

DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE



Simulation multi-échelles et multi-physiques des éléments combustibles des réacteurs nucléaires à eau sous pression

R. Masson

**Institut de recherche sur les systèmes nucléaires pour
la production d'énergie bas carbone
Département d'étude des combustibles
Service d'étude et de simulation du comportement des
combustibles
CEA Cadarache**

www.cea.fr

*Mâtinée Maia, Institut Mathématiques de Toulouse
30 juin 2022*

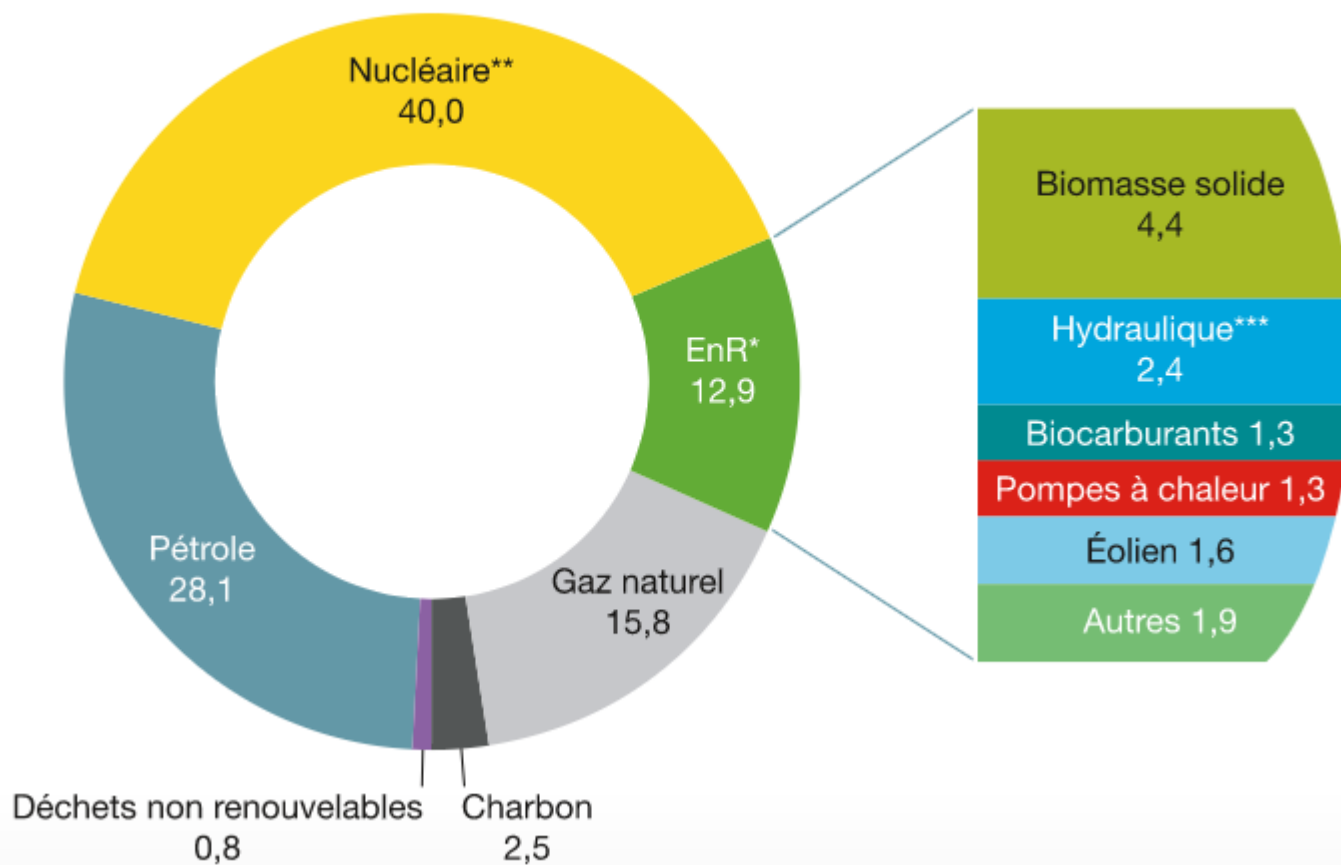
Contexte, l'énergie nucléaire en France (résumé)

L'élément combustible des réacteurs à eau sous pression (REP), son comportement sous-irradiation

La simulation multi-physique des éléments combustibles REP

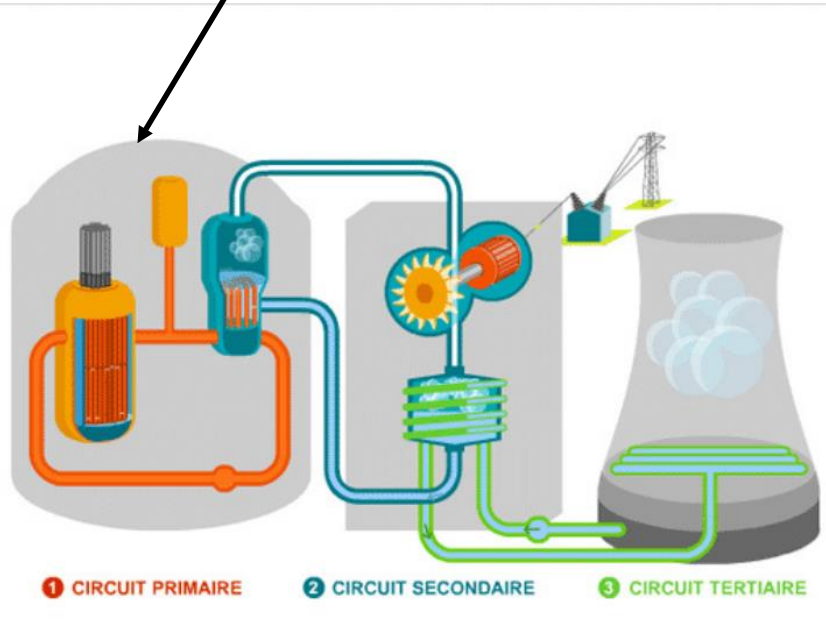
La simulation multi-échelle des éléments combustibles REP

En % (données non corrigées des variations climatiques)

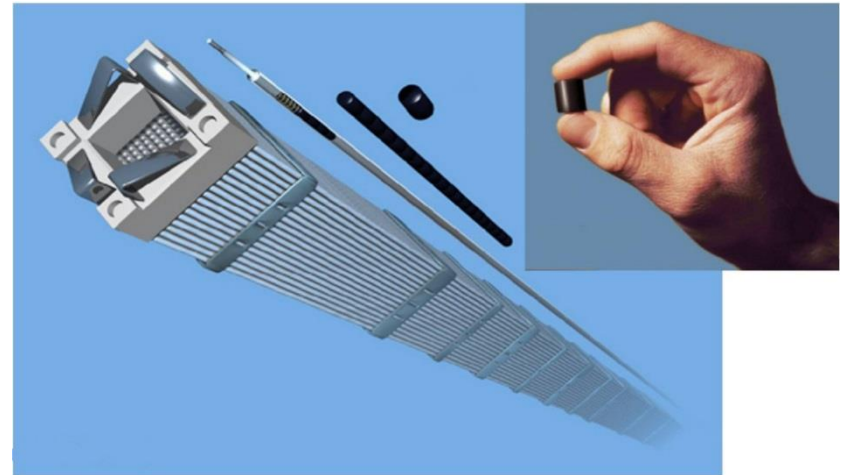
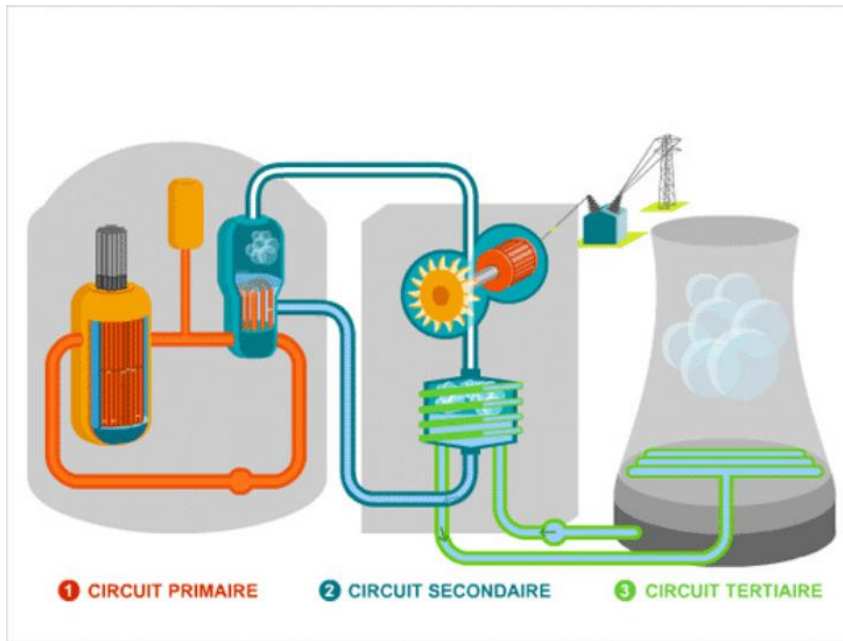


