

UNIVERSITE D'AIX-MARSEILLE

CEA CADARACHE

ECOLE DOCTORALE 353

Institut Universitaire des Systèmes Thermiques Industriels (IUSTI)

LABORATOIRE DE SIMULATION DU COMBUSTIBLE

Thèse présentée pour obtenir le grade universitaire de docteur

Discipline : ED 353 – Science pour l'ingénieur : Mécanique, Physique, Micro et Nanoélectronique

Spécialité : Mécanique des Solides

Mourad TEMMAR

SIMULATION MULTIPHYSIQUE DU PHÉNOMÈNE DE
RATTRAPAGE DU JEU PASTILLE GAINÉ DANS LES AIGUILLES
COMBUSTIBLES DES RÉACTEURS À NEUTRONS RAPIDES

Soutenue le 09/12/2019 devant le jury :

| | | |
|------------------|---------------------------------------|-----------------------|
| Frédéric DUFOUR | Enseignant/Chercheur, INP de Grenoble | Rapporteur |
| Serge KRUCH | Directeur de Recherche, ONERA | Rapporteur |
| Solene GICQUEL | Responsable laboratoire, EDF-R&D | Invité |
| Arnaud LONGUET | Ingénieur/Chercheur, SAFRAN, Snecma | Examinateur |
| Nicolas FAVRIE | Maitre de conférence, IUSTI | Directeur de thèse |
| Bruno MICHEL | Directeur de Recherche, CEA Cadarache | Co-Directeur de thèse |
| Isabelle RAMIÈRE | Ingénieur/Chercheur, CEA Cadarache | Encadrante |

Numéro national de thèse/suffixe local : 2019AIXM0611/038ED353

RÉSUMÉ

Le cadre de cette thèse porte sur la modélisation du comportement thermomécanique sous irradiation du combustible des réacteurs à neutrons rapides (RNR). Plus particulièrement, le but de cette thèse est d'améliorer la compréhension et la modélisation des phénomènes responsables du rattrapage du jeu séparant initialement le combustible de la gaine qui l'entoure. Une simulation réaliste du phénomène de rattrapage de jeu permet de mieux évaluer la température du combustible, grandeur cruciale pour garantir le respect du critère de non-fusion du combustible.

Dans un premier temps, les phénomènes responsables du rattrapage du jeu combustible-gaine sont identifiés. À partir d'observations expérimentales, nous identifions que la réduction de taille du jeu combustible-gaine semble être liée principalement à deux phénomènes: le premier, déjà connu dans la littérature, est l'effet de la fragmentation du combustible et le second, peu décrit dans les modèles existants, est relié au phénomène de migration des porosités fermées (fabrication) et ouvertes (fissures) menant à la formation du trou central (observée dans les combustibles RNR) et à la guérison partielle des fissures créées lors de la première montée en puissance. À l'aide de simulations, l'impact de ces deux phénomènes a pu être représenté et une analyse quantitative confirme la nécessité de les prendre en compte.

Dans un deuxième temps, à partir des résultats obtenus avec les simulations 3D, une formulation 1D permettant de représenter ces deux phénomènes est proposée. Le rattrapage du jeu combustible-gaine est simulé à l'aide d'une déformation anélastique dite de délocalisation et la migration des porosités est représentée par l'équation d'advection. Cette formulation est ensuite implémentée dans le schéma de calcul multi-physique du code de calcul 1D RNR GERMINAL. L'objectif est de remplacer la déformation anélastique empirique de délocalisation utilisée jusqu'à présent dans GERMINAL. Grâce à ces nouveaux développements, la simulation du rattrapage du jeu combustible-gaine ainsi que l'évaluation de la température du combustible, sont en meilleure adéquation avec les résultats expérimentaux. Le nouveau modèle 1D a une justification physique complète et par conséquent, est plus prédictif.

Dans notre modélisation 1D, nous avons fait l'hypothèse que la vitesse de migration des porosités fermées (pores de fabrication) et ouvertes (fissures) était identique. Or dans la littérature, seule la vitesse de migration des porosités fermées a été évaluée. Notre hypothèse

reste donc à être validée. Une contribution à cette validation est proposée avec une analyse 2D des mécanismes de transfert de matière par évaporation condensation au voisinage des surfaces libres créées par les fissures. L'équation de transfert de chaleur et de migration de porosité sur un modèle 2D d'un fragment de combustible est résolue, puis les volumes moyens transférés par les porosités sont comparés dans un cas où il n'y a que les porosités fermées et dans l'autre, où il y a uniquement des porosités ouvertes pour une même durée donnée et pour une porosité initiale totale identique.

Ce travail a été réalisé dans le cadre d'un programme coopératif entre le CEA, FRAMATOME et EDF, dévoué au développement des éléments combustibles pour les Réacteurs de GENIV.

Mots clés : Modélisation multi-physiques, Mécaniques, Migration de porosité, Couplage code, Comportement de l'aiguille combustible sous irradiation

ABSTRACT

This thesis takes place within the framework of modeling sodium fast neutron reactor fuel (SFR) thermomechanical behavior under irradiation. We focus on the comprehension and modeling the phenomena responsible of the closure of the gap, separating initially the fuel from its surrounding cladding. A realistic simulation of the gap closure phenomenon leads to a better evaluation of the fuel temperature, which is of the first importance to meet the fuel non-fusion criterion requirement.

Firstly, phenomena responsible of the fuel-to-cladding gap closure are identified. From experimental observations, we can identify that the size reduction of the fuel-to-cladding gap seems to be mainly related to two phenomena. The first one, already known in the literature, is the effect of fuel fragmentation. The second one, so far poorly described in existing models, is related to the migration phenomenon of closed (manufacturing) and open (cracking) porosities leading to the central hole formation (observed in SFR fuels) and partial healing of cracks created during the first power increase. Thanks to 3D simulations, the impact of these two phenomena is represented and a quantitative analysis confirms they need to be taken into account.

In a second step, a 1D formulation derived from 3D simulations is proposed. This formulation includes the two identified phenomena. The fuel-to-cladding gap closure is simulated by an inelastic strain called relocation strain while the porosities migration is modeled through an advection equation. This formulation is then implemented in the multiphysics computation scheme of the GERMINAL SFR 1D software. The main objective is to replace the empirical inelastic relocation strain used until now in GERMINAL. Thanks to these new developments, the simulation of the fuel-to-cladding gap closure as well as the evaluation of the fuel temperature, are in better agreement with the experimental results. The new 1D model has a complete physical justification and is therefore more predictive.

In our 1D modeling, we have assumed that the migration velocities of the closed (manufacturing pore) and open (crack) porosities are the same. However in the literature, only the closed porosity migration velocity has been evaluated. Our hypothesis therefore remains to be validated. A contribution to this validation is proposed with a 2D analysis of the evaporation condensation transfer mechanism near the free surfaces created by cracks. This analysis consists in solving heat transfer and porosity migration on a 2D representation of a fuel

fragment and then comparing the average volumes transferred by the porosities in a case where there are only closed porosities and in the other case where there are only open porosities for a given time and for an identical total initial porosity.

This work has been done within the framework of a cooperative program between CEA, FRAMATOME and EDF, devoted to the development of the fuel elements for GENIV Reactors.

Keywords : Multiphysics modelling, Mechanics, porosity migration, Code coupling, Fuel pin behaviour under irradiation

REMERCIEMENTS

L'étude présentée dans ce mémoire a été réalisée dans le cadre d'un contrat de thèse CEA au sein du Laboratoire de Simulation du Comportement du Combustible, en partenariat avec le Laboratoire IUSTI de l'Université d'Aix-Marseille. Je remercie l'ensemble des chefs de ces différentes unités pour leur accueil. Cette thèse a fait partie d'un projet tripartite entre le CEA, AREVA et EDF dédié au développement des éléments combustibles pour les Réacteurs à Neutrons Rapides à caloporteur sodium de génération IV. Je remercie les différents partenaires pour leur participation au financement de ma thèse.

Mes sincères remerciements vont à Bruno MICHEL et Isabelle RAMIERE, qui ont encadré cette thèse au CEA et sans qui ce travail n'aurait pas pu aboutir. Bruno je te remercie pour tes explications de hautes qualités et pour cette confiance que tu m'as accordée durant ces trois années de thèse. Isabelle, que dire, la « MAMA de l'équipe », tes conseils, ta rigueur et tes capacités d'analyse ont été très utiles pour l'avancement de mes travaux. Je remercie aussi Nicolas FAVRIE pour avoir dirigé cette thèse. Nicolas je te remercie pour tes conseils avisés et ta bonne humeur. Mon seul regret est de n'avoir pas pu échanger davantage avec toi durant ces trois années.

