Sujet de thèse 2023

Modélisation du comportement élasto-plastique du système $(U,Pu)O_2$ pour la simulation de la mise en forme de combustibles

SIFCO/Pmg

Le procédé de fabrication des pastilles de combustible nucléaire à base de Mélange d'OXydes MOX est composé de trois étapes principales, le co-broyage des poudres, la mise en forme par pressage uniaxial et le frittage. L'étape de pressage de référence consiste en la mise en forme des combustibles crus par compression uniaxiale « double effet » en matrice asservie en déplacement à partir d'un milieu granulaire dont le comportement rhéologie et la compressibilité sont fonction des caractéristiques des matériaux de base, des compositions et du comportement du mélange ainsi que des paramètres de pressage jusqu'à l'obtention de la pastille crue.

La simulation de la mise en forme par la méthode aux éléments finis (FEM) est dédiée au comportement macroscopique des poudres en comparaison de la méthode discrète spécifiquement utilisée pour l'analyse microscopique ou mésoscopique.

Les simulations FEM sont particulièrement utilisées pour les besoins de production industrielle et pour un laboratoire de recherche comme le LN0 travaillant à plus petite échelle. Les études FEM se font à l'échelle de la pastille permettant de prendre en compte et d'optimiser les cycles de pressage afin de minimiser les gradients de densité permettant de maitriser les retraits après frittage. Si le cycle de frittage est l'étape ultime où le comportement thermique est étudié, il est néanmoins tributaire de l'histoire de la poudre et de la pastille crue. Il est alors possible de transmettre ces cartes de densité obtenues numériquement et par mesures in-situ. Les simulations permettent aussi de prendre en compte le comportement rhéologique de la poudre (morphologie, granulométrie, fluidité, cohésion…etc). Elles permettent de prédire la dimension des combustibles à fabriquer en fonction des critères de fabrication imposés afin d'éviter les rectifications, de dimensionner les outillages selon les programmes, manager les endommagements et les défauts dans les pastilles.

Lors des simulations FEM, on étudie le comportement macroscopique de la poudre et on considère celle-ci comme une entité continue. De ce fait, certaines physiques ne sont pas prises en compte ou en tous cas que de façon globale. Comme les poudres sont des assemblages d'agglomérats, on utilise les éléments discrets afin de pouvoir prendre en compte les interactions inter-agglomérats (échelle mésoscopique, taille du Volume Elémentaire Représentatif VER) et intra-agglomérat (échelle microscopique) où les ruptures inter-agrégats ont lieu. La thèse s'inscrit donc dans une démarche multi-échelles afin de prendre en compte plus de phénomènes physiques. Elle correspond au domaines de la mécanique des matériaux et du numérique. Des expérimentations en milieu actif $(U,Pu)O_2$ sont envisagées dans les laboratoires de l'installation Atalante du CEA Marcoule. Les codes de calculs utilisés comme Rockable (DEM), Abaqus, Licos (FEM), nécessiteront des codages pour des physiques pas toujours implémentées (lois d'interactions, ruptures quasistatiques…etc).

Le travail de thèse servira à alimenter les lois de comportements sur matériaux actifs de la base de donnée MFront afin de pouvoir réaliser des simulations à partir des modèles élasto-plastiques sur différents codes disponibles sur la plateforme PLEIADE. Pour identifier les paramètres des modèles, des expérimentations comme des compressions en matrice instrumentée, des essais de ruptures axiales et radiales des crus, des essais de rhéologie FT4, de granulo-morphologie, de nano-indentation in-situ sur les pastilles crues, de micro-compressions in-situ sur des agglomérats ainsi que des compressions sur VER en tomographie X ou synchrotron seront post-traités et interprétés afin d'enrichir les modèles de comportement.

L'objectif scientifique est multiple, il concerne à la foi l'obtention de modèles élasto-plastiques pour le système $(U,Pu)O_2$ par optimisation numérique et le data matching dans le but d'intégrer l'influence de la composition en PuO_2 sur les paramètres matériaux, mais aussi l'intégration de la microstructure des agglomérats à l'échelle microscopique pour enrichir les modèles à l'échelle macroscopique.