CONTEXTE, L'ENERGIE NUCLEAIRE DE FISSION

GOLFECH, @edf



@ irsn.fr



REP 1300 :

193 assemblages combustibles

264 crayons / assemblage

~ 100 tonnes de combustible

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

Enrichissement :

Uranium naturel : moins de 1% d'isotope 235

Enrichissement nécessaire de l'Uranium pour atteindre 4-5%

Retraitement des combustibles usés :

~ 10 tonnes / an (Plutonium)

Extraction de cette matière fissile

Le MOX (Mixed-Oxyde Fuel) :

Teneur moyenne en Pu ~8%

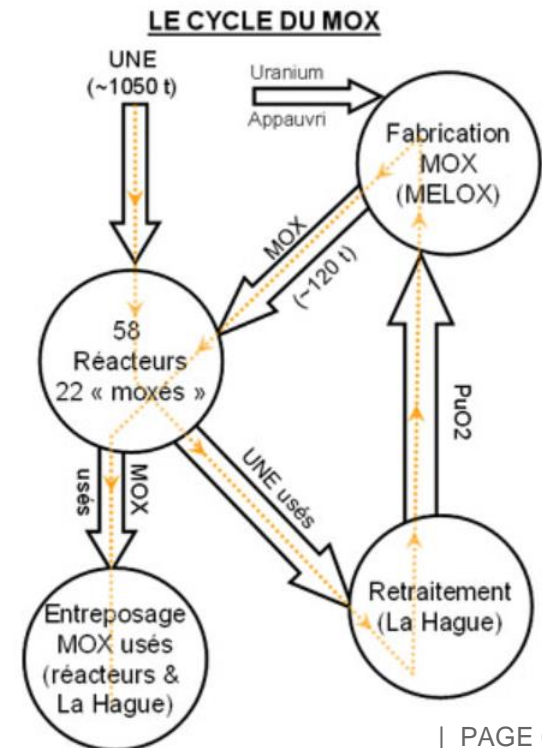
Mélange avec Uranium « appauvri »

Utilisé dans 22 réacteurs (900 Mwe)

Intérêts :

Economie des ressources (remplace l'Uranium enrichi)

Diminution du volume des déchets



Puissance volumique dégagée :

Puissance linéique ~ 200 W / cm

Soit ~ 0,4 W / mm³

Cylindre infini avec source (stationnaire) $T(r) = \frac{P}{4\lambda}(R^2 - r^2) + T(R).$

Conductivité ~ 2 W/m/K

R~4mm

T(R) ~350°C

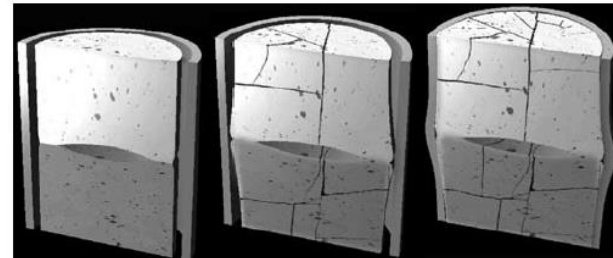
Différence de température centre / périphérie ~ 800°C

Pas de risque de fusion ($\ll T_F \sim 2800^\circ\text{C}$)

En revanche :

Très fortes contraintes « thermiques »

=> Fragmentation des pastilles



@CEA, les combustibles nucléaires

!! Problème couplé Mécanique – Thermique (problématique du jeu)

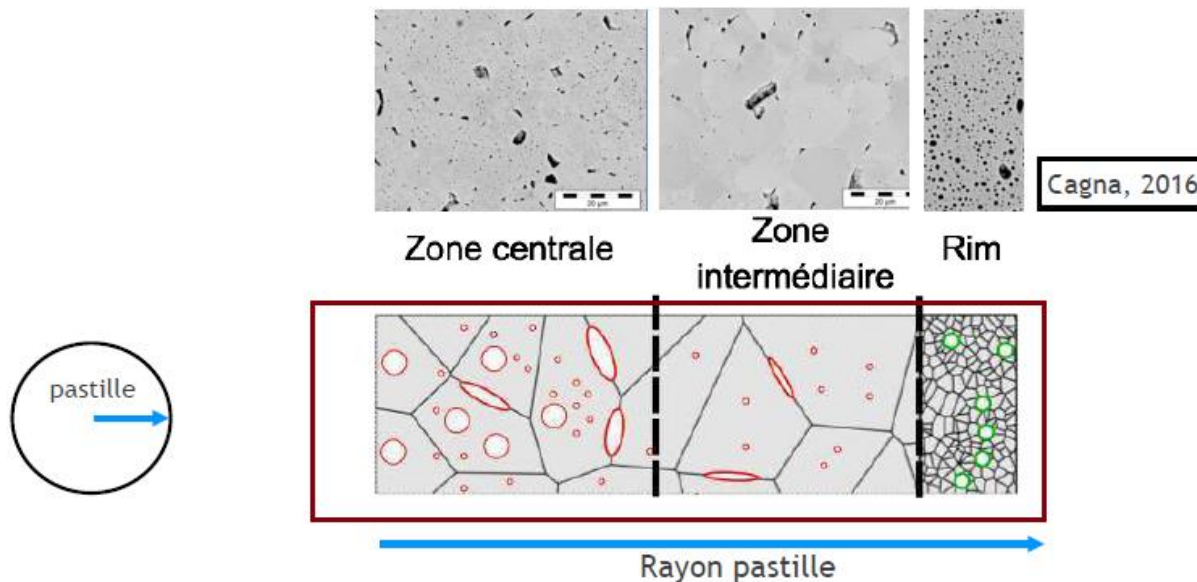
Gonflement / relâchement avec l'irradiation :

Produits de fission gazeux : Xénon, Krypton

Diffusion et précipitation : bulles en positions intra et inter-granulaires

Effet de la différence de température centre / périphérie :

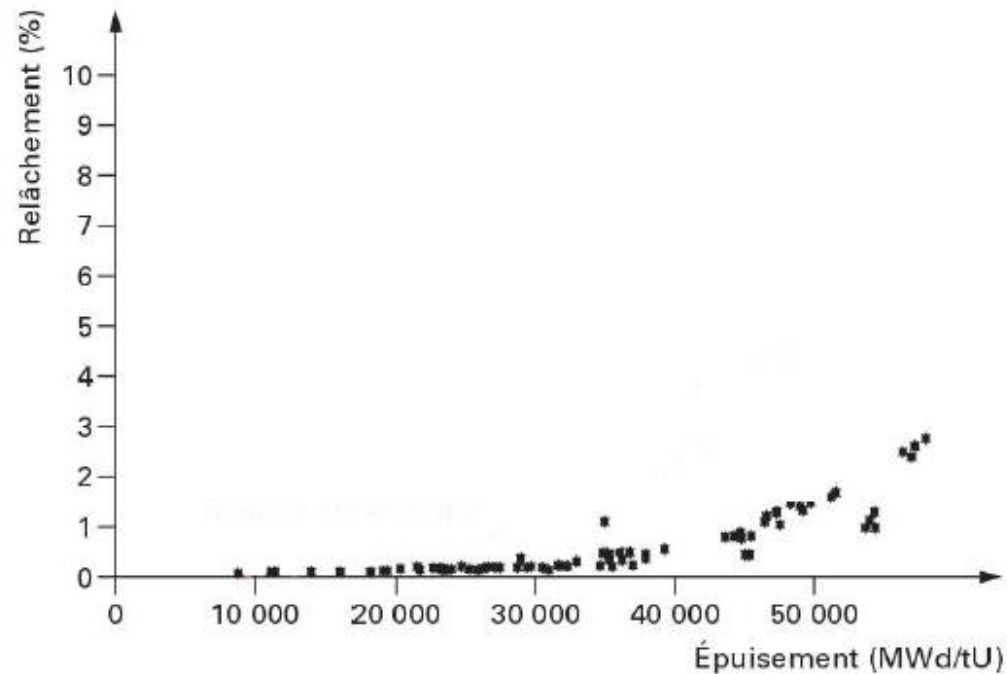
Evolutions microstructurales différentes selon le rayon