Je tiens à aussi à remercier tous les membres de la dream team GERMINAL composée de Michel PELLETIER, Marc LAINET, J-C. DUMAS, Victor BLANC et tous les autres pour les réponses que vous avez pu apporter à mes questions. Michel PELLETIER, je te souhaite une excellente retraite, tu le mérites amplement après tout ce que tu as pu réaliser durant toutes ces années au CEA.

Pour l'honneur qu'ils m'ont fait en acceptant d'être les rapporteurs de cette thèse, je remercie Serge KRUCH, Directeur de Recherche à l'ONERA et Frédéric DUFOUR, professeur à l'INP de Grenoble et président du jury. Ma reconnaissance va aussi à Arnaud LONGUET et Solene GICQUEL pour avoir accepté d'être membre du jury. Leurs remarques et leurs questions furent très pertinentes.

Pour les moments de fous rires, je suis obligé de remercier la team ETM « Etienne, Thomas et Marcel », avec qui j'ai bien rigolé et qui ont rendu encore plus agréable mes trois années de thèse. Je voudrais remercier par la même occasion la soccer team SESC, avec qui j'ai passé de très bons moments.

Mes sincères remerciements aux secrétaires exceptionnelles du SESC, particulièrement Régine BOUSQUET qui m'a accompagné du début jusqu'à la fin de ma thèse. Merci Régine pour ta gentillesse et ta bonne humeur.

Je tiens enfin à remercier Dieu de m'avoir donné une famille merveilleuse qui m'a permis d'arriver là où je suis aujourd'hui.

TABLE DES MATIÈRES

| | |
|---|----|
| RÉSUMÉ..... | 3 |
| ABSTRACT | 5 |
| REMERCIEMENTS | 7 |
| TABLE DES MATIÈRES..... | 9 |
| INTRODUCTION GÉNÉRALE | 14 |
| CHAPITRE I : CONTEXTE DE L'ETUDE – BIBLIOGRAPHIE | 18 |
| I.1 CONTEXTE GÉNÉRAL | 21 |
| I.1.1 Les réacteurs à neutrons rapides refroidis au sodium | 22 |
| I.1.1.1 Principe de fonctionnement d'un réacteur à neutron rapide refroidi au sodium | 24 |
| I.1.1.2 L'aiguille combustible | 26 |
| I.1.2 Comportement de l'aiguille combustible durant l'irradiation [Bailly 96] | 27 |
| I.1.2.1 Le comportement du combustible | 28 |
| I.1.2.2 Le comportement de la gaine | 29 |
| I.1.2.3 Modélisation et simulation du comportement multi-physique de l'aiguille combustible | 30 |
| I.2 MODELISATION DU RATTRAPAGE DU JEU COMBUSTIBLE-GAINE..... | 34 |
| I.2.1 Impact de la taille du jeu combustible-gaine sur le comportement de l'aiguille combustible | 34 |
| I.2.2 Phénomènes responsables du rattrapage du jeu combustible-gaine et les modèles actuels les simulant..... | 35 |
| I.2.2.1 Dilatation thermique | 35 |
| I.2.2.2 Gonflement solide et gazeux | 37 |
| I.2.2.3 Fragmentation du combustible | 41 |

| | | |
|--|--|----|
| I.3 | PHENOMENE DE RESTRUCTURATION DU COMBUSTIBLE | 46 |
| I.3.1 | Pores de fabrication..... | 47 |
| I.3.1.1 | Comportement et mécanismes de transport des pores de fabrication | 47 |
| I.3.1.2 | Cinétique de migration des pores de fabrication | 50 |
| I.3.1.3 | Modèle de restructuration développé dans les codes actuels RNR “1D½” | 55 |
| I.3.2 | Les fissures | 57 |
| I.3.2.1 | La guérison des fissures | 58 |
| I.3.2.2 | Cinétique de migration de volume induit par les fissures | 59 |
| I.3.2.3 | Modèle existant dans les codes “1D½”pour représenter la guérison des fissures | 59 |
| | | |
| CHAPITRE II : SIMULATION 3D ET ANALYSE DES DIFFERENTS MÉCANISMES DE RATRAPAGE DE JEU | | 63 |
| II.1 | PROPOSITION D’UN NOUVEAU MECANISME DE RATRAPAGE DE JEU ET MODELISATION..... | 65 |
| II.1.1 | Identification d’un nouveau phénomène de rattrapage de jeu..... | 66 |
| II.1.2 | Mécanisme représentant l’impact du transfert de masse lié à la formation du trou central sur la délocalisation des fragments. | 67 |
| II.2 | SIMULATION 3D DES PHENOMENES RESPONSABLES DU RATRAPAGE DU JEU COMBUSTIBLE-GAINE | 68 |
| II.2.1 | Simulation 3D..... | 68 |
| II.2.2 | Géométrie, conditions limites et maillage..... | 69 |
| II.2.3 | Schéma de couplage physico-chimiques et thermomécaniques | 71 |
| II.2.4 | Modèles thermomécaniques | 74 |
| II.2.4.1 | Modèle thermique..... | 74 |
| II.2.4.2 | Modèle mécanique..... | 75 |
| II.2.5 | Initialisation du pas de temps : délocalisation du combustible par transfert de masse | 77 |
| II.2.5.1 | Représentation géométrique du transfert de masse | 77 |

| | | |
|---|---|-----|
| II.2.5.2 | Champ de déplacement pour la simulation 3D de la délocalisation..... | 80 |
| II.3 | APPLICATION ET RESULTATS..... | 82 |
| CHAPITRE III : NOUVEAU MODÈLE 1D POUR LE RATRAPAGE DU JEU | | |
| COMBUSTIBLE-GAINE 91 | | |
| III.1 | FORMULATION DU COUPLAGE MULTI-PHYSIQUE DANS GERMINAL ... | 93 |
| III.2 | NOUVEAU MODÈLE DE DÉLOCALISATION DES FRAGMENTS DE PASTILLE COMBUSTIBLE ET FORMULATION DU COUPLAGE | 96 |
| III.2.1 | Déformation de délocalisation induit par la fragmentation de la pastille combustible..... | 96 |
| III.2.1.1 | Formulation mécanique..... | 96 |
| III.2.1.2 | Pastille non-fragmentée..... | 98 |
| III.2.1.3 | Pastille fragmentée..... | 100 |
| III.2.1.4 | Déformation de délocalisation..... | 102 |
| III.2.2 | Déformation de délocalisation par transfert de masse | 105 |
| III.2.2.1 | Calcul de la masse transférée | 105 |
| III.2.2.2 | Formulation de la déformation de délocalisation induit par le transfert de masse | 108 |
| III.3 | Résultats et comparaisons avec les mesures expérimentales | 110 |
| CHAPITRE IV : ANALYSE DU MECANISME DE MIGRATION DE MATIERE INDUIT PAR LES FISSURES..... 117 | | |
| IV.1 | DESCRIPTION DU PHÉNOMÈNE DE MIGRATION AUTOUR DES FISSURES | 120 |
| IV.2 | MODELE 2D MACROSCOPIQUE..... | 122 |
| IV.2.1 | Hypothèses de calcul du modèle macroscopique 2D (r,θ)..... | 123 |
| IV.2.2 | Réalisation d'un modèle 3D microscopique pour déterminer les paramètres homogénéisés αp et $\lambda e q(p)$ | 125 |
| IV.2.2.1 | Détermination de la fonction homogénéisée αp permettant de représenter l'évolution du coefficient α en fonction de la fraction volumique de porosité | 126 |

