERMET(s) micro-cellulaires
- Simulation thermomécanique d'un « crayon REP du futur » grâce à l'homogénéisation
- Conclusions - perspectives



Problématique

- ❑ Du point de vue thermique : on peut déterminer l'effet de la teneur et de la nature du métal sur les propriétés thermiques (capacité calorifique, conductivité)

Problème bien documenté (KAERI) :

Kim et al. Journal of Nuclear Materials, 462:289–295, 2015.

Yang et al. Journal of Nuclear Materials, 585:154655, 2023

Lee et al. Nuclear Engineering and Technology, 55(10):3860–3865, 2023 => ne connaissent pas PCW95 !!!



Problématique

- ❑ Du point de vue thermique : on peut déterminer l'effet de la teneur et de la nature du métal sur les propriétés thermiques (capacité calorifique, conductivité)

Problème bien documenté (KAERI) :

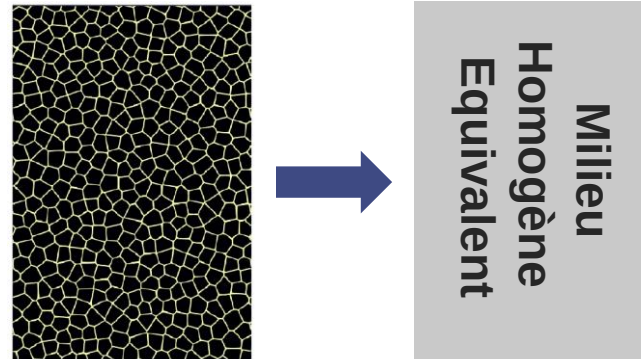
Kim et al. Journal of Nuclear Materials, 462:289–295, 2015.

Yang et al. Journal of Nuclear Materials, 585:154655, 2023

Lee et al. Nuclear Engineering and Technology, 55(10):3860–3865, 2023 => ne connaissent pas PCW95 !!!



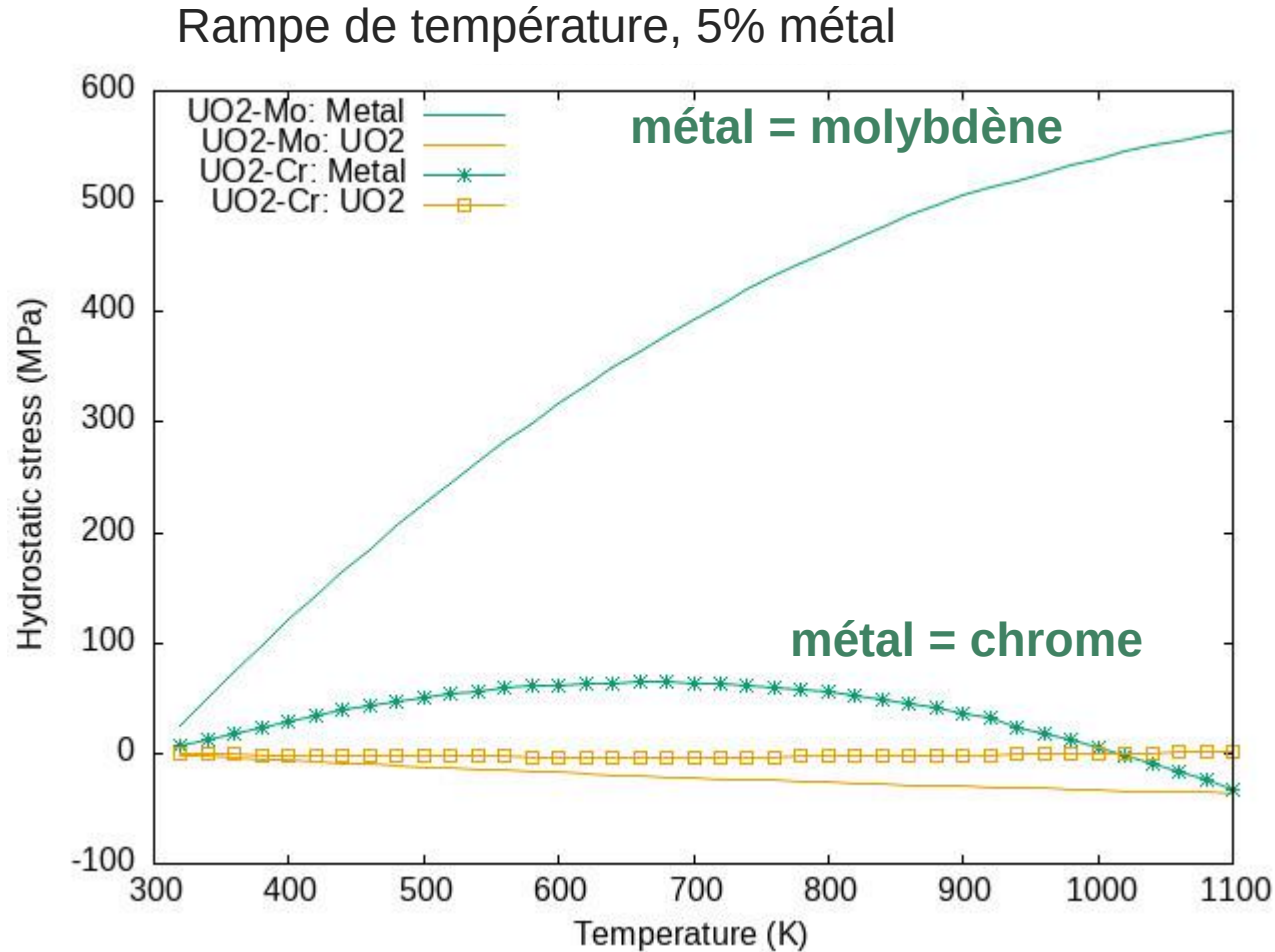
- ❑ Mais que peut-on dire – même qualitativement - du point de vue mécanique ?



- ❑ Dans ce qui suit :

- Hypothèse de séparation d'échelle
- Conductivité, modules élastiques et coefficients de dilatation thermique effectifs estimés par le modèle d'Hashin-Shtrikman (HS)

Test de dilatation – analyse thermoélastique (HS)



Chrome versus Molybdène

Dilatations thermiques (température < 1000 K):

Cr ou Mo < UO_2

⇒ **Métal en traction, oxyde en compression**

Mais écarts plus importants pour Mo :