Gonflement / relâchement avec l'irradiation :

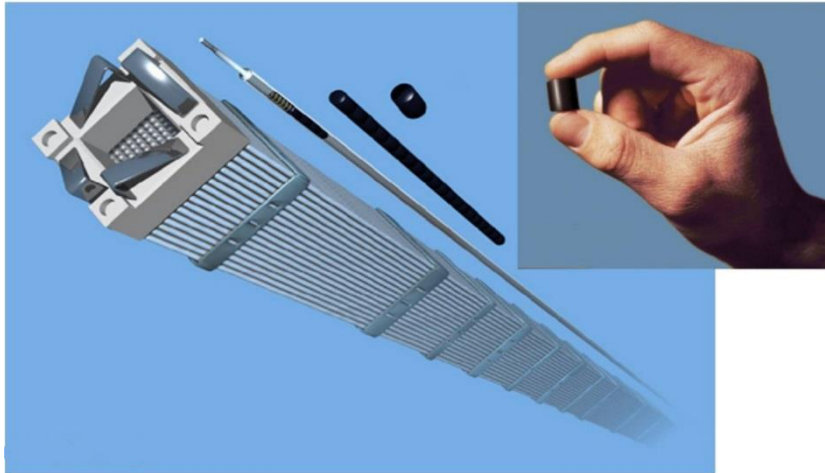
Relâchement observé au cours de l'irradiation

⇒ Augmentation de la pression interne des crayons



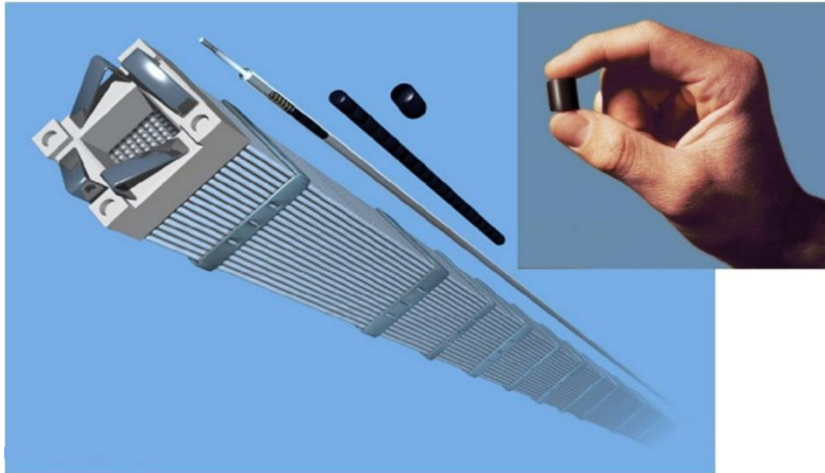
@Blanpain et al, Techniques de l'ingénieur, 2021

**!! Développement de modèles physiques de l'irradiation spécifiques
Couplage avec la thermique et la mécanique**



Pourquoi?

- Apporter des éléments de justification dans les argumentaires de sûreté
- Spécifier des expériences, réduire le nombre d'expériences intégrales
- Evaluer des voies d'amélioration des performances / sûreté, Proposer de nouveaux concepts
- Capitaliser et pérenniser des connaissances acquises dans le cadre des programmes de R&D du CEA (codes et bases de données) et de l'Institut Tripartite (EDF-FRA-CEA)

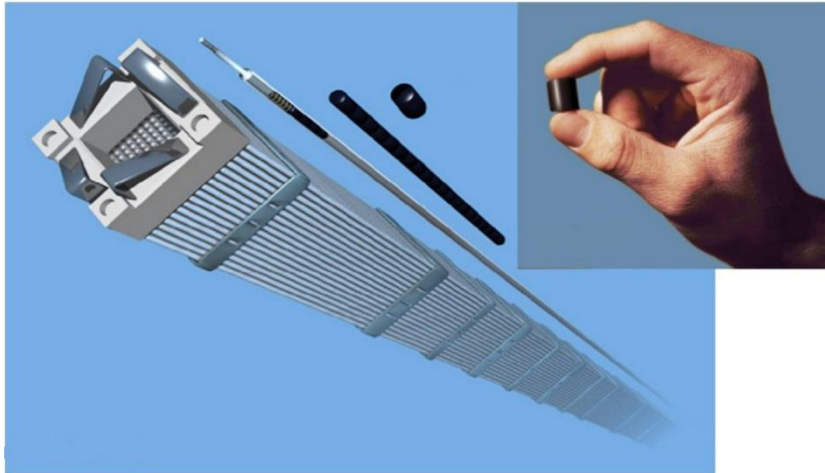


Pourquoi?

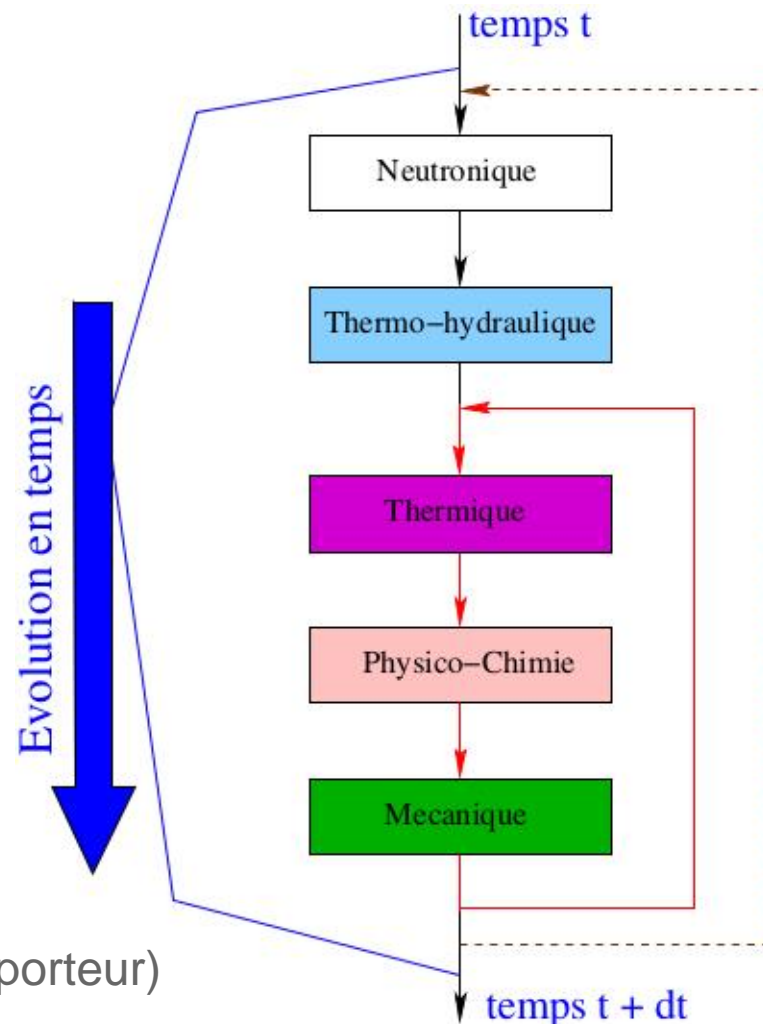
- Apporter des éléments de justification dans les argumentaires de sûreté
- Spécifier des expériences, réduire le nombre d'expériences intégrales
- Evaluer des voies d'amélioration des performances / sûreté, Proposer de nouveaux concepts
- Capitaliser et pérenniser des connaissances acquises dans le cadre des programmes de R&D du CEA (codes et bases de données)

Plusieurs disciplines :

- Neutronique (fissions)
- Thermo – Mécanique
- Physique de l'irradiation
- Thermo – Hydraulique (échange caloporteur)
- Mathématiques Appliquées



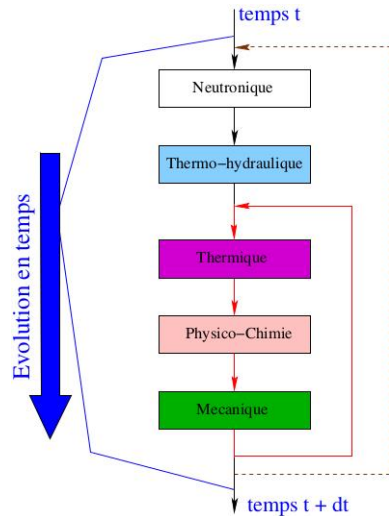
Couplages multi-physiques



Plusieurs disciplines :

- Neutronique (fissions)
- Thermo – Mécanique
- Physique de l'irradiation
- Thermo – Hydraulique (échange caloporteur)
- Mathématiques Appliquées