| | | |
|--|--|-----|
| IV.2.2.2 | Détermination de la conductivité thermique homogénéisée λ_{eqp} permettant de représenter l'évolution de la conductivité thermique en fonction de la fraction volumique de porosité..... | 129 |
| IV.2.3 | Résolution du problème thermique et évaluation de la vitesse moyenne de migration des pores | 131 |
| IV.2.3.1 | Evolution de la température du combustible au voisinage de la fissure .. | 132 |
| IV.2.3.2 | Evolution de la vitesse moyenne de migration des pores dans les directions radiale et circonférentielle..... | 133 |
| IV.2.4 | Résolution de l'équation d'advection à thermique fixée..... | 137 |
| IV.2.4.1 | Nouvelles hypothèses du modèle 2D macroscopique..... | 137 |
| IV.2.4.2 | Méthode numérique et schéma de calcul utilisés pour résoudre l'équation d'advection..... | 139 |
| IV.2.4.3 | Résultat pour le cas sans fissure | 143 |
| IV.2.4.4 | Résultat pour le cas avec une fissure droite | 145 |
| IV.2.5 | Perspectives | 148 |
| IV.2.5.1 | Couplage complet des équations Thermique-Advection sur une pastille cylindrique | 148 |
| IV.2.5.2 | Equations de couplage et schéma de calcul numérique | 149 |
| IV.2.5.3 | Modèle micromécanique..... | 151 |
| CONCLUSION GÉNÉRALE ET PERSPECTIVES..... | | 155 |
| RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES | | 159 |
| ANNEXES..... | | 167 |
| Annexe A : Etude préliminaire sur la convergence du calcul 3D..... | | 168 |
| Annexe B : Résolution du problème thermoélastique non linéaire | | 172 |
| Annexe C : Loi matériau | | 176 |
| Annexe D : Conditions limites sur les points localisés dans le trou | | 181 |
| Annexe E : Détermination de l'expression du tenseur de déformation thermique pour une pastille annulaire et pleine | | 182 |

| | |
|---|-----|
| Annexe F : Méthode de Muskhelishvili | 185 |
| Annexe G : Expression du tenseur de contrainte et des constantes d'intégrations pour une pastille pleine et annulaire dans le cas d'une pastille fragmentée | 191 |
| Annexe H : Les étapes de calcul pour estimer Δur | 193 |

INTRODUCTION GÉNÉRALE

Ce mémoire porte sur la modélisation et la simulation du comportement multi-physique de l'aiguille combustible irradiée dans les réacteurs à neutrons rapides à caloporteur sodium « RNR-Na ». Dans les RNR-Na, les combustibles sont constitués de pastilles combustibles (cylindre d'environ un centimètre de hauteur et de diamètre) insérées dans une gaine en acier (cylindre annulaire de quelques mètres de hauteur et d'un demi-millimètre d'épaisseur). Un jeu compris entre 100 et 200 micromètres, communément appelé jeu pastille-gaine, est initialement rempli d'hélium. Durant l'irradiation l'aiguille combustible est soumise à un environnement extrême, se caractérisant par des températures élevées ($\sim 2500\text{ }^{\circ}\text{C}$) et de fort gradient de température (plusieurs milliers de degrés par centimètre). Ces conditions induisant l'apparition de plusieurs phénomènes : la fragmentation des pastilles combustibles, le relâchement de gaz de fission et la restructuration de la pastille combustible qui est caractérisée par la formation du trou central et la guérison partielle des fissures. Ces phénomènes entraînent des modifications de la géométrie, avec notamment la taille du jeu pastille-gaine, et des propriétés du combustible.

Suite à l'incident de Fukushima, l'industrie nucléaire doit faire face à des exigences croissantes en termes de sûreté. Les critères de sûreté associés au comportement des aiguilles combustibles doivent permettre de garantir l'intégrité de l'aiguille combustible qui passe entre autres par la non-fusion de la pastille. Le respect de ce critère nécessite la maîtrise de la température maximale de la pastille en début de vie. Parmi les phénomènes qui contrôlent la température du combustible, la taille du jeu combustible-gaine joue un rôle du premier ordre du fait de son impact sur la chaîne de transfert thermique vers le caloporteur.

Les études expérimentales ont permis de caractériser les différents phénomènes qui apparaissent dans l'aiguille combustible permettant ainsi d'établir des critères de sûreté pour les différentes catégories de fonctionnement du réacteur. En support à ces programmes expérimentaux des Outils de Calcul Scientifiques "1D½" (appelés plus communément code de calcul "1D½") ont été développés à travers le monde afin de simuler l'ensemble des phénomènes observés à l'aide de modèles implémentés dans un schéma de calcul multi-physique. L'aiguille combustible est représentée par un découpage axial en tranches, chacune étant décrite par un modèle 1D axisymétrique. Cette représentation "1D½" permet de déterminer le comportement local du combustible et de la gaine en prenant en compte la

puissance linéique dégagée lors de la fission et les variations de température du caloporteur sodium le long de l'élément combustible. Toutefois, la représentation géométrique 1D ne peut pas fournir une description détaillée de certains phénomènes complexes, où des aspects multidimensionnels sont impliqués. De ce fait, les codes de calcul RNR "1D½" actuels disposent de modèles empiriques ajustés à l'aide de mesures expérimentales réalisées en post-irradiation. Les temps de calcul des outils de simulation 3D ne permettent pas encore une utilisation d'une modélisation 3D des aiguilles combustibles RNR-Na compatible avec les exigences d'études industrielles. Pour répondre à ce besoin la stratégie actuelle consiste à comprendre les phénomènes avec une approche 3D puis à transposer les mécanismes identifiés dans des modèles 1D plus prédictifs.

L'objectif principal de cette thèse est d'améliorer notre compréhension des phénomènes responsables du rattrapage du jeu, afin de remplacer les modèles empiriques actuels implémentés dans les codes de calculs RNR "1D½" par des modèles reposant sur une description des mécanismes physiques. Une meilleure modélisation de ces phénomènes permettra ainsi de réduire les incertitudes sur l'évaluation de la température maximale du combustible et de la marge à fusion.

Dans le premier chapitre, le contexte de l'étude est présenté. Le mode de fonctionnement des RNR-Na, ainsi que le comportement de l'aiguille combustible durant l'irradiation en régime nominal sont décrits. Les modèles actuels permettant de simuler le rattrapage du jeu combustible-gaine qui sont implémentés dans les codes de calculs nucléaires RNR-Na "1D½" sont décrits ainsi que leurs limites. Enfin une synthèse des mécanismes de formation du trou central avec la migration des porosités de fabrication et des volumes libres provenant des fissures est présentée.

Dans le chapitre II, de nouvelles simulations 3D, permettant de décrire les mécanismes participants au rattrapage de jeu, sont proposées. Ces simulations sont réalisées à l'aide d'une modélisation 3D thermomécanique. Le schéma de calcul proposé utilise un chainage entre le code 1D multi-physique GERMINAL et le code thermo-mécanique multi-D LICOS, tous les deux issus de la plateforme numérique PLEIADES. Cette simulation 3D permet de quantifier la contribution de l'ensemble des phénomènes responsables de la fermeture du jeu. Les résultats 3D obtenus sur plusieurs aiguilles irradiées dans le RNR-Na PHENIX sont comparés avec les résultats expérimentaux, permettant ainsi de valider chaque phénomène de rattrapage de jeu proposé.

En se basant sur les résultats 3D, dans le chapitre III nous proposons une nouvelle formulation 1D de réduction de la taille de jeu permettant de modéliser les mécanismes identifiés de

manière plus physique. Cette formulation est implémentée dans le schéma de calcul multi-physique du code de calcul 1D RNR GERMINAL. L'objectif étant de remplacer la déformation anélastique empirique de délocalisation utilisée jusqu'à présent dans GERMINAL.

Le dernier chapitre, porte sur l'analyse du mécanisme de migration de porosité induit par les fissures, participant à la formation du trou central et responsable de la guérison partielle des fissures. La vitesse de migration de ces pores étant méconnue dans la littérature, nous nous sommes intéressés à leur comportement. Cette analyse a notamment pour objectif de discuter de l'hypothèse utilisée dans le chapitre III, selon laquelle les vitesses de migration des pores de fabrication et des porosités associées aux fissures sont identiques. Une modélisation macroscopique 2D axisymétrique représentant une fissure droite et perturbée est réalisée. Une analyse 2D des mécanismes de transfert de matière par évaporation condensation au voisinage des surfaces libres créées par les fissures est proposée. Cette simulation 2D permet en résolvant les équations de la thermique et d'advection de caractériser le comportement des pores issus des fissures et d'en déduire une estimation de leur vitesse moyenne de migration.