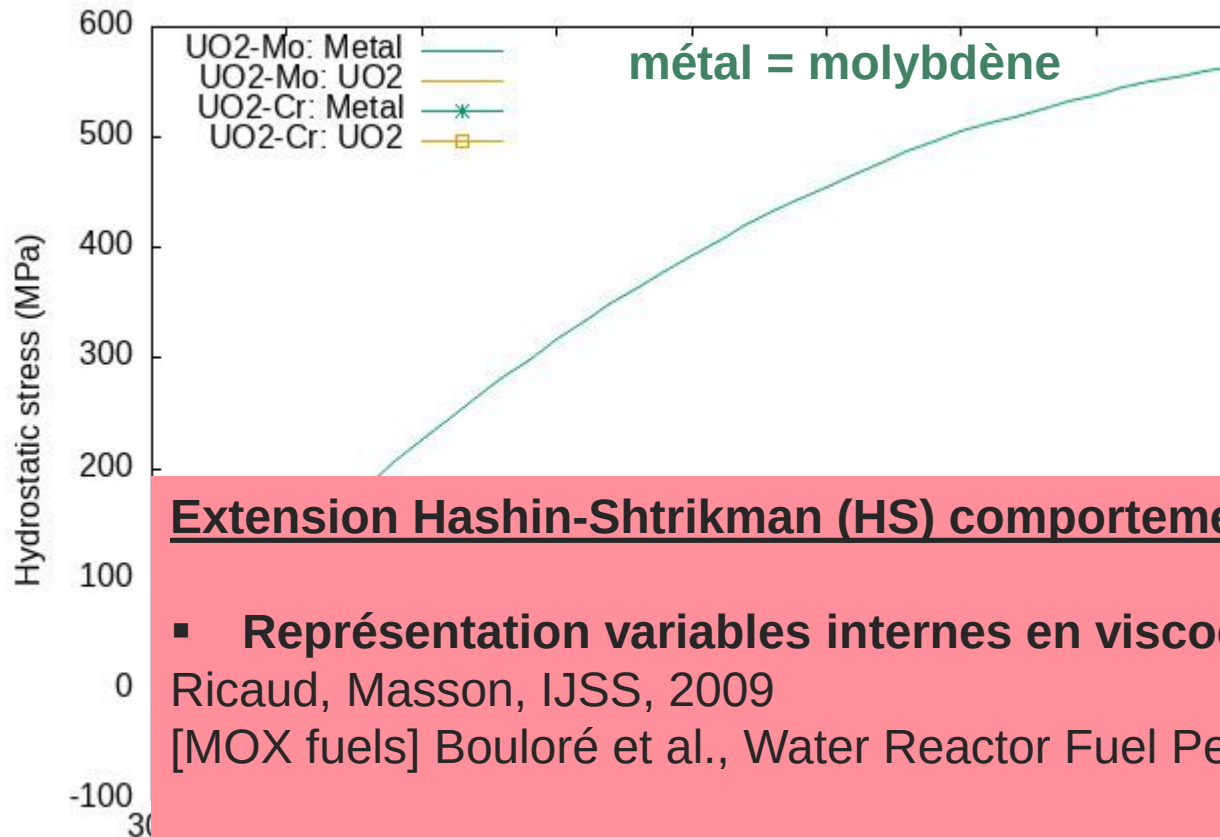
⇒ **Traction plus forte dans Mo**

⇒ **Écoulement viscoplastique du molybdène doit être pris en compte**

Test de dilatation – analyse thermoélastique (HS)



Rampe de température, 5% métal



Chrome versus Molybdène

Dilatations thermiques (below 1000 K):

Cr ou Mo < UO_2

⇒ **Métal en traction, oxyde en compression**

Mais écarts plus importants pour Mo :

Extension Hashin-Shtrikman (HS) comportements élasto-viscoplastiques :

▪ Représentation variables internes en viscoélasticité linéaire

Ricaud, Masson, IJSS, 2009

[MOX fuels] Bouloré et al., Water Reactor Fuel Performance Meeting, 2017

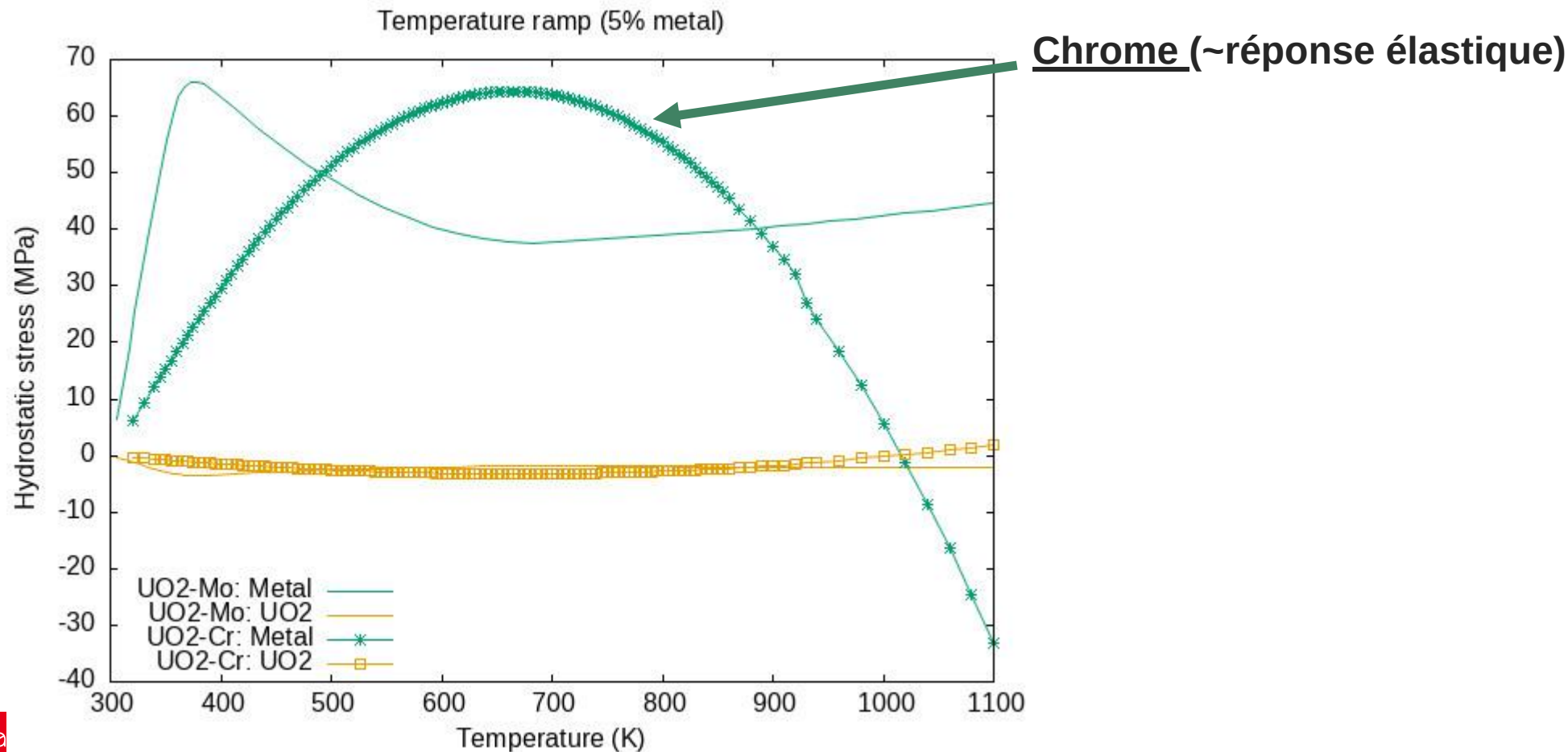
[Cladding alloys] Gicquel et al., 20th International Symposium on Zirconium in the Nuclear Industry, 2023

▪ Extension au non linéaire : voir Masson et al., JMPS, 2020 ; S. Berbeni, IJSS, 2021

Voir Cours M. Idiart : **approche « préhistorique » modifiée** => extension « sécante modifiée »

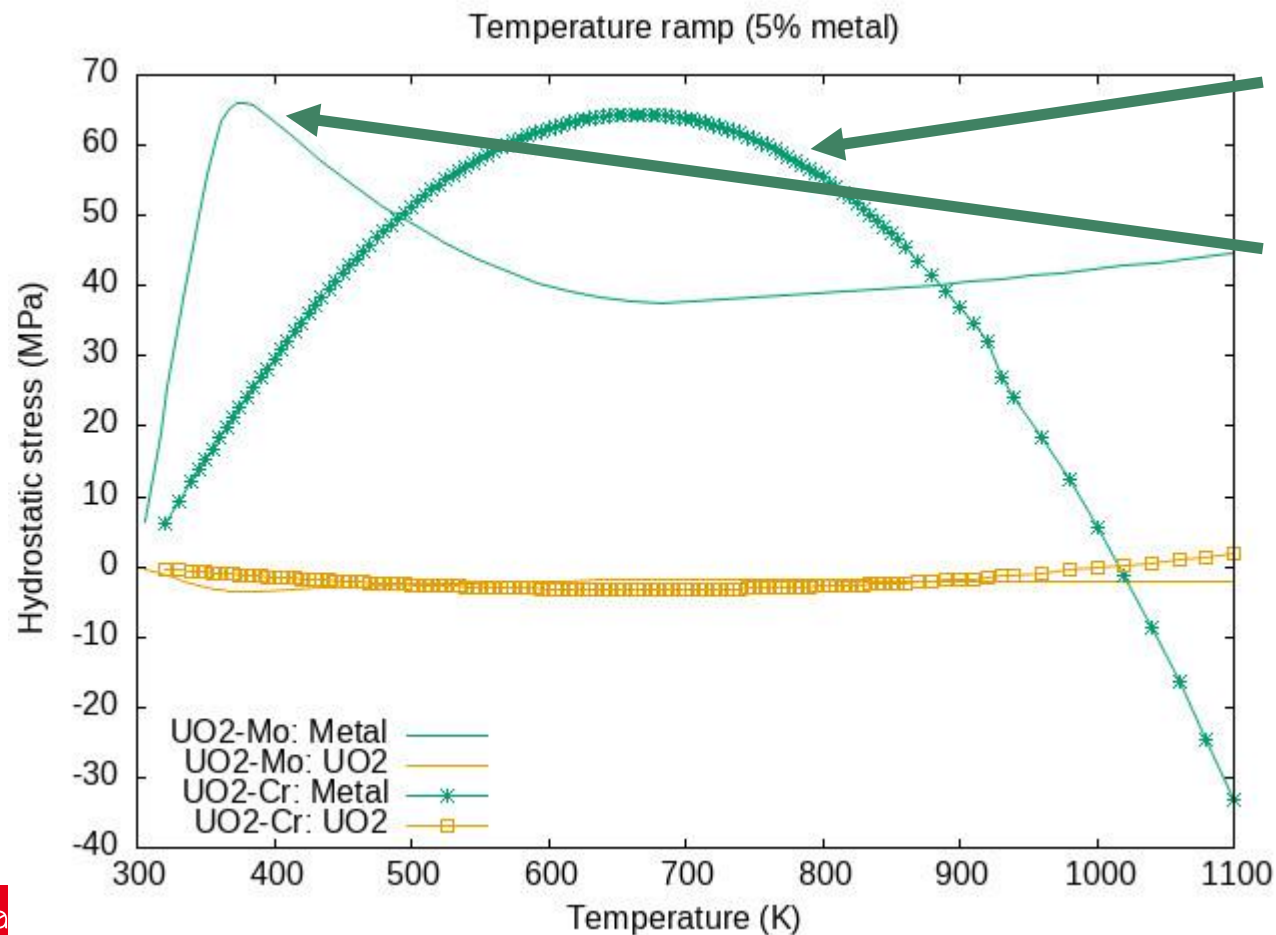
Estimations HS pour des comportements élasto-viscoplastiques