LA SIMULATION MULTI-PHYSIQUE DE L'ÉLÉMENT COMBUSTIBLE



Système de point fixe : $X = F(X) \quad (\Leftarrow G(X) = 0)$ avec $X \in \mathbb{R}^d$

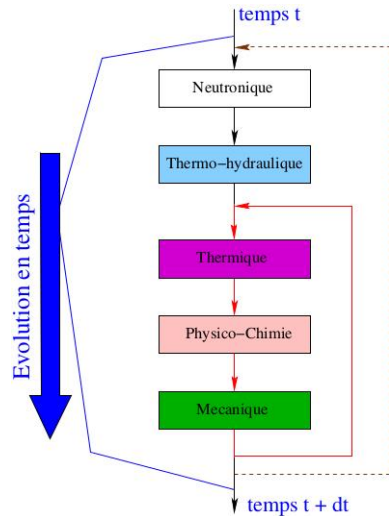
Les itérations de point fixe (ou itérations de Picard)

$$X_{n+1} = F(X_n), \text{ jusqu'à } \|F(X_n) - X_n\| \leq \varepsilon$$

sont encore l'approche la plus commune pour traiter de nombreux problèmes numériques :

- ▶ **problèmes couplés** : résolution multiphysique partitionnée, décomposition de domaine, proper generalized decomposition,...
- ▶ **problèmes non linéaires** : transfert de chaleur, mécanique non linéaire, structure électronique,...

LA SIMULATION MULTI-PHYSIQUE DE L'ÉLÉMENT COMBUSTIBLE



Système de point fixe : $X = F(X)$ ($\Leftrightarrow G(X) = 0$) avec $X \in \mathbb{R}^d$

Les itérations de point fixe (ou itérations de Picard)

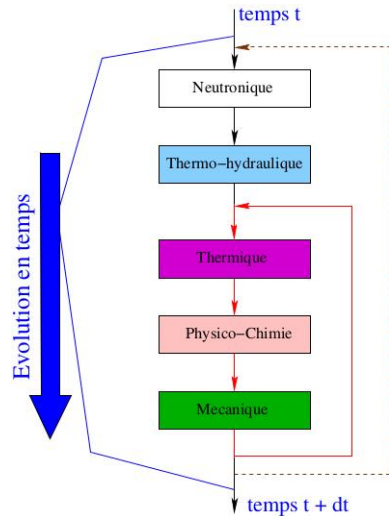
$$X_{n+1} = F(X_n), \text{ jusqu'à } \|F(X_n) - X_n\| \leq \varepsilon$$

sont encore l'approche la plus commune pour traiter de nombreux problèmes numériques

☺ : générique, aucun a priori sur F (Jacobienne,...)

☹ : convergence non assurée ou souvent convergence lente et linéaire

LA SIMULATION MULTI-PHYSIQUE DE L'ÉLÉMENT COMBUSTIBLE



Système de point fixe : $X = F(X)$ ($\Leftrightarrow G(X) = 0$) avec $X \in \mathbb{R}^d$

Les itérations de point fixe (ou itérations de Picard)

$$X_{n+1} = F(X_n), \text{ jusqu'à } \|F(X_n) - X_n\| \leq \varepsilon$$

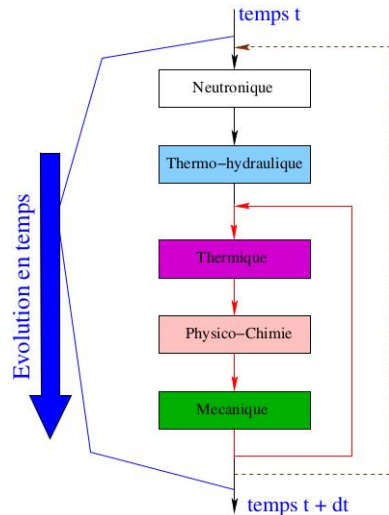
sont encore l'approche la plus commune pour traiter de nombreux problèmes numériques

☺ : générique, aucun a priori sur F (Jacobienne,...)

☹ : convergence non assurée ou souvent convergence lente et linéaire
 \hookrightarrow méthodes d'accélération (ou méthodes d'extrapolation) pour la convergence des suites (avec transformation dynamique)

$$X_{n+1} = \psi(F(X_n), F(X_{n-1}), \dots, X_n, X_{n-1}, \dots), \text{ jusqu'à } \|F(X_n) - X_n\| \leq \varepsilon$$

qui convergent plus vite (en moins d'itérations et temps CPU) vers X et qui sont non intrusives.



Formalisme générique pour les suites vectorielles

► Principe de la méthode statique

Residual-based acceleration method

Supposons

- $Y_n = X_n - \sum_{i=1}^M \lambda_n^i Z_n^i$, $\lim_{n \rightarrow \infty} Z_n^i = 0$, $\lambda_n^i \in \mathbb{R}$
- $Y_{n+1} = X_{n+1} - \sum_{i=1}^M \lambda_n^i Z_{n+1}^i$

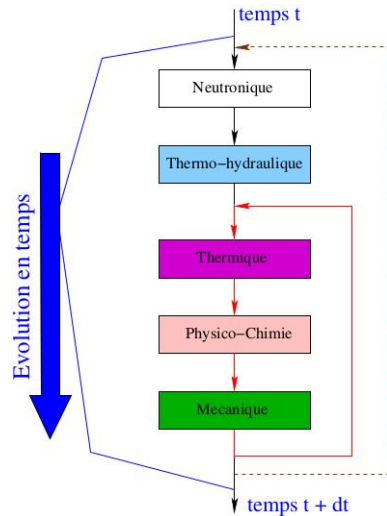
Alors la minimisation de $\delta Y_n = Y_{n+1} - Y_n$ donne λ_n^i et une estimation de X

$$Y_n = X_n - Z_n (\delta Z_n^T \delta Z_n)^{-1} \delta Z_n^T \delta X_n$$

- Généralisation pour $M > 1$ de la **nonlinear hybrid procedure** (Brezinski, 1998)
- Très proche du formalisme de **polynomial extrapolation** : reduced rank extrapolation method (Eddy, 1979) retrouvé pour $Z_n^i = \delta X_{n+i-1}$
- Pour $Z_n^i = \delta X_{n-i}$: idée de base de la **méthode d'Anderson**

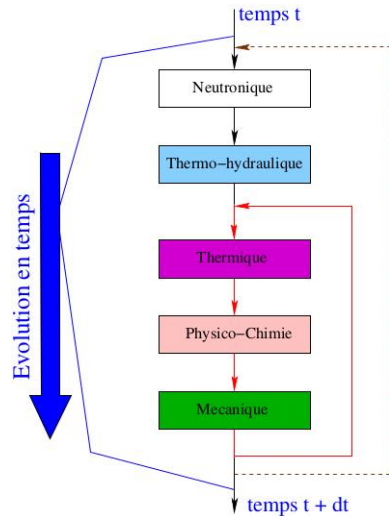
Ramière et Helfer, CAMWA, 2015

LA SIMULATION MULTI-PHYSIQUE DE L'ÉLÉMENT COMBUSTIBLE



Formalisme générique pour les suites vectorielles

- ▶ Accélération dynamique des itérations de point fixe :
 - 2 suites $(X_n)_n$ (accélérée) et $(F(X_n))_n$ (standard) sont générées
 - 2 grands formalismes de méthodes dynamiques basées sur les résidus sont disponibles : méthodes des suites croisées et méthodes des suites alternées
- ▶ Exemple : méthodes dynamiques à 1 pas (transposable au cas multi-pas)



Formalisme générique pour les suites vectorielles

► Accélération dynamique des itérations de point fixe :

- 2 suites $(X_n)_n$ (accélérée) et $(F(X_n))_n$ (standard) sont générées
- 2 grands formalismes de méthodes dynamiques basées sur les résidus sont disponibles : méthodes des suites croisées et méthodes des suites alternées

► Exemple : méthodes dynamiques à 1 pas (transposable au cas multi-pas)

Crossed sequences method

$$Y_n = F(X_{n-1}) - \sum_{i=1}^M \lambda_n^i Z_n^i$$

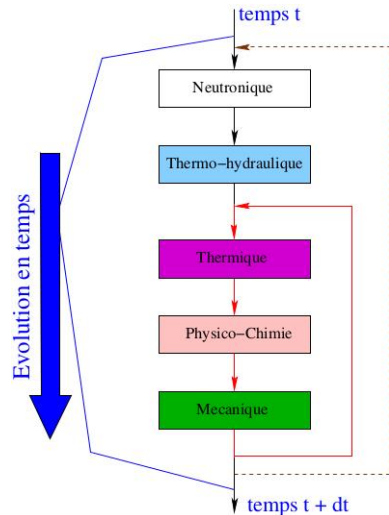
$$Y_{n+1} = F(X_n) - \sum_{i=1}^M \lambda_n^i Z_{n+1}^i$$

- Se focalise sur la suite de point fixe standard $(F(X_n))_n$
- Tient généralement compte de $(X_n)_n$ dans la définition de Z_n^i
- Pour $Z_n^i = F(X_{n-i}) - X_{n-i}$ et $M = 1$: sécante vectorielle standard (dynamic relaxation) et Irons and Tuck si méthode à 2 pas.