CHAPITRE I : CONTEXTE DE L'ETUDE – BIBLIOGRAPHIE

Objet du chapitre :

L'objet de ce chapitre est de décrire le contexte de l'étude afin d'introduire les notions importantes et nécessaires aux travaux de thèse. Ainsi, le mode de fonctionnement des réacteurs à neutrons rapides refroidis au sodium liquide et le comportement de l'aiguille combustible durant l'irradiation sont présentés. L'effet de l'impact de la taille du jeu pastille-gaine sur le comportement thermique du combustible est notamment expliqué. La compréhension du comportement thermique est indispensable pour garantir le respect du critère de non fusion du combustible. Pour cela, des essais expérimentaux ainsi que le développement de modèles ont été mis en place depuis de nombreuses années. Dans ce chapitre, nous introduisons ainsi les modèles actuels permettant de simuler les phénomènes responsables du rattrapage de la taille du jeu combustible-gaine, qui sont implémentés dans les schémas de calcul multi-physique des codes nucléaires développés à travers le monde. Le comportement des aiguilles combustibles sous irradiation est décrit avec tout particulièrement un phénomène caractéristique des Réacteurs à Neutrons Rapides appelé « restructuration du combustible ». Ce dernier est responsable de modifications majeures de la pastille combustible avec un impact sur la microstructure, la composition et la géométrie.

SOMMAIRE DU CHAPITRE I

| | | |
|--------------|--|-----------|
| I.1 | CONTEXTE GÉNÉRAL..... | 21 |
| I.1.1 | Les réacteurs à neutrons rapides refroidis au sodium..... | 22 |
| I.1.1.1 | Principe de fonctionnement d'un réacteur à neutron rapide refroidi au sodium | 24 |
| I.1.1.2 | L'aiguille combustible | 26 |
| I.1.2 | Comportement de l'aiguille combustible durant l'irradiation [Bailly 96]. | 27 |
| I.1.2.1 | Le comportement du combustible | 28 |
| I.1.2.2 | Le comportement de la gaine | 29 |
| I.1.2.3 | Modélisation et simulation du comportement multi-physique de l'aiguille combustible | 30 |
| I.2 | MODELISATION DU RATRAPAGE DU JEU COMBUSTIBLE-GAINE.. | 34 |
| I.2.1 | Impact de la taille du jeu combustible-gaine sur le comportement de l'aiguille combustible..... | 34 |
| I.2.2 | Phénomènes responsables du rattrapage du jeu combustible-gaine et les modèles actuels les simulant..... | 35 |
| I.2.2.1 | Dilatation thermique | 35 |
| I.2.2.2 | Gonflement solide et gazeux | 37 |
| I.2.2.3 | Fragmentation du combustible | 41 |
| I.3 | PHENOMENE DE RESTRUCTURATION DU COMBUSTIBLE..... | 46 |
| I.3.1 | Pores de fabrication | 47 |
| I.3.1.1 | Comportement et mécanismes de transport des pores de fabrication | 47 |
| I.3.1.2 | Cinétique de migration des pores de fabrication | 50 |
| I.3.1.3 | Modèle de restructuration développé dans les codes actuels RNR "1D½" | 55 |
| I.3.2 | Les fissures | 57 |

| | | |
|---------|--|----|
| I.3.2.1 | La guérison des fissures | 58 |
| I.3.2.2 | Cinétique de migration de volume induit par les fissures | 59 |
| I.3.2.3 | Modèle existant dans les codes “1D½” pour représenter la guérison des fissures | 59 |

I.1 CONTEXTE GÉNÉRAL

Un projet portant sur la sélection d'un nouveau concept de réacteurs dit de 4ème génération a été lancé par les ETATS UNIS en 2000. Un « forum international génération 4 » (GIF) regroupant, treize pays dont la France a été créé [CG4IF 06]. Le principal objectif du développement de ce réacteur de 4ème génération est de répondre à la demande énergétique croissante tout en renforçant les aspects liés à la sûreté et à la fermeture du cycle (voir Figure I-1).

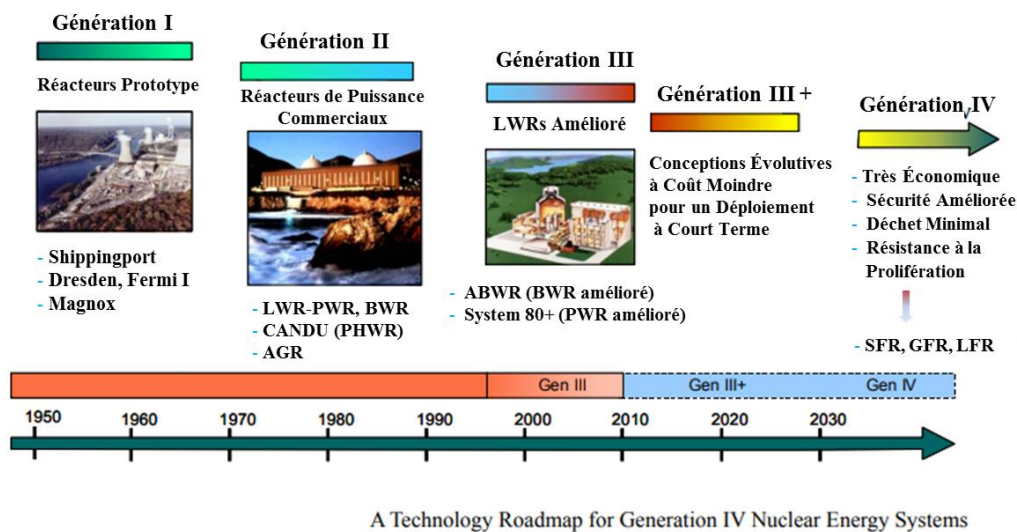


Figure I-1 : Historique de l'évolution de l'énergie de nucléaire [AEN 08]

La production d'électricité nucléaire représente plus de 70% de la production totale d'électricité en France. À l'échelle mondiale, les centrales nucléaires ont produit, en 2006, l'équivalent de 16% de l'électricité [G4IF 02]. La production électrique est responsable d'environ 27% des émissions mondiales de CO₂, ce qui fait de cette production la source la plus importante de gaz à effet de serre et celle qui augmente le plus vite [G4IF 02]. Suite à l'incident de Fukushima, le nucléaire doit faire face à des exigences croissantes en termes de sûreté et à une gestion durable des matières premières. Cette nouvelle filière de réacteurs de IVème génération a donc pour objectif une sûreté accrue et une minimisation de l'inventaire en déchets radioactifs à durée de vie très longue. Afin de répondre à cette problématique, le CEA « commissariat de l'énergie atomique » et ses partenaires industriels (EDF et FRAMATOME) ont travaillé jusqu'en 2019 sur un projet de développement et de conception d'un prototype de réacteur à neutrons rapides « RNR » de 4ème génération refroidi au sodium appelé ASTRID (voir Figure I-2).

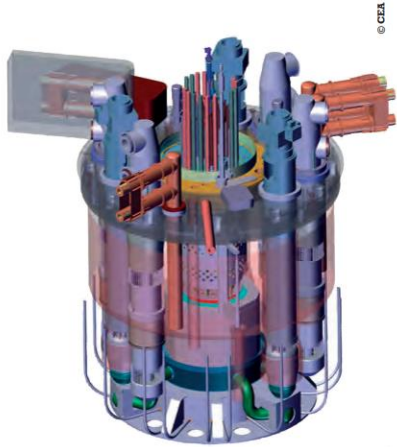


Figure I-2 : Illustration du projet de réacteur ASTRID (les défis du CEA Juin 2016)

I.1.1 Les réacteurs à neutrons rapides refroidis au sodium

Il existe à ce jour, deux grandes catégories de réacteur nucléaire, les REP « Réacteur à eau pressurisée » et les RNR « Réacteur à neutron rapide refroidi au sodium ». Les REP sont des réacteurs qui utilisent de l'eau comme fluide caloporteur. Cette eau fait également office de modérateur. L'énergie dégagée par les neutrons (ralentis par l'eau) étant trop faible, ce type de réacteur ne permet pas de fissionner l'uranium dans son état naturel. Le combustible doit être enrichi en uranium 235 fissible présent en faible quantité dans l'uranium naturel. Contrairement au REP, les RNR n'utilisent pas de modérateur pour maintenir une vitesse élevée des neutrons. L'énergie des neutrons permet de fissionner l'uranium dans son état naturel en passant par une transformation en plutonium 239 après la capture d'un neutron (voir Figure I-3). Ainsi, à partir d'un combustible à base de plutonium et d'uranium appauvri (ou naturel) dans une proportion d'environ 25/75, il y aura disparition d'une partie de l'uranium, mais création de plutonium lors de l'irradiation en réacteur. On peut théoriquement brûler 100 % de l'uranium dans ce type de réacteur.