- ❑ Test de dilatation, effet de la déformation viscoplastique du métal



Estimations HS pour des comportements élasto-viscoplastiques

- Test de dilatation, effet de la déformation viscoplastique du métal



Chrome (~réponse élastique)

Molybdène : forte réduction des contraintes
(écoulement plastique du métal)

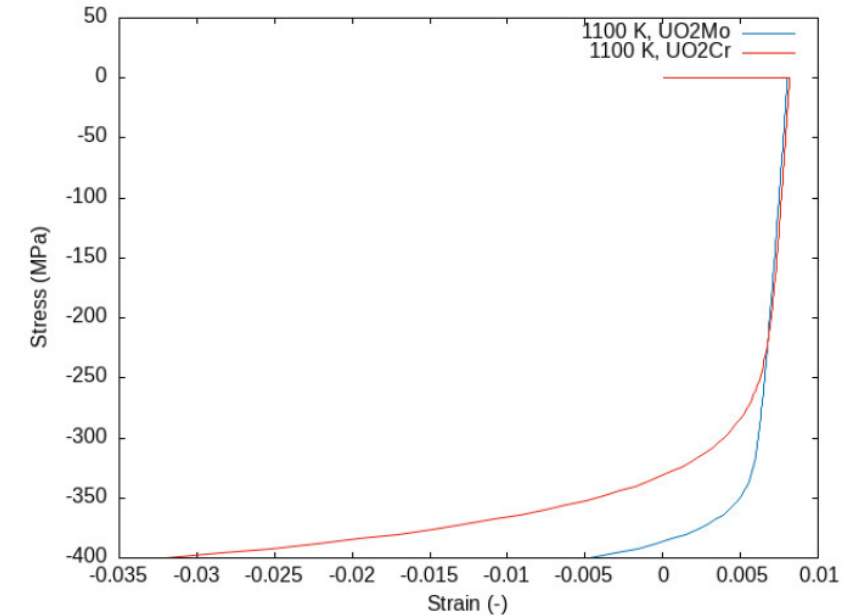
~ une matrice métallique molle qui accommode les déformations thermiques différentielles des inclusions oxyde (élastiques)

Loi à variables internes CERMET, bilan



Couplage élastique-viscoplastique :

- Oxyde ~viscoélastique linéaire (fluage induit par l'irradiation) ;
- Métal élasto-viscoplastique (seuil dépendant de la température) dépend de la nature et de la teneur métal : linéarisation sécante modifiée



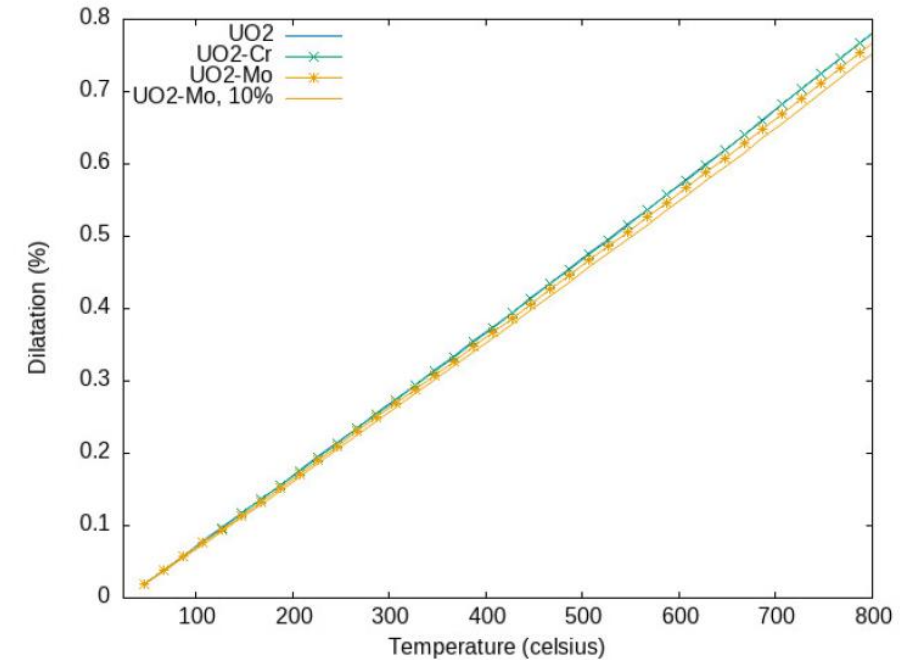
$$\tilde{\epsilon} = \tilde{\epsilon}^e + \tilde{\epsilon}^v + \tilde{\epsilon}^{th} + \tilde{\epsilon}^g + \tilde{\epsilon}^{fis}$$

Loi à variables internes CERMET, bilan



Dilatations thermiques différentielles :

- Coefficient de dilatations thermiques des deux phases
- Interactions élastoviscoplastiques



$$\tilde{\epsilon} = \tilde{\epsilon}^e + \tilde{\epsilon}^v + \tilde{\epsilon}^{th} + \tilde{\epsilon}^g + \tilde{\epsilon}^{fis}$$

Loi à variables internes CERMET, bilan



Déformations différentielles induites par l'irradiation :

- Modélisation des effets de l'irradiation dans l'oxyde => couplage avec la mécanique (rétroaction)
- Variations dimensionnelles du métal négligées à ce stade

À nouveau : interactions élastoviscoplastiques

$$\tilde{\epsilon} = \tilde{\epsilon}^e + \tilde{\epsilon}^v + \tilde{\epsilon}^{th} + \tilde{\epsilon}^g + \tilde{\epsilon}^{fis}$$

Loi à variables internes CERMET, bilan



Déformation de fissuration :

- Approche locale (sensibilité au maillage), contrainte macroscopique
- Chargements non radiaux, non monotones

B. Michel et al., EFM, 2008

$$\tilde{\epsilon} = \tilde{\epsilon}^e + \tilde{\epsilon}^v + \tilde{\epsilon}^{th} + \tilde{\epsilon}^g + \tilde{\epsilon}^{fis}$$

Loi à variables internes CERMET, bilan



En perspectives :

- Approche variationnelle unifiée (travaux de M. Essafi, ANR AnoHonA)

Lahellec et al. (2024), Journal of the Mechanics and Physics of Solids ,193, 105891.