Sécante vectorielle standard appelée par la suite « crossed-secant »

$$X_{n+1} = F(X_n) - \frac{(F(X_n) - F(X_{n-1})) \cdot (\Delta X_n - \Delta X_{n-1})}{\|\Delta X_n - \Delta X_{n-1}\|^2} \Delta X_n$$

Voir Ramière et Helfer, CAMWA, 2015



Formalisme générique pour les suites vectorielles

► Accélération dynamique des itérations de point fixe :

- 2 suites $(X_n)_n$ (accélérée) et $(F(X_n))_n$ (standard) sont générées
- 2 grands formalismes de méthodes dynamiques basées sur les résidus sont disponibles : méthodes des suites croisées et méthodes des suites alternées

► Exemple : méthodes dynamiques à 1 pas (transposable au cas multi-pas)

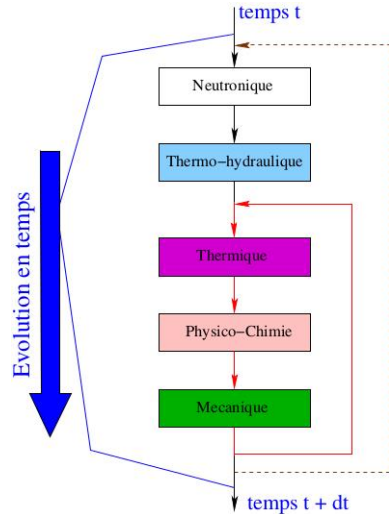
Alternate sequences method

$$Y_n = X_n - \sum_{i=1}^M \lambda_n^i Z_n^i$$

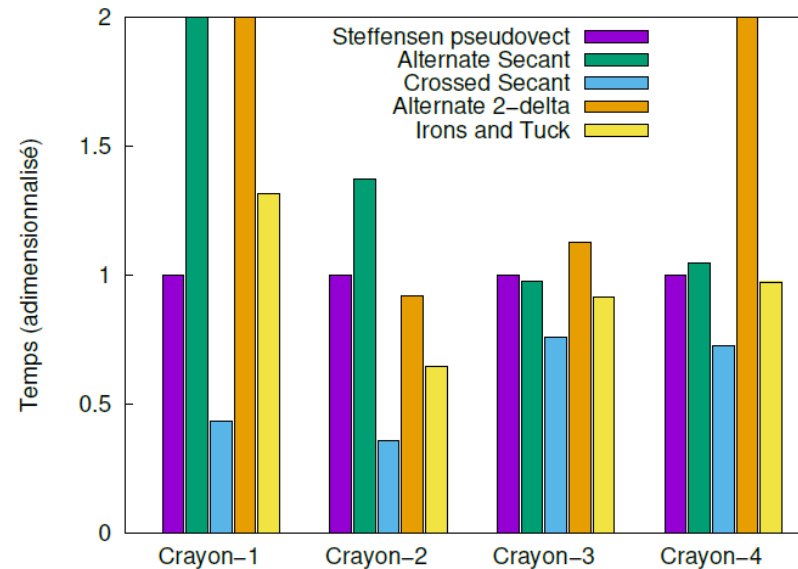
$$Y_{n+1} = F(X_n) - \sum_{i=1}^M \lambda_n^i Z_{n+1}^i$$

- Y_n contient uniquement des éléments $(X_n)_n$ alors que Y_{n+1} dépend uniquement de $(F(X_n))_n$
- Ainsi δY_n est une combinaison linéaire des résidus de point fixe $(F(X_n) - X_n)$ avec des coefficients identiques à ceux de la suite $(Y_n)_n$ (cf. λ_n^i).
- Pour $Z_n^i = X_{n-i+1} - X_{n-i}$ et $Z_{n+1}^i = F(X_{n-i+1}) - F(X_{n-i})$: Anderson method.

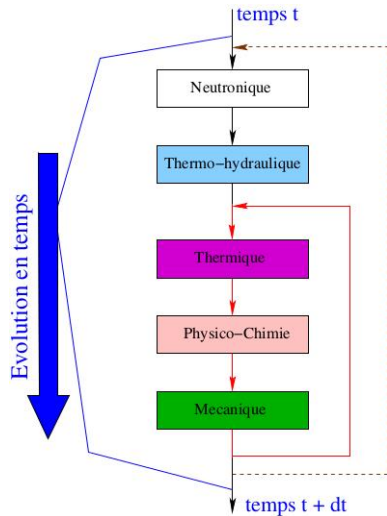
LA SIMULATION MULTI-PHYSIQUE DE L'ÉLÉMENT COMBUSTIBLE



■ Système local multiphysique de PLEIADES ($d \simeq 50 \times 30$ tranches)



« Crossed secant » la plus efficace / autres propositions
S'avère aussi efficace en cas de divergence du point fixe classique



En conclusion :

- mise en œuvre de la « crossed-secant » dans nos simulations
- Choix conforté par des expériences numériques

Reste à expliquer ces résultats / constats par des résultats théoriques sur les questions ouvertes suivantes :

1. **Régularité de la transformation** ($Y_n \rightarrow X$)
2. **Ordre de convergence** des approches basées sur résidu point fixe (~ 1.6 , cf. sécante scalaire)
3. **Comportement monotone décroissant** des approches alternées
4. **Comportement convergent** de l'approche sécante croisée en cas de divergence des itérations de point fixe

Contact : isabelle.ramiere@cea.fr

Conclusions sur cet aspect

- Un problème intrinsèquement multi-physiques
- S'appuie sur un solveur éléments finis (CAST3M)
=> Développement en cours d'un nouveau solveur HPC
- Résolution du couplage par méthodes itératives
=> Optimisation de ces méthodes, questions théoriques ouvertes
- Capitalisation dans un logiciel de référence, ALCYONE
- Forte connexion aux base de données (CRACO)



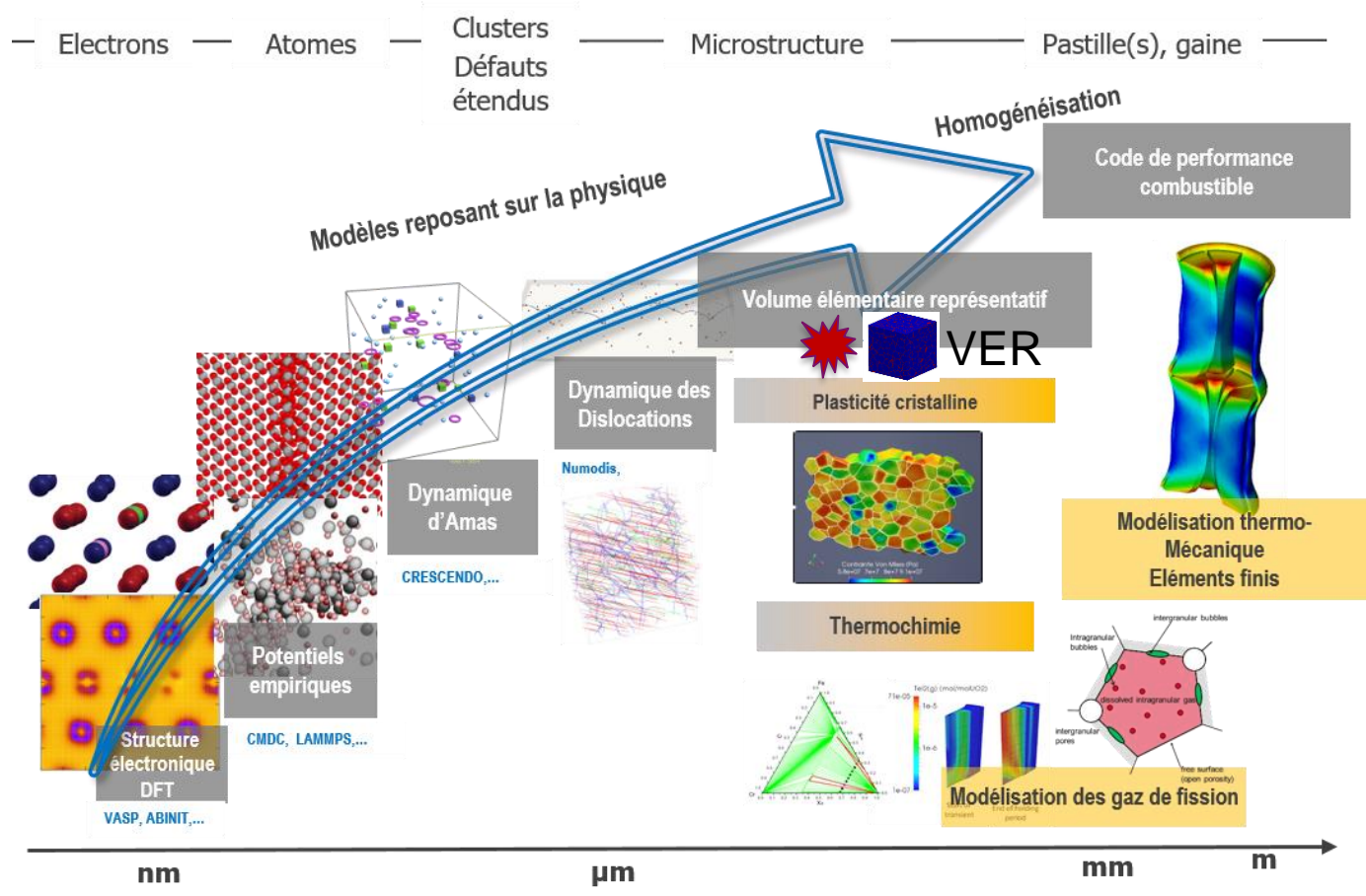
Extensions : Stockage, Entreposage et Fabrication

