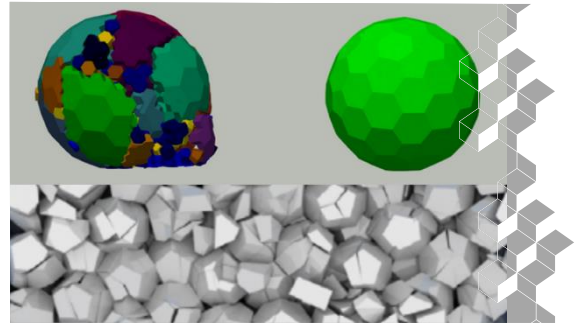


## Métamodèle pour la fragmentation d'un granule d'UO<sub>2</sub> : exploration et intégration à des simulations à plus grandes échelles.



Le procédé de fabrication des combustibles nucléaires est basé sur la métallurgie de poudres. Le pressage ou le pastillage est une étape de ce procédé qui consiste à compacter la poudre (sous forme de granules) pour obtenir des pastilles dites « crues ». A l'échelle des granules, ce processus implique des phénomènes de réarrangement et de fragmentation qui conduisent à la densification du milieu. L'objectif de ce stage est d'explorer le potentiel des métamodèles pour prédire la fragmentation des granules lors des simulations de pressage réalisées par la méthode DEM (Discrete Element Method) dans le but de réduire les temps de calcul.

### Contexte

Ce stage s'inscrit dans un projet dédié à la modélisation multi-échelle du procédé de pressage de poudres. Les outils de calcul scientifique (OCS) développés actuellement pour modéliser ce procédé sont basés sur la méthode des éléments finis (FEM) à l'échelle de la pastille et sur la méthode des éléments discrets (DEM, Discrete Element Method) à l'échelle granulaire. La caractérisation mécanique d'un volume élémentaire représentatif (VER) de poudres par simulation DEM est une étape nécessaire pour prendre en compte les effets de la microstructure sur le comportement macroscopique à l'échelle de la pastille. L'augmentation récente des moyens de calculs et les avancées en terme de modélisation permettent désormais de considérer en DEM le pressage de petits volumes représentatifs avec un nombre limité de particules fragmentables. Cependant ces simulations présentent encore un coût de calcul prohibitif pour un grand nombre de particules et un VER qui évolue avec le degré de fragmentation.

Une possibilité d'optimisation de ces calculs est d'utiliser une approche d'apprentissage automatique (machine learning) pour prédire la fragmentation des particules lors des simulations DEM. Ce type de méthode présente l'avantage d'être rapide à l'exécution mais nécessite une phase d'apprentissage sur des données représentatives du phénomène à reproduire. La substitution du modèle de fragmentation des particules par un métamodèle de ce type dans les simulations DEM nécessite ainsi au préalable l'élaboration d'une base de donnée décrivant entre autres le degré de fragmentation d'une particule et la forme de fragments en fonction des sollicitations et propriétés mécaniques mises en jeu. Dans ce contexte, les données d'apprentissage seront

simulées par un modèle de fragmentation.

### Objectifs

Le premier objectif de ce stage est de constituer une base d'apprentissage à partir de simulation DEM décrivant la fragmentation de particules. L'enjeu associé à la construction de la base de données consistera à identifier et hiérarchiser les différents paramètres impliqués dans le processus de fragmentation et de focaliser l'apprentissage à partir de ceux ayant le plus d'impact sur le degré de fragmentation d'une particule et la forme de fragments. L'idée sera ensuite d'évaluer différents types d'approches pour prédire la fragmentation des particules et de les comparer à des calculs DEM avec des particules fragmentables.

### Étapes du stage

1. Etude bibliographique des méthodes de simulation et des lois de comportement pour un milieu granulaire soumis à une compaction et revue des différentes approches de type machine learning adaptées dans ce contexte (Artificial Neural Networks, Random Forests, Mixture of Experts, etc.).
2. Construction à l'aide d'une méthode DEM d'une base d'apprentissage décrivant la fragmentation d'une particule. Evaluation des caractéristiques pertinentes par une analyse de sensibilité.
3. Evaluation de différentes approches et comparaison avec simulations DEM avec particules fragmentables.

### ■ Formation souhaitée :

Ecole d'Ingénieur ou MASTER bac +5, avec dominante en modélisation, méthodes numériques, machine learning.

### ■ Durée du stage :

5 à 6 mois

### ■ Méthode/logiciel(s):

Méthode d'apprentissage automatique, C++, Python.

### ■ Mots clés :

Milieux granulaires, métamodèle, modélisation mécanique, simulation numérique.

### ■ Possibilité de thèse :

oui

### ■ Contact :

**TOPIN Vincent**  
vincent.topin@cea.fr

AMARSID Lhassan  
lhassan.amarsid@cea.fr

BRUYELLE Jérémie  
jeremie.bruyelle@cea.fr