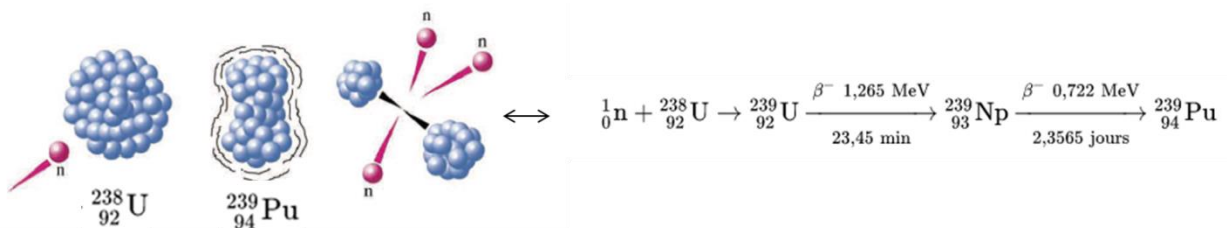


Figure I-3 : Principe de fission dans les RNR

Le caloporteur doit répondre à des besoins spécifiques tels que : l'évacuation efficace de la chaleur produite dans le cœur du réacteur. Le caloporteur doit posséder une forte capacité calorifique et une bonne conductivité thermique. Le caloporteur circulant dans le cœur du réacteur, doit répondre à des exigences d'ordre neutronique, celui-ci ne doit pas absorber les neutrons au risque de créer des produits d'activation et il ne doit pas non plus les ralentir. Les interactions thermo-mécanico-chimiques ayant lieu entre le caloporteur et les structures du réacteur, doivent être maîtrisées que ce soit pour des problèmes de corrosion conduisant à la fragilisation de la structure mais également vis à vis des interactions fluide-structure qui peuvent conduire à des vibrations engendrant des sollicitations sur les structures du réacteur. Au vu des critères cités ci-dessus, le choix du caloporteur sodium liquide est un bon candidat (voir Tableau I-1), pour répondre aux contraintes physico-chimiques et neutroniques rencontrées dans le réacteur (voir [CEA/DEN 14] pour plus de détails).

| Propriétés | Température (en °C) | | | |
|--|----------------------------|--------|-------|--------|
| | 100 | 200 | 400 | 600 |
| Masse volumique ρ [kg/m ³] | 926,9 | 903,6 | 856,2 | 808,2 |
| Capacité thermique massique C_p [J/kg.K] | 1383 | 1339 | 1279 | 1255 |
| Conductivité thermique λ [W/m.K] | 87,3 | 81,8 | 71,6 | 62,3 |
| Viscosité dynamique μ [10 ⁻⁴ Pa.s] | 6,846 | 4,568 | 2,791 | 2,066 |
| Résistivité électrique ρ_0 [10 ⁻⁷ Ω .m] | 0,9719 | 1,351 | 2,214 | 3,282 |
| Tension superficielle σ [N/m] | 0,1957 | 0,1867 | 1,667 | 0,1467 |
| Température de fusion à 1atm [°C] | 97,8 | | | |
| Température d'ébullition à 1atm [°C] | 881,4 | | | |
| Coefficient de dilatation volumique ΔV [%] | +2,7 | | | |

Tableau I-1 : propriétés du sodium liquide [Rodriguez 04]

En France, l'étude des réacteurs à neutrons rapides refroidis au sodium bénéficie d'un retour d'expérience important avec les réacteurs RAPSODIE, PHENIX et SUPERPHENIX.

Dans cette partie nous présentons le principe de fonctionnement d'un réacteur à neutron rapide refroidi au sodium et nous décrivons la composition de l'aiguille combustible (système d'étude). Les références utilisées sont issues des études réalisées sur les précédents RNR-Na (RAPSODIE, PHENIX et SUPERPHENIX).

I.1.1.1 Principe de fonctionnement d'un réacteur à neutron rapide refroidi au sodium

Un RNR refroidi au sodium possède des aiguilles combustibles composées de pastilles fertiles (uranium naturel ou appauvri) et de pastilles fissiles avec une proportion de Pu239 de 20 à 30%. (voir Figure I-6 « Exemples de conceptions d'aiguilles combustibles »). Pour contrôler la réaction, le réacteur dispose dans le cœur de barres de commande (en carbure de bore « B4C ») qui permettent d'absorber les neutrons. Afin d'extraire la chaleur et obtenir de l'électricité, le réacteur dispose de deux circuits de sodium et d'un échangeur sodium-eau pour le circuit tertiaire. Le circuit primaire de sodium permet de récupérer la chaleur à partir de l'énergie dégagée par la fission nucléaire et la transmet au circuit secondaire de sodium à travers l'échangeur intermédiaire. Puis le second circuit cède sa chaleur au circuit tertiaire eau-vapeur, qui va ensuite à la turbine qui convertit l'énergie thermique en électricité dans le système de conversion d'énergie. L'utilisation d'un échangeur intermédiaire intégré dans la cuve principale permet d'éviter le risque de contamination en cas de réaction sodium-eau dans le générateur de vapeur. Un exemple du principe de fonctionnement du RNR-NA est présenté dans la figure ci-dessous.

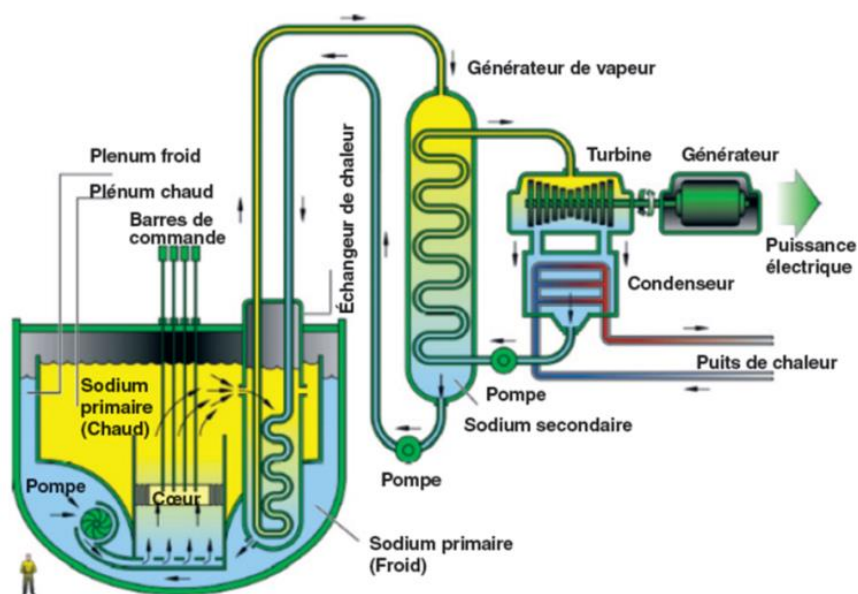


Figure I-4 : Principe de fonctionnement du RNR-Na [CEA-DEN 14]

L'assemblage combustible RNR (voir Figure I-5) est caractérisé par :

- Un faisceau d'aiguilles combustibles comportant généralement une centaine d'aiguilles combustibles. La constitution de ces aiguilles est détaillée à la section I.1.1.2.

- Un tube hexagonal entourant le faisceau d'aiguille composé du système {aiguille, fil espaceur entre chaque aiguille} qui assure la rigidité de l'ensemble et un refroidissement efficace du faisceau par le sodium caloporteur.

Les grandeurs qui caractérisent l'irradiation sont :

- Une puissance linéique de l'aiguille combustible de l'ordre de 450W/cm au plan de flux maximal dans des conditions nominales. Cette puissance varie le long du crayon considéré sous l'effet des conditions neutroniques locales.

- Le taux de combustion ou burnup noté Bu est un moyen de mesure permettant de calculer le nombre d'atomes lourds (Plutonium et/ou Uranium) consommés dans le réacteur. C'est la quantité d'énergie produite en proportion de la quantité totale d'atomes lourds. Le taux de combustion ou burnup peut s'exprimer en at% correspondant à la proportion d'atomes lourds fissionnés ou en gigawatt-jours produits par tonne de combustible métal ou oxyde « GWJ/t ». On retient en pratique qu'un taux de combustion de 10 GWJ/t est environ équivalent à une consommation de 1 at%. Plus le taux de combustion est élevé, meilleur sera le rendement économique du cycle. Ce taux de combustion se traduit pour les structures par des valeurs de dose d'irradiation reçues, exprimé en DPA (déplacement par atome).