Application à d'autres éléments combustibles

- GERMINAL : Les réacteurs de IV^{ème} génération (filière RNR-Na)
- MAIA : les réacteurs expérimentaux (RJH)
- LICOS : géométries non standards (conception)



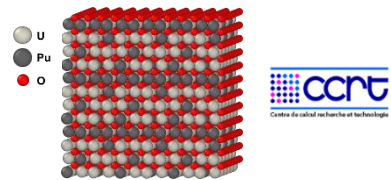
LA SIMULATION MULTI-ÉCHELLE DE L'ÉLÉMENT COMBUSTIBLE



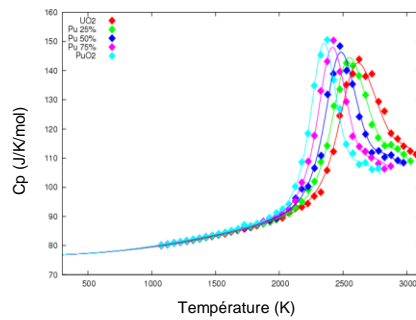
LA SIMULATION MULTI-ECHELLE DE L'ÉLÉMENT COMBUSTIBLE, ILLUSTRATION

Des lois de comportement utilisées à l'échelle de la pastille sont aujourd'hui élaborées grâce aux études réalisées aux petites échelles :

Simulations à l'échelle des atomes :



Propriétés thermodynamiques



Modélisation :

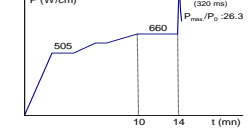
Loi formatée pour les codes de performance

$$C_p(T, y) = (A + y P_{HL}) \left[\prod_{i=1}^3 L_i(T, y) + \sum_{i=1}^2 G_i(T, y) + G_3(T) + A_0 \right]$$

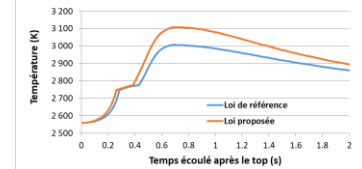


Simulation d'un essai CABRI

Application : Germinal



Température au bord du trou central - Essai E5

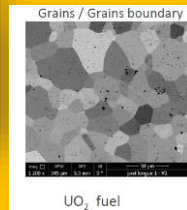
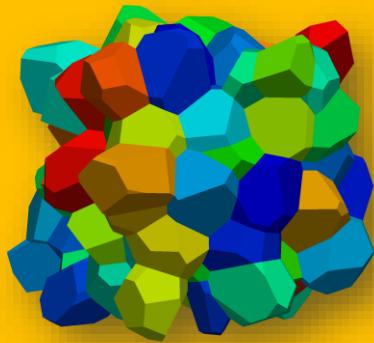
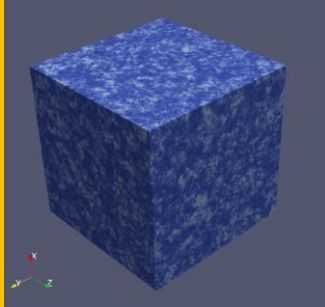


HPC
(Projet Exascale)

Machine Learning
(Focus Jumeau Numérique)

Matériaux à grand nombre de phases

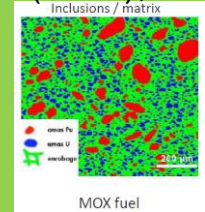
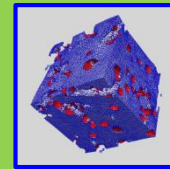
A. El-Abdi (2021)



UO₂ fuel

Pacull (2010), J. Soulacroix (2014),
E. Portelette (2018)

S. Roussette (2005), V. Blanc (2009), R. Largenton (2012),
B. Seck (2018), C. Esnoul (2018), V. Gauthier (2021),
L. Belgrand (2023)

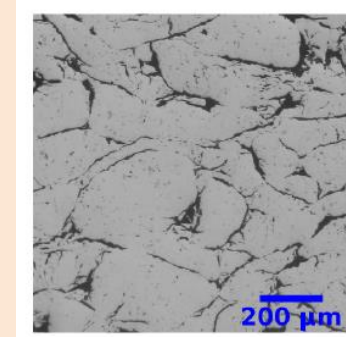
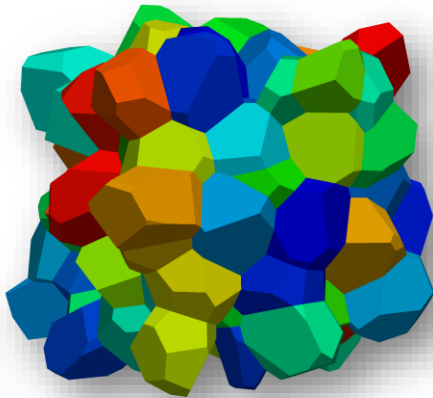
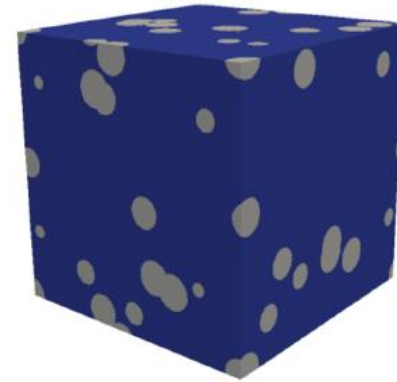
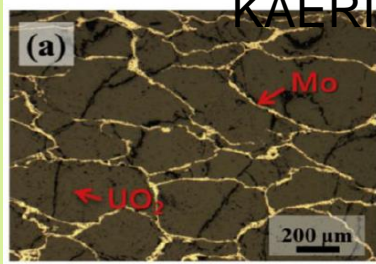


Matériaux particulières (qq phases)

Logiciel dédié : MÉROPE

LA SIMULATION MULTI-ÉCHELLE DE L'ÉLÉMENT COMBUSTIBLE : LA MICROSTRUCTURE

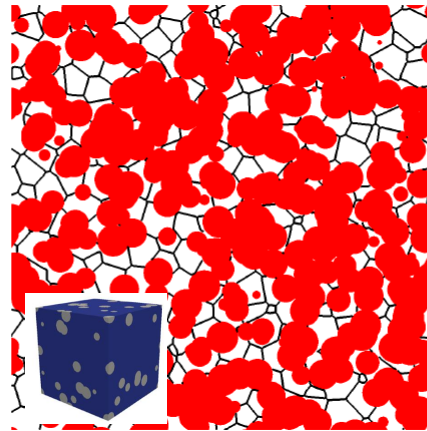
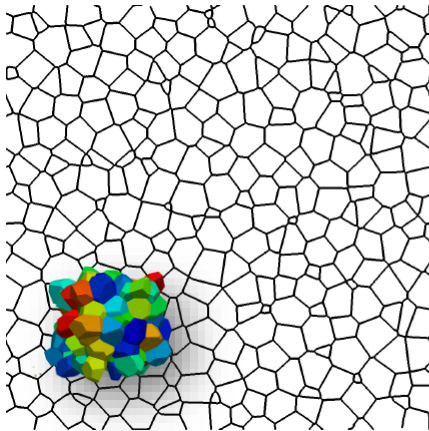
Innovation combustible (EATF) / micro-cellulaires