Kowalczyk-Gajewska et al. (2025) Mechanics of Materials, 200, 105191 => **voir exposé S. Mercier & S. Berbenni**

Idiart (2025). Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 194, 105936

- Endommagement « microscopique »

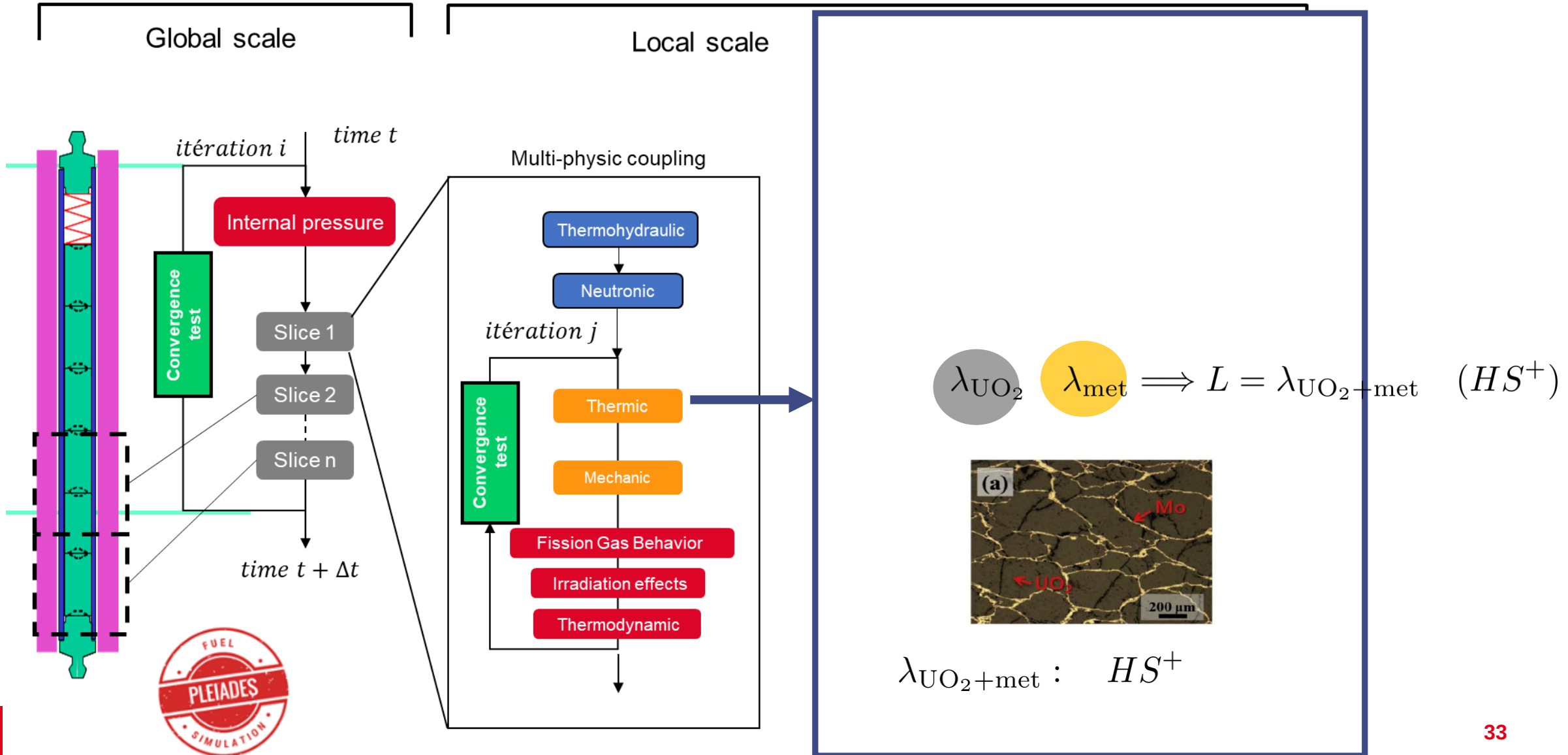
- Fragile : l' UO_2 voir exposé de S. Dartoix, Gauthier et al., IJSS, 2023 (travaux de M. Amougou)
- Ductile : le métal

Sommaire

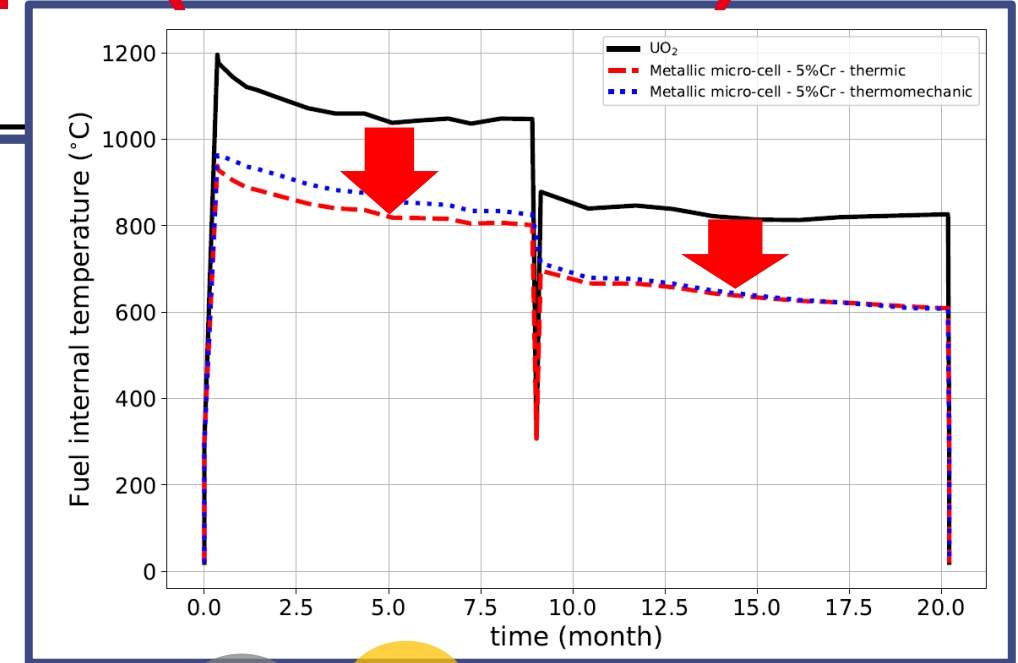
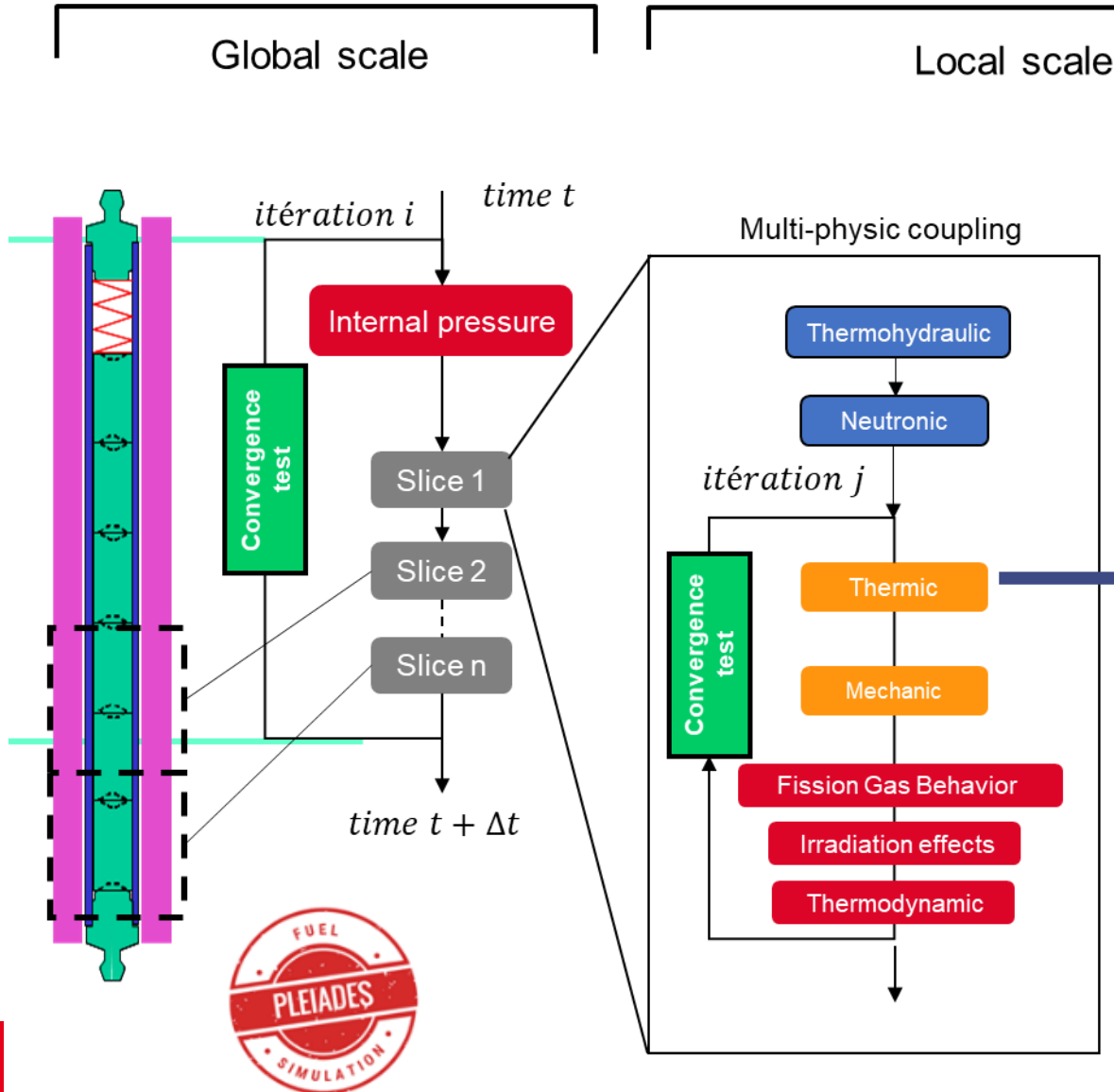
- Simulation multi-physique de l'élément combustible REP (PLEIADES)
- Les combustibles E-ATF, voie des additifs métalliques ... homogénéisation appliquée
- Loi à variables internes pour les CERMET(s) micro-cellulaires
- Simulation thermomécanique d'un « crayon REP du futur » grâce à l'homogénéisation
- Conclusions - perspectives