Planning prévisionnel du déroulement de la thèse :

Etude bibliographique, prise en main des outils de calcul	t0 à t4 mois
Expérimentations, post-traitements Etudes microscopiques et mésoscopiques DEM (publication, congrès France)	t4 à t16 mois
Modélisations macroscopiques, implémentations (Abaqus , MFront) Simulations FEM via MFront (Abaqus, Licos) (publication, congrès UE)	t16 à t28 mois
Optimisations & rédaction mémoire (publication, congrès International)	t28 à t36 mois

Moyens expérimentaux : Presse avec matrice instrumentée, module de compression à ruptures axiale et diamétrale sur pastilles crues, -> LN0 (Atalante)
Rhéomètre FT4, morpho-granulomètre, Meb, Indenteur HSR, essais de µcompressions in-situ -> L26 et L7 (Atalante)

Moyens numériques : Plateforme cluster CeresIII, Codes Abaqus, Rockable,
Langages C++, Python, SE Linux
Plateforme PLEIADE (MFRONT, Licos, collaboration SESC Cadarache)

Perspectives : Jumeau numérique pressage
Couplage Pressage-frittage

Profil recherché : Le profil recherché est un ingénieur grandes écoles mécanique-matériaux avec un intérêt particulier et/ou compétences pour les outils numériques (FEM, DEM, CFD) et langages (C++, Python, Matlab)

Direction de la thèse : Guillaume BERNARD-GRANGER (CEA/ISEC)
Co-encadrement : J-Ph BAYLE (CEA/ISEC)
Adrien SOCIE, Thomas HELFER (CEA/IRESNE)

La portée de cette thèse sera significative car il existe peu de résultats ou de publications dans la littérature ouverte sur les lois de comportement de la mise en forme de poudres à base de plutonium et l'influence de la composition en actinide sur les paramètres des modèles élasto-plastique permettant à l'échelle industrielle de prédire la qualité de fabrication des combustibles.
La démarche numérique multi-échelle est assez nouvelle et demande une maitrise des outils de calculs FEM et DEM dont l'approche est totalement différente avec des codages et l'utilisation de langages très utilisés dans la communauté des numériciens.
De plus, le sens physique demandé pour la compréhension et la prise en compte des mécanismes de céramisation mis en jeux ne manquera pas de consolider les connaissances du futur docteur dans le domaine de la physique du solide.
Le chercheur aura l'occasion d'utiliser des équipements expérimentaux de pointe pour des expérimentations au plus près de la matière nucléaire en boites à gants dans une INB unique en France, sur le centre nucléaire civil de Marcoule.
Avec le développement des lois de comportement issues de la mécanique des milieux continus sur matériaux actifs et leurs implémentations dans le générateur de loi Mfront (https://tfel.sourceforge.net/) en lien avec la plateforme Pleiade (https://www.youtube.com/watch?v=VIKY2gp0FeQ), ce sera pour le candidat, une véritable opportunité de pouvoir s'exprimer objectivement devant les acteurs de la sphère nucléaire comme le Cea, Orano, Edf ou Framatome.

Comme perspectives, la thèse donnera l'occasion au futur docteur d'accroitre le développement des bases de données de fabrication, d'améliorer les modèles et les simulations pour le développement d'un jumeau numérique de presse à coupler avec d'autres jumeaux numériques en cours de développement comme le broyeur en amont ou le four de frittage en aval du procédé de fabrication.

Elasto-plastic behaviour modelling of (U-Pu)O_2 system for fuel shaping simulation

The Mox (Mix oxides) fuel fabrication process is based on three main steps as grinding, pressing and sintering. All devices of each steps are nuclearized in glove box of the LN0 laboratory in Marcoule Atalante facility with the low PuO_2 quantities. The pressing step depends on the powder rheology and characteristics due to the grinding parameters and affect the sintering parameters in order to obtain sintered pellets without defect and with a good shape and size. The Finite Element Method (FEM) simulation for Mox fuel pellet fabrication is crucial for the research of the laboratory because it is a macroscopic study to the scale of the industrial. Moreover, simulation is carried out to optimize press cycles to obtain the best density gradients in the green pellets, which enable to assure homogenised good shrinkage after sintering. Simulation is used to manage pellet damages and defects by means of to obtain good geometry without rectification. Therefore, simulation enable to predict shape pellet in order to fabricate net shape with an optimized pressing process. One of the ultimate goal is to take into account the microstructure of the agglomerates with the microscopic scale study by Discrete Element Method (DEM) in order to include more physic phenomena in the elastic-plastic model use in the macroscopic FEM simulations.
To simulate powder compaction, the identification parameters of the elastic-plastic model include in the FEM code is lead with many experimentations in Atalante nuclear laboratory. Different trials in glove box are used to manage (U,Pu)O_2 model characterization (uniaxial compaction with radial stress measures in die, axial and radial compressions breakage and indentations for density card on green pellet, the FT4 powder rheometer shear cell in glove box, micro-packing compression with X ray tomography and micro-compressions on agglomerates to characterise mechanical agglomerates strength…etc).
One objective of this study is to take into account the influence of the PuO_2 ratio on the model behaviour and the impact of the material law to the simulation balance. Add to that, a possible model optimization will be check for improve model calibration.
This thesis is an experimental and numerical thesis where physic of solid, mechanical, material and numerical skills are required.