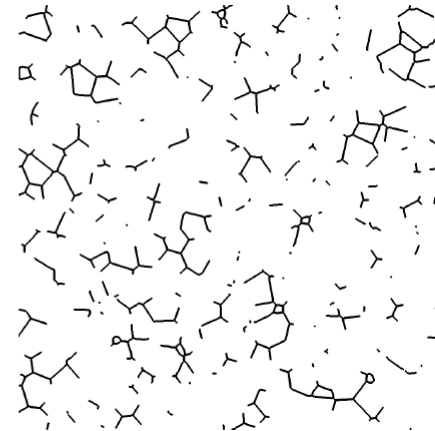
Combustible UO₂ non standards
Meynard (2019), Moutin (2023)

LA SIMULATION MULTI-ÉCHELLE DE L'ÉLÉMENT COMBUSTIBLE : LA MICROSTRUCTURE

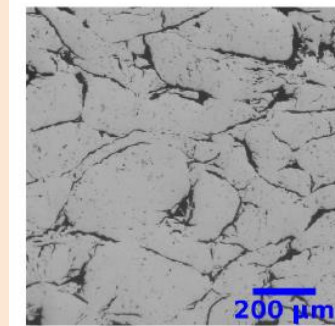
Dispersion de sphères



Intersection



Tessellation de Voronoï
Tirage des germes : RSA

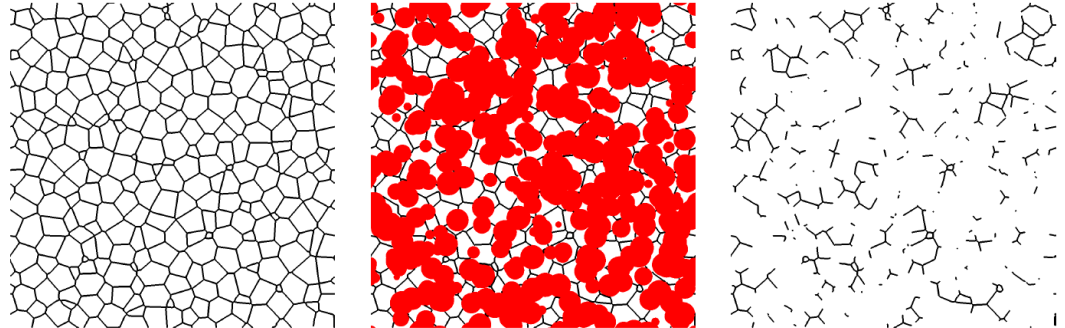


Combustible UO₂ non standards
Meynard (2019), Moutin (2023)

LA SIMULATION MULTI-ÉCHELLE DE L'ÉLÉMENT COMBUSTIBLE : LA MICROSTRUCTURE

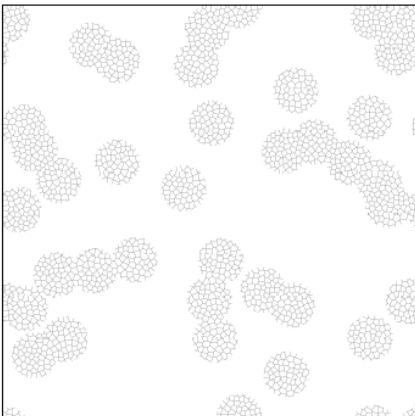
Simulations numériques de microstructures (MÉROPE/PLEIADES)

Génération de microstructures synthétiques

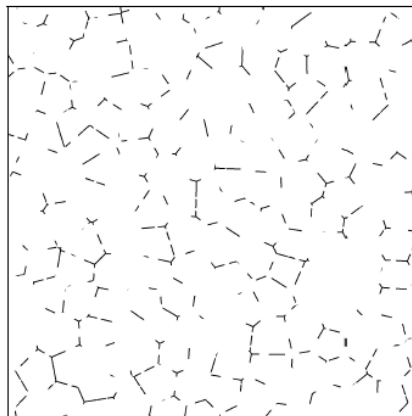


Effet du rapport de taille

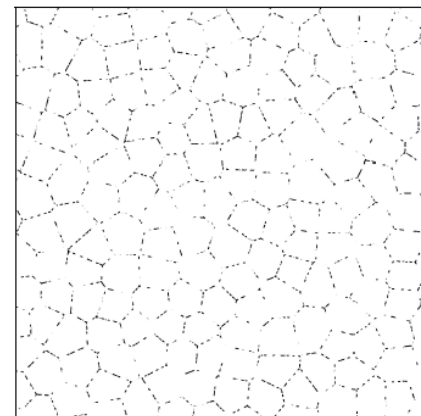
$$R_d \gg R_g$$



$$R_d \sim R_g$$



$$R_d \ll R_g$$



Meynard, J. Mech. Physics of Solids, 2022 / Collaboration Laboratoire Navier (ENPC)

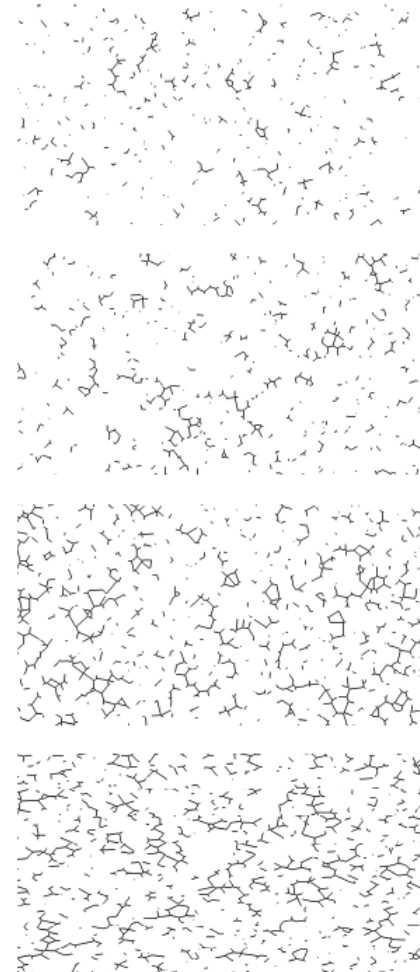
LA SIMULATION MULTI-ÉCHELLE DE L'ÉLÉMENT COMBUSTIBLE : LA MICROSTRUCTURE

Simulations numériques de microstructures => optimisation (Nd,Rd,Rg)

Céramiques réelles



Virtuelle



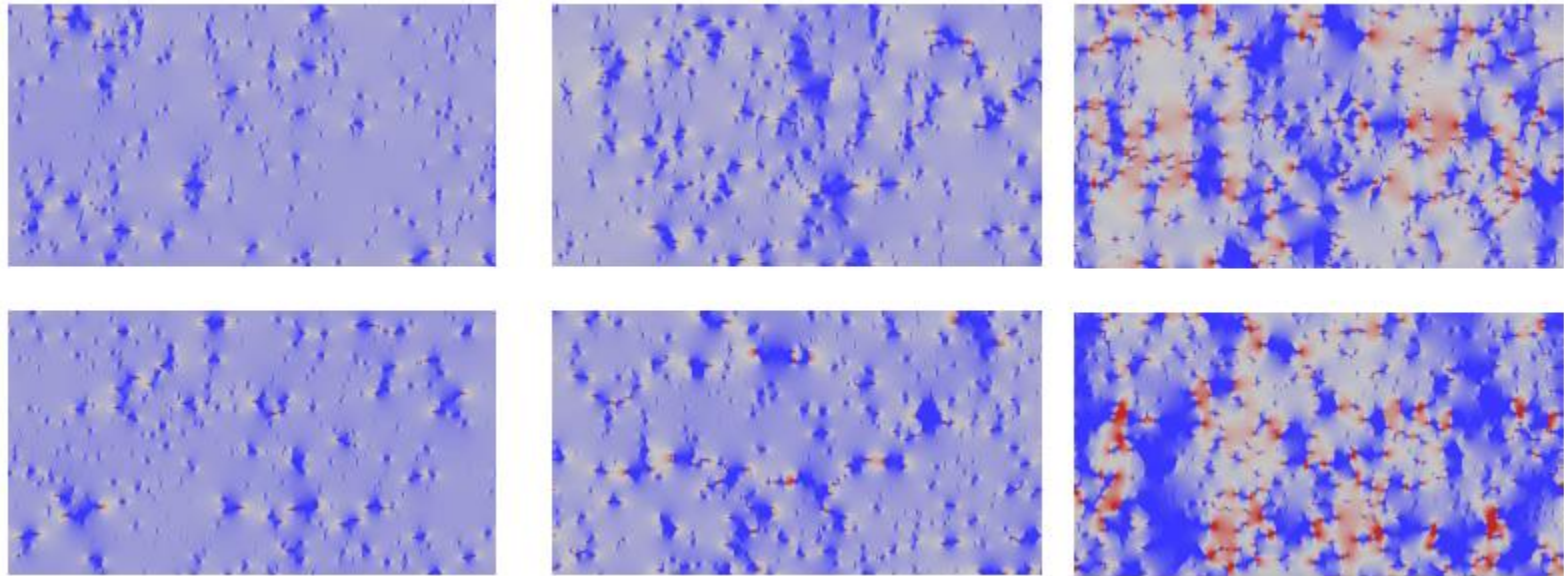
LA SIMULATION MULTI-ÉCHELLE DE L'ÉLÉMENT COMBUSTIBLE : LA MICROSTRUCTURE

Simulations numériques de microstructures => optimisation (Nd,Rd,Rg)