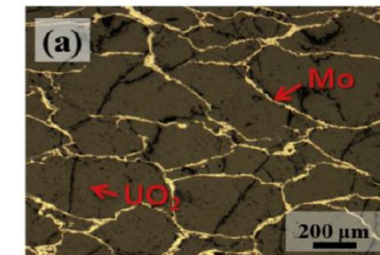
Intégration dans PLEIADES/ALCYONE



Analyse purement thermique (5% chrome)



$$\lambda_{\text{UO}_2} \quad \lambda_{\text{met}} \Rightarrow L = \lambda_{\text{UO}_2 + \text{met}} \quad (HS^+)$$



$$\lambda_{\text{UO}_2 + \text{met}} : HS^+$$

Homogénéisation

Analyse purement thermique (5% chrome)

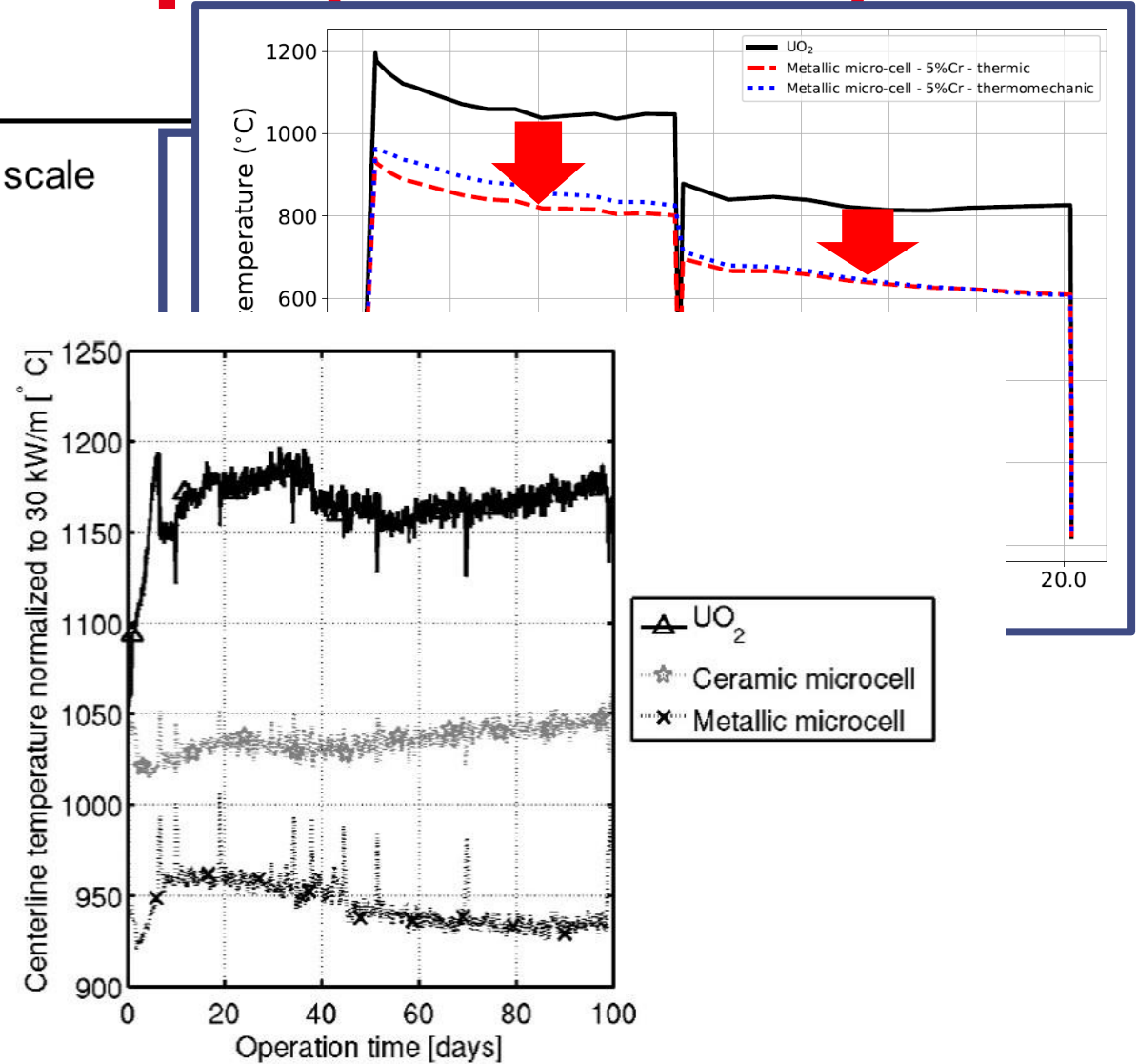
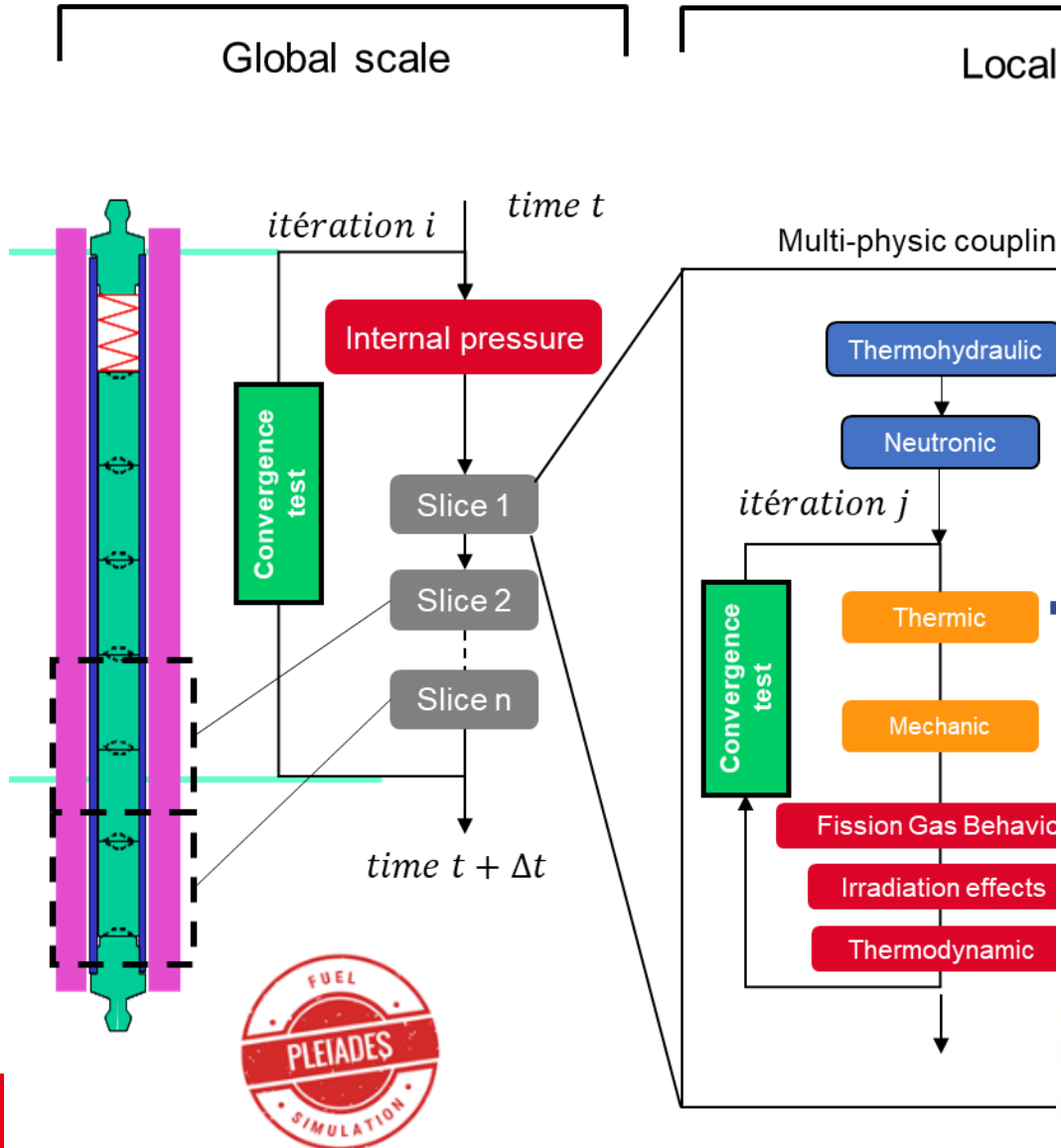
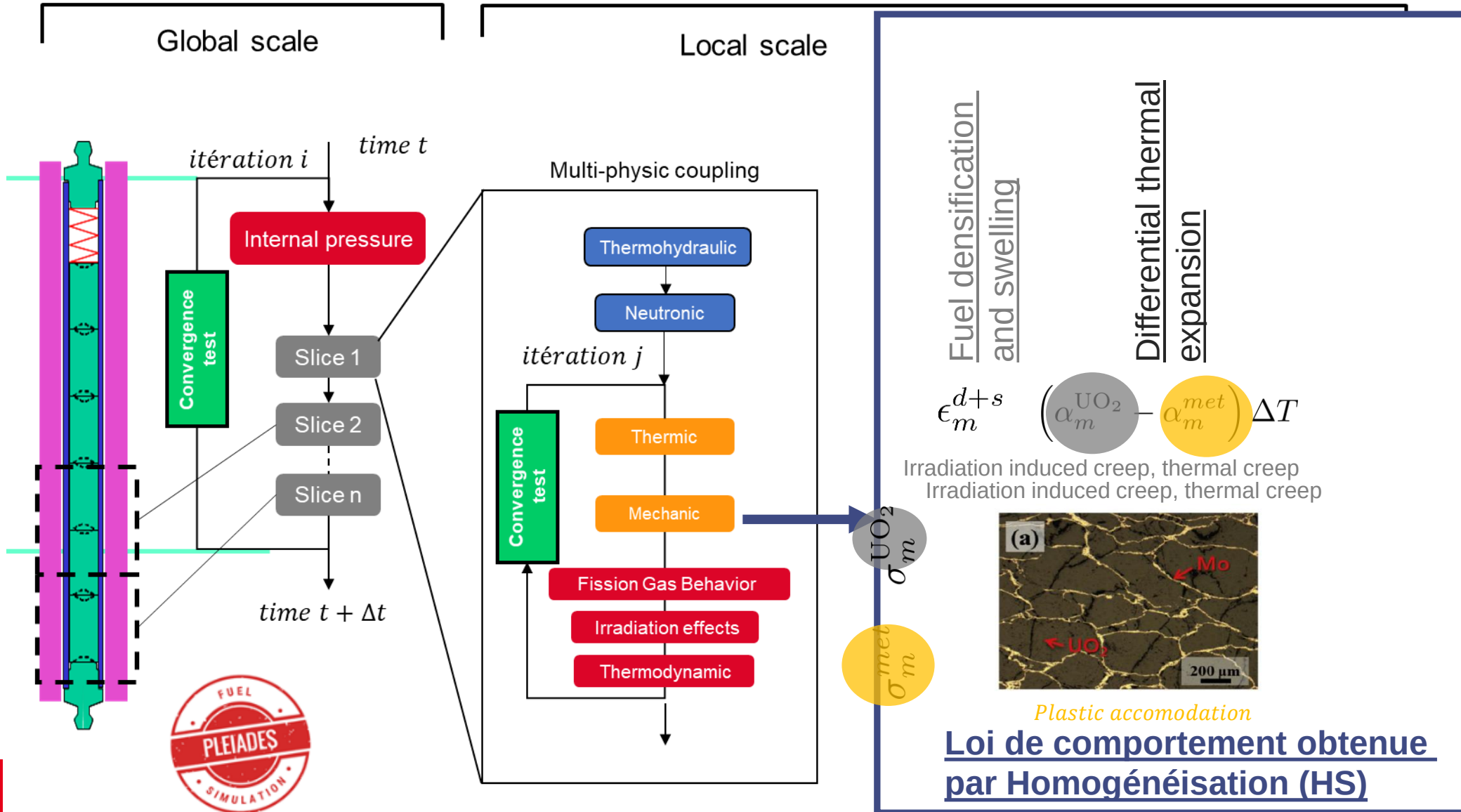


Fig. 12. Fuel centerline temperatures for the microcell fuel rods (rods 8 and 11) and the instrumented pure UO₂ rod of the same diameter (rod 2), normalized to a linear heat rate of 30 kW/m.