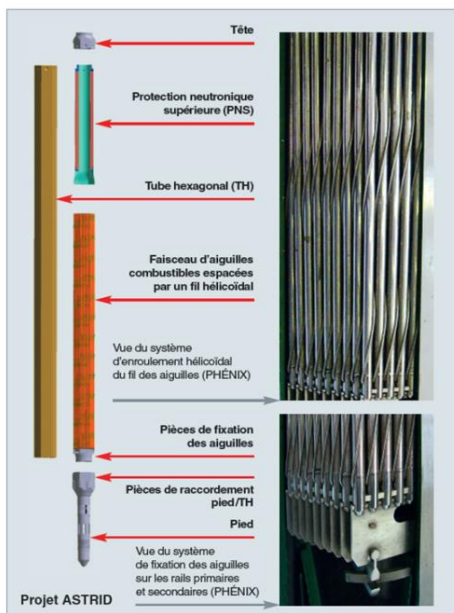


Figure I-5 : L'assemblage combustible RNR [LRNCS]

I.1.1.2 L'aiguille combustible

Les aiguilles combustibles RNR sont d'une longueur d'environ 1.8m et de diamètre 6.5 mm, chacune étant composée de pastilles cylindriques, d'environ un centimètre de hauteur, enveloppées dans une gaine. Dans la grande majorité des RNR-Na les pastilles sont constituées d'oxyde mixte (U,Pu)O₂. Ce matériau bénéficie d'un retour d'expérience conséquent que ce soit sur le fonctionnement, la fabrication ou le retraitement à l'échelle industrielle. L'oxyde mixte (U,Pu)O₂ est un matériau céramique, avec une contrainte à rupture d'environ 130 ± 70 Mpa [Roberts 71]. Ces propriétés dépendent fortement du procédé de fabrication (densification et disposition des pores de fabrication). Dans la littérature [Kittel 93] [Pelletier 07 08], d'autres combustibles sous forme métallique, carbure ou nitrure sont également étudiés. Parmi les conceptions d'aiguilles testées dans le retour d'expérience français il y eu :

- une configuration dite homogène, où les pastilles combustibles fissiles sont empilées sous forme de colonne homogène entourées de deux couvertures axiales fertile.
- une configuration dite hétérogène qui consiste à insérer une colonne fertile dans la colonne fissile.
- des pastilles pleines ou annulaires. Les pastilles annulaires offrent l'avantage de réduire la température maximale dans la zone centrale du combustible.

Les pastilles sont enveloppées dans une gaine tubulaire en acier austénitique. Cette gaine maintient l'empilement de pastilles et elle est également la 1^{ère} barrière de confinement de la radioactivité. C'est un matériau adapté pour l'utilisation à haute température du fait de son comportement en fluage, avec cependant une ductilité qui dépend de la dose d'irradiation (en DPA) reçue. Différents types d'aciers ont été envisagés et ont suscité des études approfondies. Les aciers austénitiques sont la classe de matériau pour laquelle la littérature est la plus riche. Le gonflement des aciers dû à l'irradiation peut être un phénomène limitant la durée de vie. L'optimisation des compositions chimiques a permis un accroissement considérable de la tenue sous irradiation (voir section I.1.2.2 pour le comportement de la gaine durant l'irradiation). Cette optimisation a porté sur la composition en Cr, en Ni des aciers austénitiques et sur l'ajout d'éléments d'alliage secondaires comme le Ti. Les aciers martensitiques et ferrito-martensitiques ont également montré de très bonnes propriétés pour la résistance au gonflement mais avec une résistance mécanique à haute température limitée (tenue au fluage à partir de 620-650°C). Ces matériaux ont été choisis pour le tube hexagonal soumis à des températures de fonctionnement compatibles avec leur tenue en fluage [Bailly 96] [Cheon 09]. Le jeu de 100

à 200 µm, séparant la pastille de la gaine est initialement rempli d'hélium (cf coupe radiale Figure I-6).

L'aiguille comporte également un vase d'expansion d'un volume du même ordre que la colonne fissible du combustible. Il permet de limiter la pression interne de l'aiguille due au fort relâchement de gaz de fission pendant l'irradiation (rapport $V_{expansion}/V_{fissile} = 0.75$).

L'espacement entre aiguilles est assuré par un fil enroulé en hélice. Ce fil permet de maintenir l'espacement nécessaire au bon écoulement du sodium entre les aiguilles.

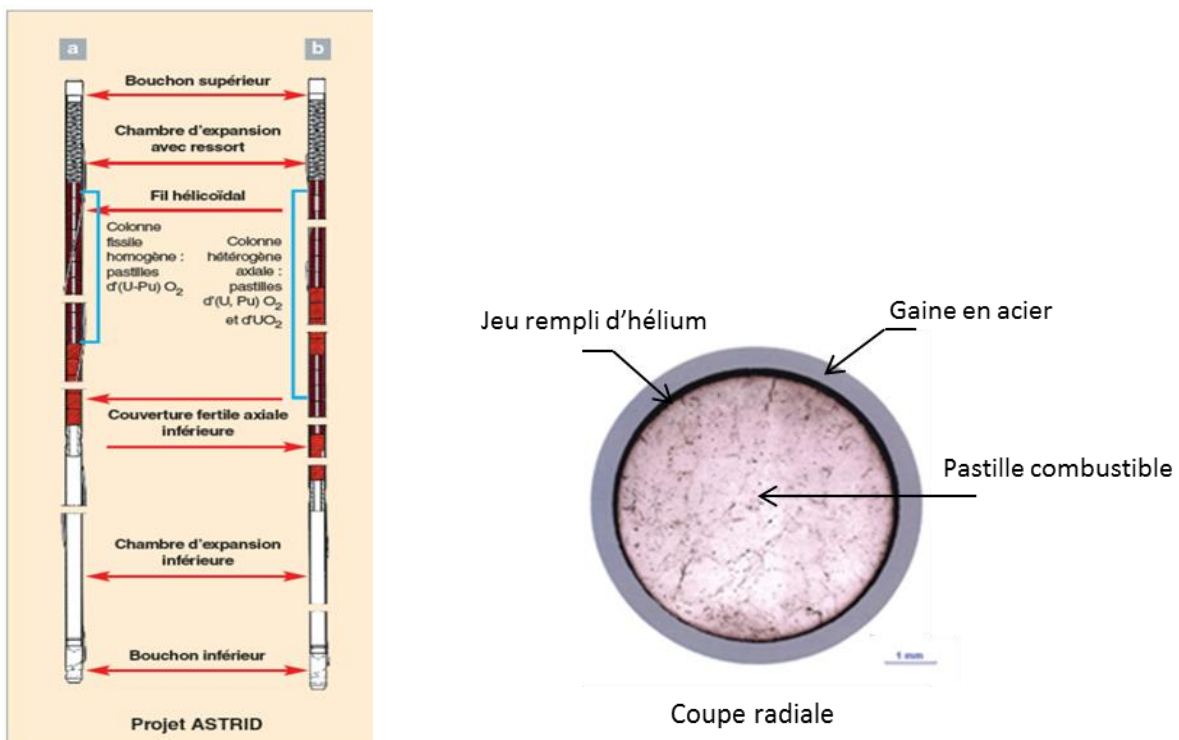


Figure I-6 : Exemples de conceptions d'aiguilles combustibles [LRNCS]

I.1.2 Comportement de l'aiguille combustible durant l'irradiation [Bailly 96]

Durant l'irradiation l'aiguille combustible est soumise à un environnement extrême, des phénomènes thermomécaniques et physico-chimiques apparaissent. Dans cette partie nous allons présenter les différents phénomènes en cas nominal ainsi que les principaux critères de suretés à respecter vis-à-vis de l'intégrité de l'aiguille combustible.