Simulation en thermique stationnaire, calculs 2D, méthode FFT

Comparaison des cartes de flux normalisées (bleu foncé \Leftrightarrow flux quasiment nul)

Céramiques réelles



Gradient thermique
↓

Virtuelle

Accident par Perte du Refroidissement Primaire

Forte densité linéique de chaleur

Même si réacteur à l'arrêt (puissance résiduelle)

Importance du maintenir le refroidissement du cœur (systèmes de sécurité)

Combustibles « froids »

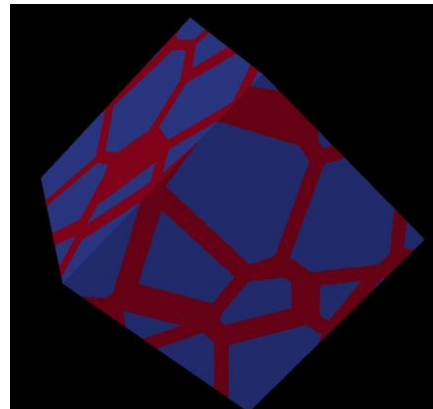
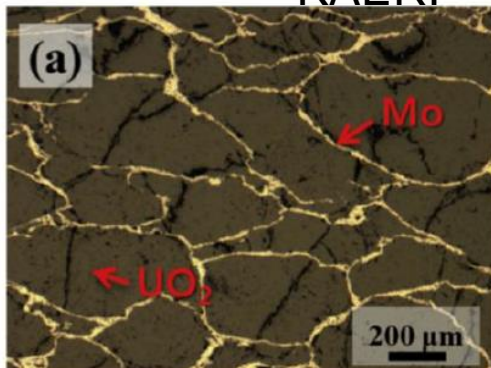
Améliorer significativement la conductivité des combustibles

De façon à diminuer l'enthalpie stockée dans le combustible

Et donc moins de chaleur à évacuer au moment de l'accident

Plusieurs concepts en développement

KAERI



Simulations « VER »

Etudes paramétriques => recherche automatique d'optimum

■ Travaux en cours (doctorat) visant à optimiser la géométrie macro- et microscopique du combustible :

- Multi-Physique (thermique, mécanique,...)
- Fonctionnement du combustible en situation nominale et accidentelle

■ Méthodologie : utilisation de méthodes d'optimisation de forme

■ Travaux théoriques envisagés :

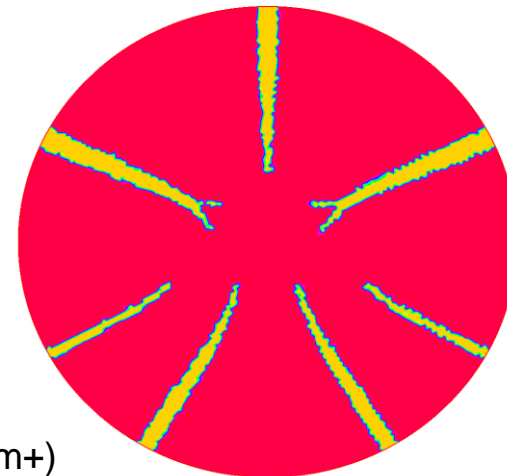
- Algorithmes de transfert vers la fabricabilité, et déshomogénéisation
- Structures aléatoires
- Améliorations algorithmiques (méthodes mixtes topologiques/level-set plus efficaces)

Université de Nice

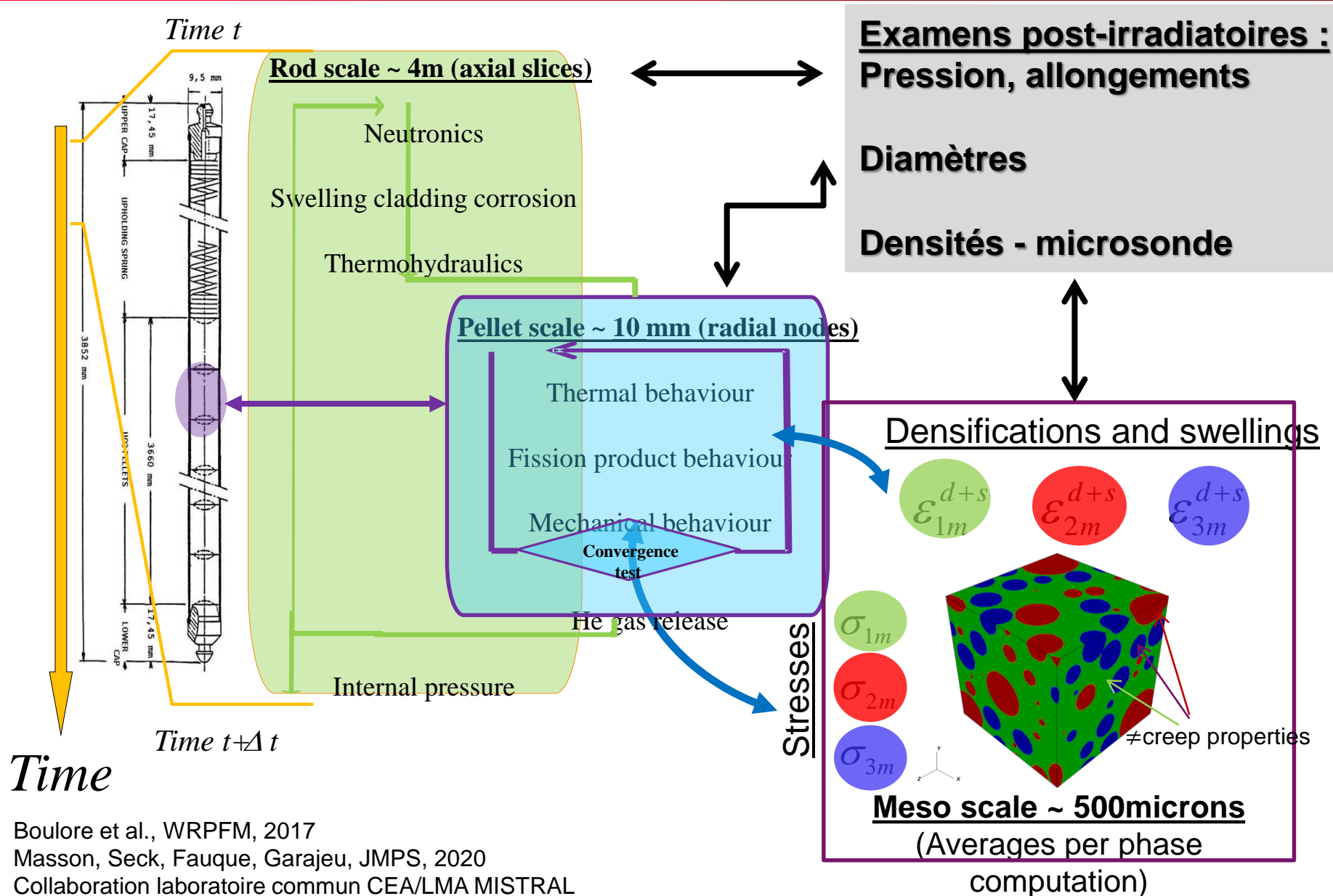
Laboratoire J.-A. Dieudonné

Olivier Pantz

Contact : marc.josien@cea.fr



La mécanique des structures jusqu'à l'échelle du matériau



La simulation de l'élément combustible des REP est multi-physique

Des outils logiciels spécifiques sont développés au CEA (PLEIADES)
Pour chaque physique : problème bien souvent non linéaire
Méthodes numériques spécifiques / résolution du problème multi-physique => des questions théoriques ouvertes

mais également multi-échelle

Calculs atomistiques, microstructures, ...
Calcul et optimisation des microstructures / Innovation
Des simulations couplées à différentes échelles : du mètre à la dizaine de microns dans le cas des MOX