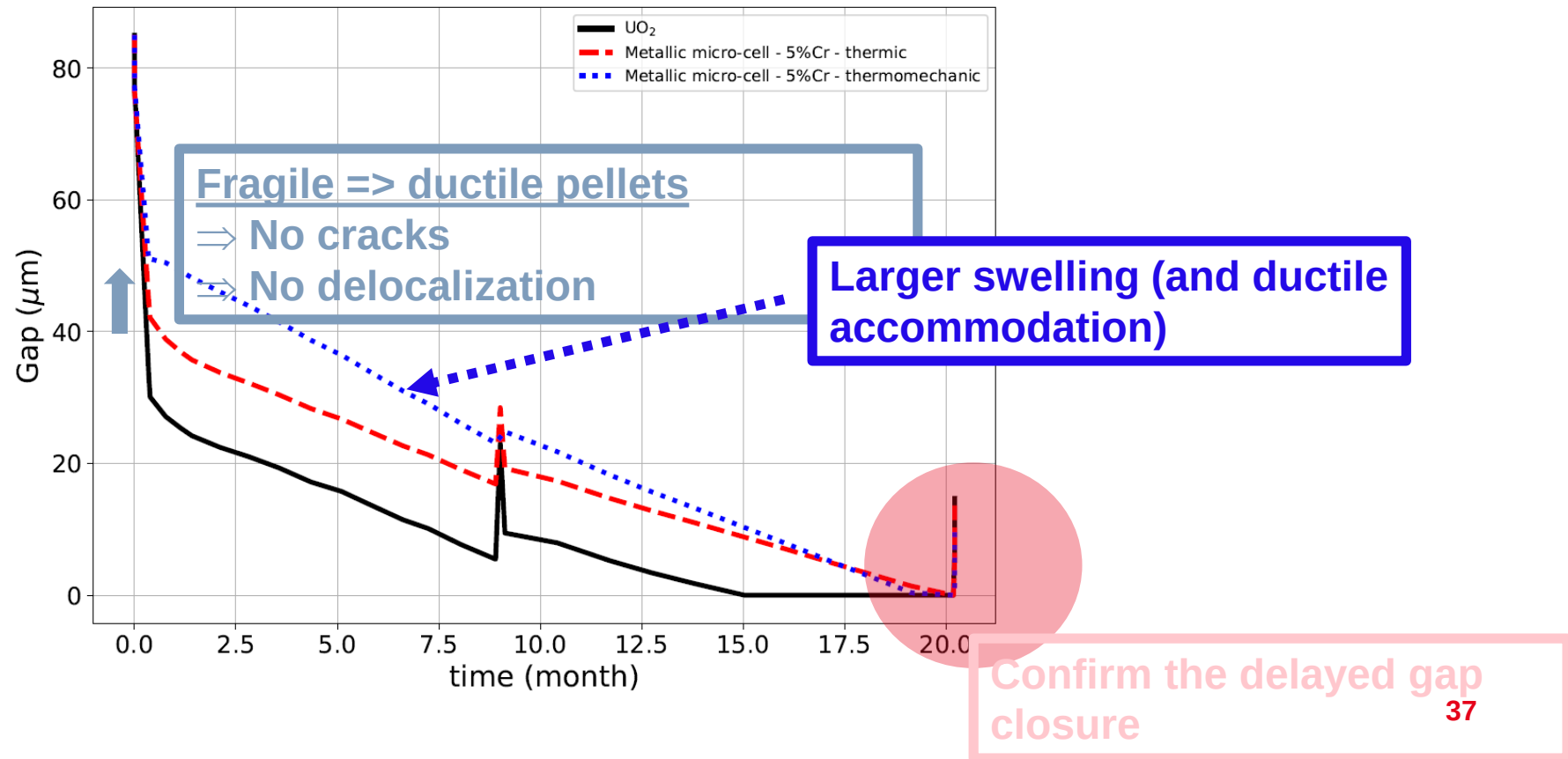
Analyse thermomécanique (5% chrome)



Analyse thermomécanique (5% chrome)

Évolution temporelle du jeu pastille – gaine (Masson et al., Nuclear Material conférence, Singapour, 2024)

... et après analyse des évolutions des quantités mécaniques à l'échelle macroscopique et microscopique



Analyse thermomécanique (5% chrome)



... en résumé ...

Principales conclusions de l'étude thermomécanique :

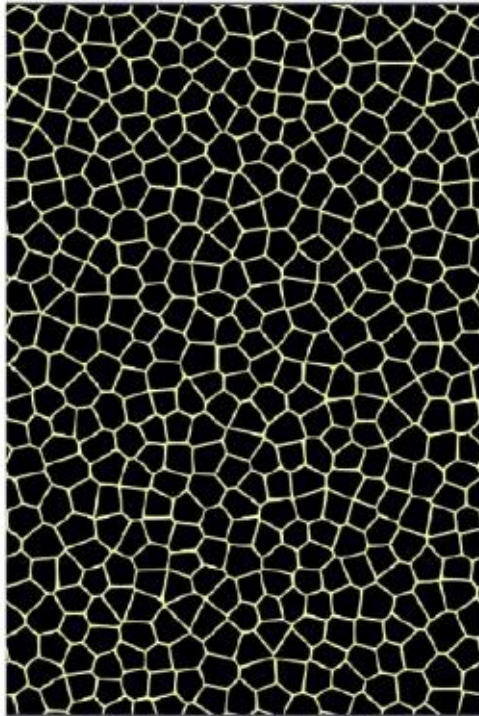
- Prédominance du comportement ductile de la colonne combustible sous-irradiation
- Effet de la nature et de la fraction volumique du métal quantifié

Ces études par simulation orientent la R&D à venir :

- Examens post-irradiatoires colonne combustible (fissuration ?)
- Tests thermomécaniques d'échantillons vierges d'irradiation
- Etudes par simulation des simulations incidentelles / accidentelles
- Effet « microstructure » : « Micro-plates » versus « Micro-cellulaire »
- **Effet d'échelle sur la limite ductile / fragile**

Séparation d'échelle : la microstructure ET le chargement

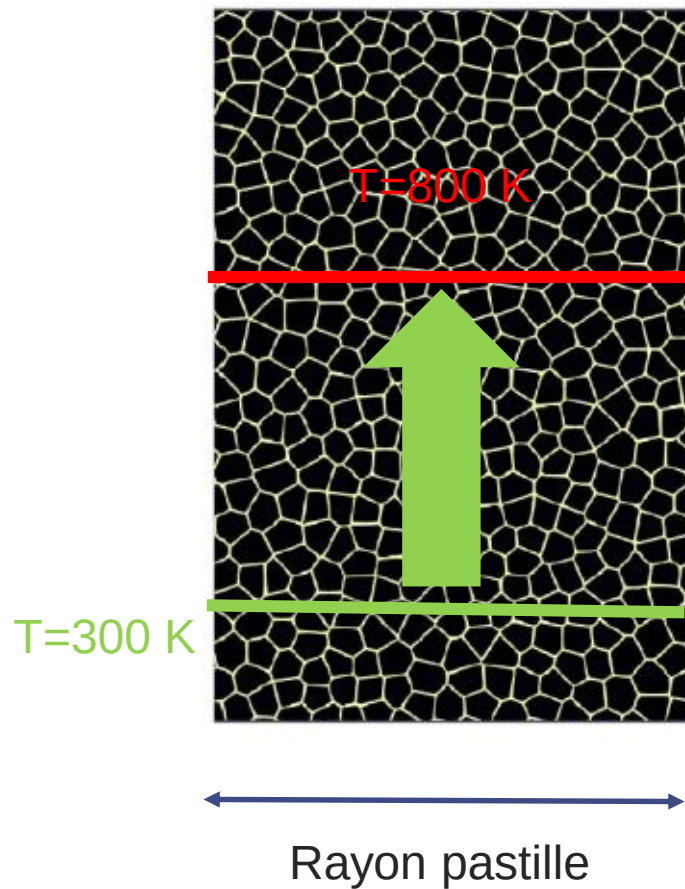
Taille des cellules = 400 microns $\sim$ 20 x diamètre pastille



Rayon pastille

Séparation d'échelle : la microstructure ET le chargement

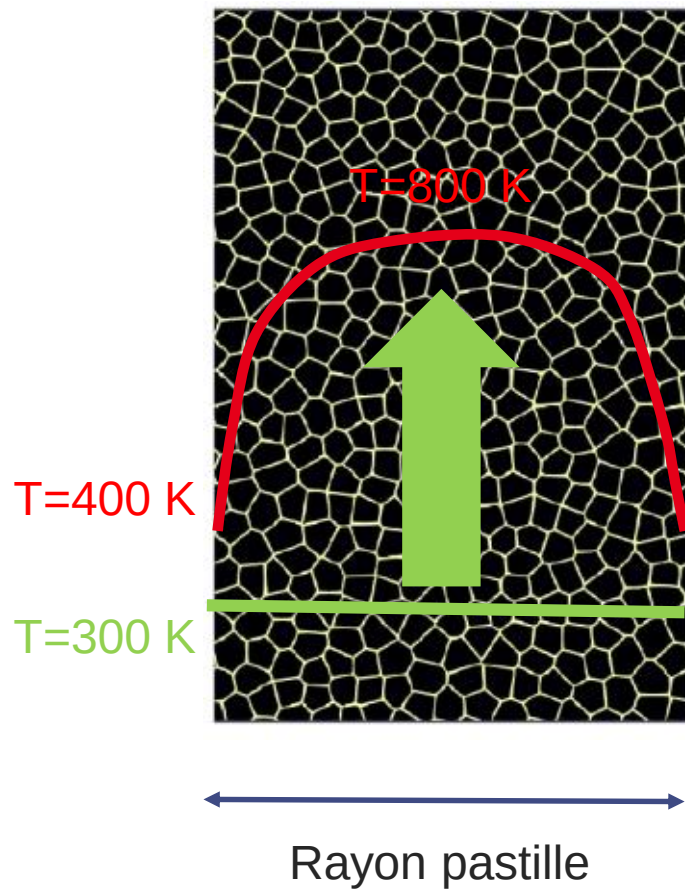
Test de dilatation : température homogène