I.1.2.1 Le comportement du combustible

Le critère de sûreté principal pour le combustible est le respect de la marge à fusion. En effet pour garantir l'intégrité de la colonne fissile la température à cœur doit rester inférieure à celle de fusion qui est de l'ordre de 2800 degrés [Olander 76]. Afin que ce critère de sûreté soit vérifié, il est crucial de bien comprendre le comportement du combustible durant l'irradiation. En début d'irradiation, durant la première montée en puissance imposée par les réactions de fission, la géométrie, la structure et les propriétés physiques du combustible évoluent grandement. L'évacuation de puissance vers le caloporteur conduit à des températures à cœur élevées et à un gradient de température de plusieurs milliers de degrés par centimètre [Guerin 12]. L'irradiation affecte également les propriétés mécaniques du combustible, notamment avec la création de produits de fission sous forme solide ou gazeux qui peuvent entraîner un gonflement du combustible (voir section I.2 pour plus de détails). Le gradient thermique présent dans le combustible, engendre des contraintes thermiques dépassant la contrainte à rupture du combustible conduisant à sa fragmentation. Cette fragmentation apparaît dès que l'écart de température entre le cœur et la périphérie de la pastille atteint une centaine de degrés. Ces aspects seront détaillés dans la section I.2. La fragmentation relaxe les contraintes dans la pastille. Le combustible a un comportement mécanique fragile à basse température ($<1000^{\circ}\text{C}$) et viscoplastique à haute température permettant de relaxer les contraintes restantes [Helfer 06].

Les températures élevées atteintes dans le combustible entraînent la restructuration de la zone centrale. Cette restructuration est liée à une migration des porosités vers le centre de la pastille sous l'effet du gradient thermique. Cette migration s'accompagne de la formation d'un trou central avec une modification de la microstructure par une formation de grains colonnaires. L'évolution de la pastille suite à ces phénomènes est visible sur la Figure I-7. Nous reviendrons sur une description de ce phénomène plus détaillée dans la section I.3.

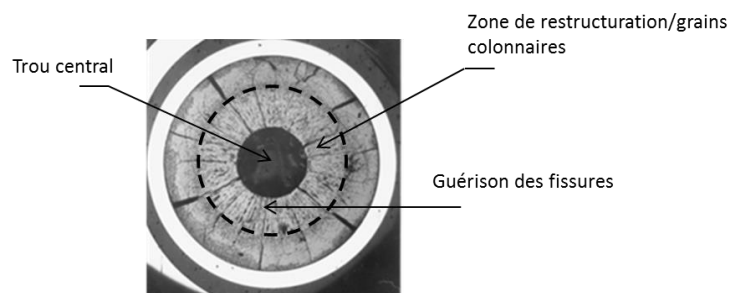


Figure I-7 : Formation du trou central et redistribution du combustible dans la zone à grains colonnaires

Le gradient de température mène aussi à la migration radiale de l'oxygène des zones chaudes vers les zones froides du combustible. Ce dernier étant réparti de façon homogène dans le combustible (1.97 à 1.99 O/M « rapport Oxygène sur Métaux), la migration entraîne une sous stœchiométrie de la zone centrale dégradant la conductivité thermique. La cinétique de migration étant rapide, ce processus est considéré comme instantané devant les durées d'irradiation en régime nominal.

Pour des taux de combustion plus élevés (6 à 8 at%), le volume de gaz de fission présent dans l'aiguille continue d'augmenter. La lame de gaz présente dans le jeu résiduel de quelques micromètres contient des gaz venant des produits de fission « PF » (Xe, Kr) qui pollue l'hélium et dégrade la conductivité thermique de la lame.

Au-dessus d'un taux de combustion de 9 at%, les produits de fission volatils (césium Cs, iode I, tellure Te) ou métalliques (molybdène Mo) sont partiellement relâchés hors du combustible et constituent une couche entre la pastille et la gaine, appelée JOG « Joint Oxyde-Gaine ». La conductivité thermique étant nettement supérieure à celui du mélange de gaz polluant, le coefficient de transfert thermique dans le jeu est amélioré et la température maximale de l'oxyde diminue.

I.1.2.2 Le comportement de la gaine

La gaine, première barrière à la radioactivité, doit respecter des critères d'intégrité. Pour vérifier ces critères la compréhension du comportement de la gaine durant l'irradiation est fondamentale.

En début de vie, la gaine ne subit pas d'évolution majeure, toutefois une légère apparition de corrosion interne et des contraintes thermiques de l'ordre de la dizaine de MPa dues au gradient de température dans l'épaisseur sont observées.

Au cours de l'irradiation, en régime nominal, le diamètre de la gaine augmente sous l'effet du flux de neutrons rapides qui active des phénomènes de gonflement et de déformation de fluage. À des durées d'irradiation plus élevées, la corrosion peut devenir un aspect limitant de la durée de vie de la gaine. Son évolution dépend fortement des paramètres température, taux de combustion et pression partielle d'oxygène qui contrôlent la réaction chimique associée. Elle se présente sous deux aspects : ROG (Réaction Oxyde-Gaine) et RIFF (Réaction à l'interface Fissile-Fertile).

En fin de vie la pression interne de l'aiguille combustible augmente du fait du relâchement des produits de fission gazeux.

Les programmes d'irradiation conduits dans les RNR ont permis ainsi de caractériser les différents phénomènes qui apparaissent dans l'aiguille combustible permettant ainsi d'établir des critères de sûreté pour assurer son intégrité. En support à ces programmes expérimentaux, des Outils de Calcul Scientifiques (appelés plus communément code de calcul) ont été développés à travers le monde afin de simuler l'ensemble des phénomènes observés à l'aide de modèles implémentés dans un schéma de calcul multi-physique. Une revue bibliographique des hypothèses de modélisation de ces codes est présentée dans le paragraphe suivant.

I.1.2.3 Modélisation et simulation du comportement multi-physique de l'aiguille combustible

Plusieurs codes nucléaires reposants sur une formulation communément appelée "1D $\frac{1}{2}$ " ont été développés à travers le monde pour simuler le comportement de l'aiguille combustible durant l'irradiation dans RNR. On peut citer à titre d'exemple, GERMINAL (France [Lainet 19], [Lainet 17] et [Lainet 13]), BERKUT (Russie [Veprev 18], [Boldyrev 17] et [Veshchunov 15]), CEPTAR (Japon [Ozawa 06]), FEAST-OXIDE (US [Karahana 10] et [Karahana 09]), TRAFIC (Angleterre [Matthews 87]), FIBER-OXIDE (Chine [Gao 17]) et d'autres codes ([Fiorina 18] et [Jankus 72]). Ces codes de calculs "1D $\frac{1}{2}$ " permettent d'étudier le comportement de chaque composant de l'aiguille combustible complète à l'aide d'une représentation géométrique axisymétrique comme illustrée sur la Figure I-8. Dans cette représentation, l'aiguille combustible est divisée en tranches axiales, chacune de ces tranches correspondant à une partie de l'empilement de pastilles combustibles avec la longueur de gaine associée. L'évolution physique dans une tranche axiale est résolue à l'aide d'un maillage axisymétrique 1D des pastilles combustibles, du jeu combustible-gaine et de la gaine.