Conditions de séparation d'échelle : OK

Séparation d'échelle : la microstructure ET le chargement

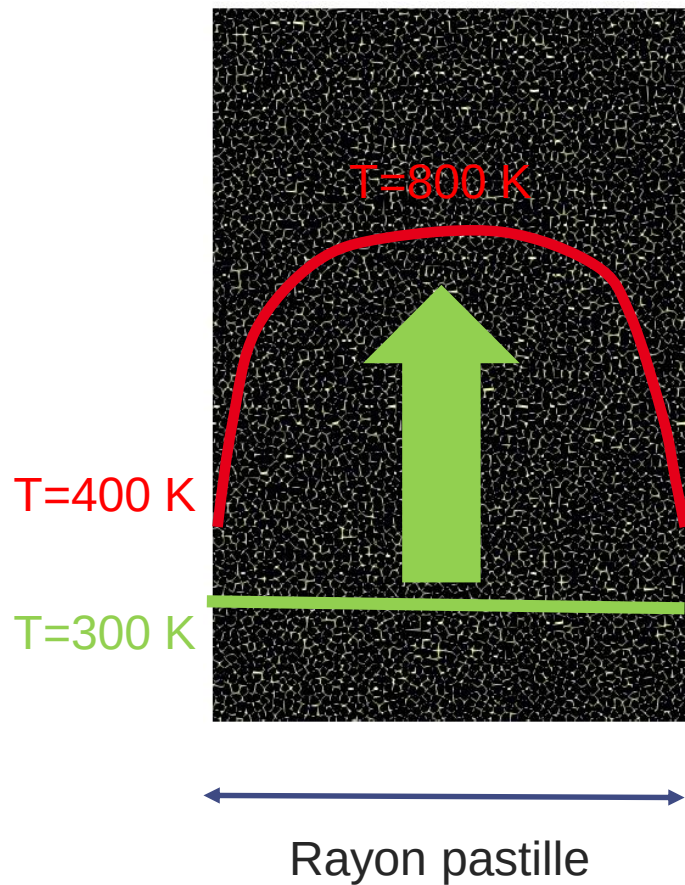
Sollicitation mécanique en début d'irradiation : **gradient de température**



**Variation température : 100 K / mm
~ 2-3 cellules
Conditions de séparation d'échelle ?**

Séparation d'échelle : la microstructure ET le chargement

Sollicitation mécanique en début d'irradiation : **gradient de température**



Taille des cellules ~ 100 microns

Rapport d'échelle ~ 80

Conditions de séparation d'échelle : OK

Sommaire

- Simulation multi-physique de l'élément combustible REP (PLEIADES)
- Les combustibles E-ATF, voie des additifs métalliques ... homogénéisation appliquée
- Loi à variables internes pour les CERMET(s) micro-cellulaires
- Simulation thermomécanique d'un « crayon REP du futur » grâce à l'homogénéisation
- Conclusions - perspectives



Conclusions

❑ Simulation multi-physique d'un élément technologique à l'échelle du matériau :



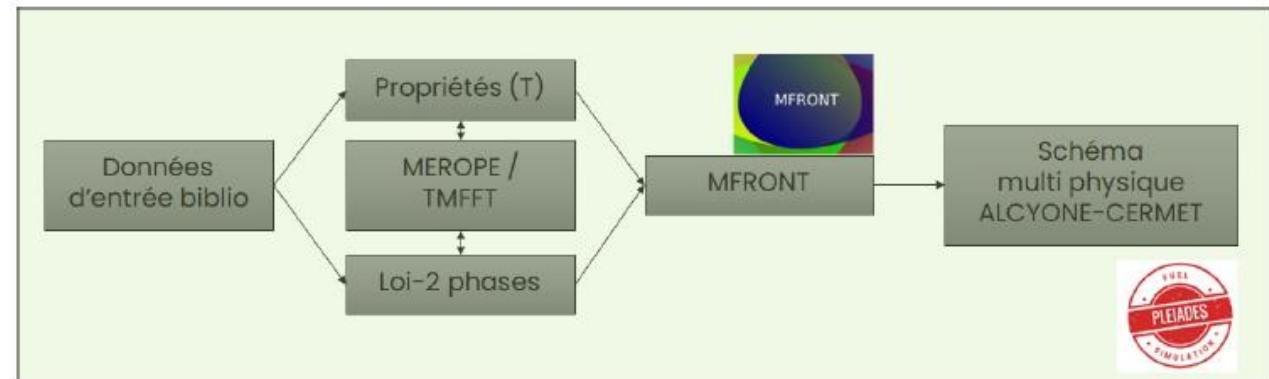
- Possible avec une approche purement déductive
 - Approche HS (thermique, thermomécanique, non-linéaire) 
- Dans une situation démonstrative
 - Mécanique non linéaire, effet du temps (vieillessement)
 - Trajets de chargements non radiaux et non monotones 
 - Couplage avec les effets d'irradiation à l'échelle micro
- Avec un effort raisonnable :
 - Cumulé : 1,5 année d'ingénieur – chercheur
 - => Biblio, propriétés matériaux, calculs VER, calculs structure 
 - Mais s'appuyant sur des développements antérieurs (MOX)

Conclusions

❑ Simulation multi-physique d'un élément technologique à l'échelle du matériau

❑ REX méthodologique :

- Développement facilité par une équipe pluridisciplinaire (science des matériaux, calcul des structures, métier - combustible)
- Outil commun pour
 - Propriétés de l'oxyde et des métaux (conductivité, modules, dilatation, ...)
 - Loi homogénéisée
 - Calculs VER
 - Calcul de structure



Conclusions

❑ Simulation multi-physique d'un élément technologique à l'échelle du matériau

❑ REX méthodologique



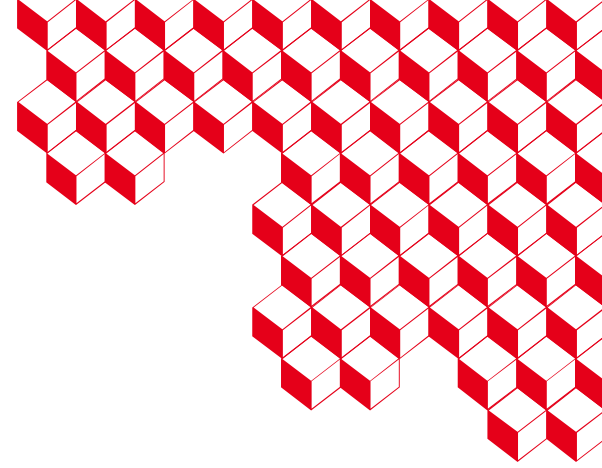
❑ Comment généraliser ce type d'études ?

➤ Défis théoriques :

- Besoin d'une formulation unifiée en élastoviscoplasticité (**M. Essafi**)
- Modélisation de la dégradation des phases dans des cas complexes (non monotone, transitions fragile – ductile, ...), voir exposé S. Dartois (**M. Amogou**)
- Quid des microstructures plus complexes (voir exposé M. Bornert)

➤ Défis logiciels (**Post-doc de A. Martin**) :

- Converger vers une bibliothèque logicielle « homogénéisation » dans MFRONT (Post-doc de A. Martin)
- Cas des grands nombres de variables internes (polycristaux)



MISTRAL
LabCom



iresne



M. Zabiego

B. Seck

L. Noirot

V. Gauthier

J. Fauque

M. Josien

S. Valance

A. Bouloré

E. Castelier

P. Suquet

M. Amougou

T. Helfer

M. Gărăjeu



L. Portelette

C. Introini

M. Essafi

J. Léchelle

framatome

N. Lahellec

V. D'ambrosi

Partenaires CEA Doctorants