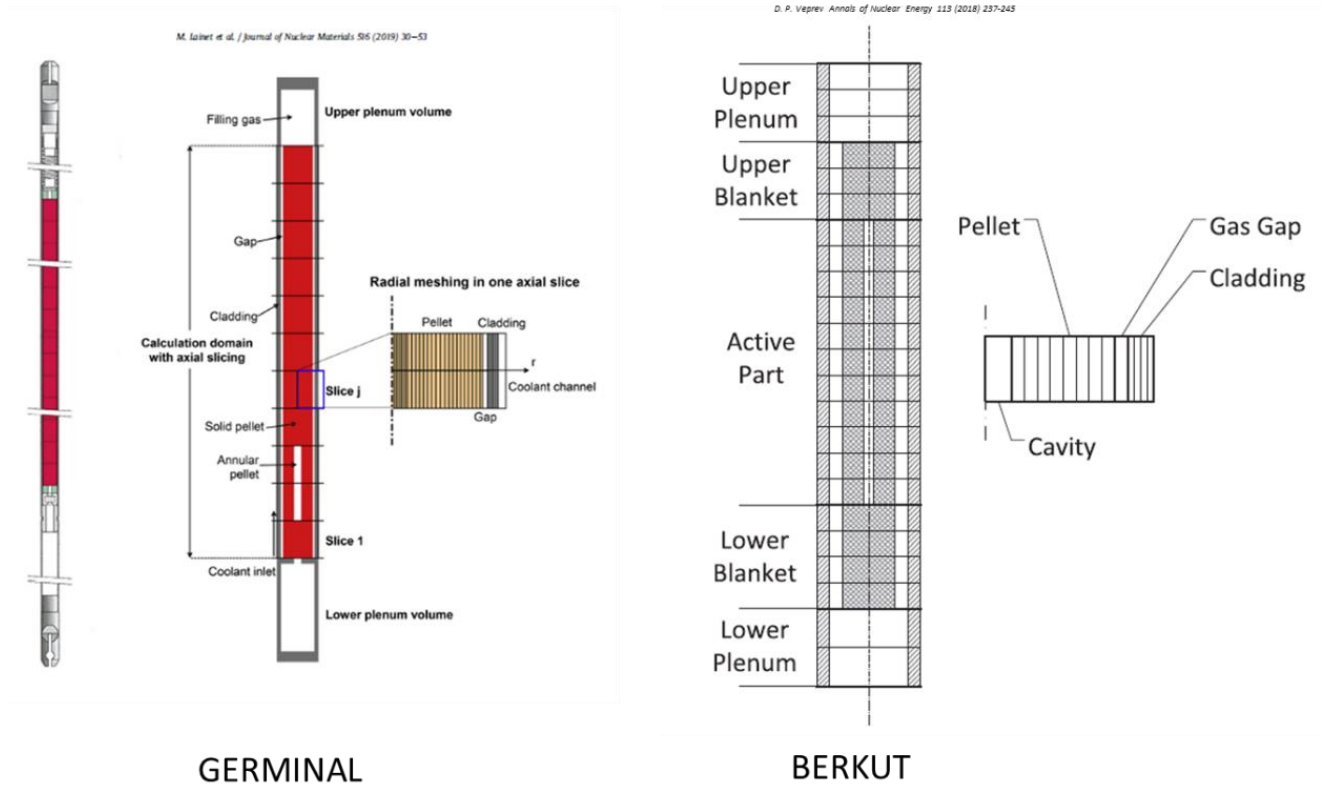


Figure I-8 : Illustration de la représentation “1D½” du code GERMINAL et BERKUT

Les phénomènes physico-chimiques couplés aux phénomènes thermomécaniques qui apparaissent et régissent le comportement du combustible durant l’irradiation rendent la modélisation très complexe (voir les sections I.1.2.1 et I.1.2.2). La Figure I-9 suivante met en évidence de manière synthétique les principales interactions entre les phénomènes durant l’irradiation et montre les couplages identifiés.

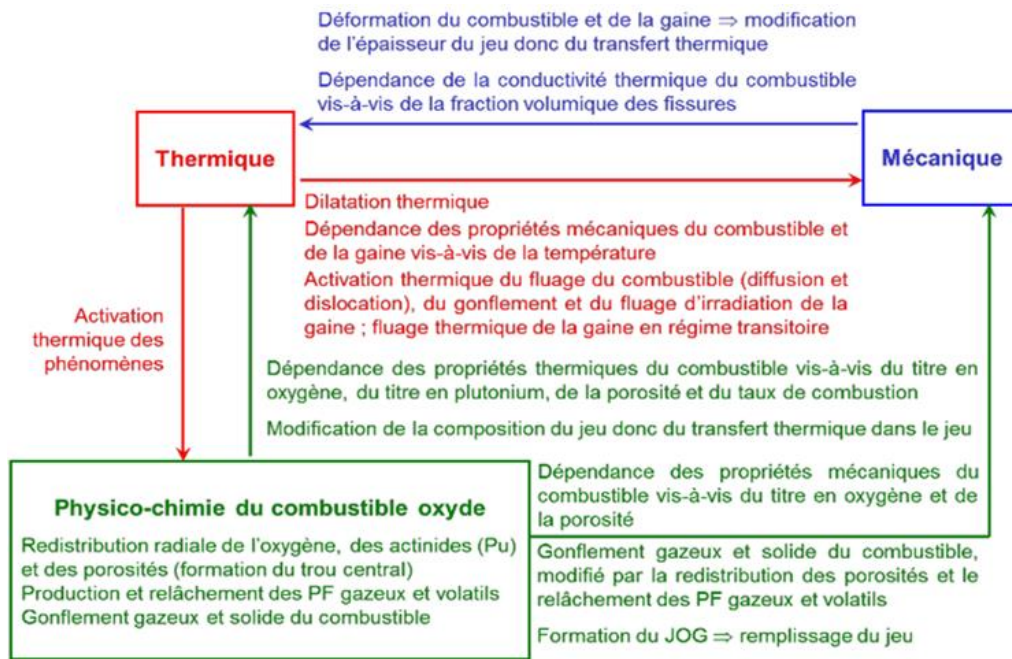
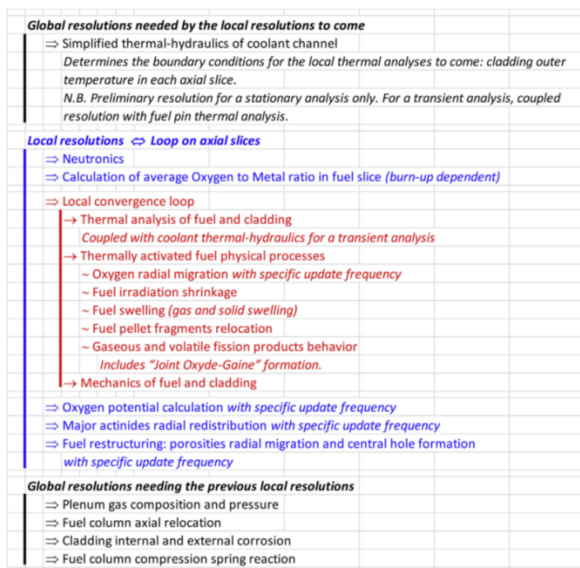
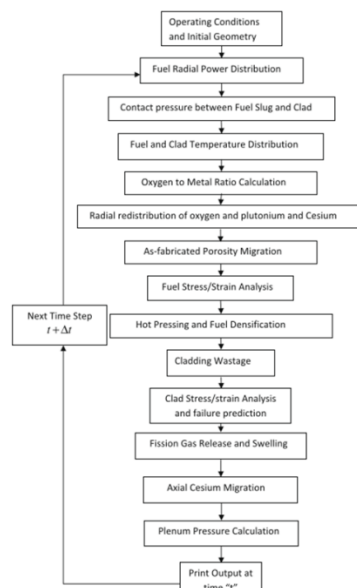


Figure I-9 : Synthèse des couplages physiques pour l'aiguille combustible [Lainet 19]

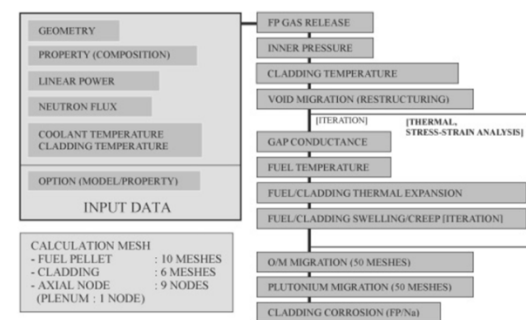
Afin de bien modéliser le comportement multi-physique de l'aiguille combustible, les codes de calculs "1D½" mettent en place un schéma de calcul couplé permettant de déterminer l'évolution de l'aiguille combustible durant l'irradiation. La Figure I-10 illustre le schéma de couplage complexe de trois grands codes nucléaires dont GERMINAL (France), permettant de mettre en évidence les différents modèles qui ont été développés.



Outline of the GERMINAL code



Outline of the FEAST-OXIDE code



Outline of the CEPTAR code.

Figure I-10 : Illustration de schéma de calcul multi-physique synthétique des codes GERMINAL, FIBER-OXIDE et CEPTAR

Tout d'abord les données d'entrée et les conditions limites nécessaires à l'exécution des modèles sont données :

- la géométrie (le maillage), les propriétés matériaux (mécanique, thermique...), la puissance linéique qui est une donnée de l'historique d'irradiation, le flux de neutrons et les sections efficaces qui permettent d'obtenir l'évolution isotopique du combustible et la température du caloporteur pour l'évacuation de puissance.

Nous retrouvons ce principe dans tous les schémas de calcul numérique "1D $\frac{1}{2}$ ". Ces données permettent de déterminer la thermique de l'aiguille combustible, la température étant le paramètre physique dont tous les phénomènes dépendent.

Nous retrouvons dans ces codes de calcul RNR "1D $\frac{1}{2}$ " (et dans ceux qui ne sont pas présentés ici), les modèles permettant de simuler les principaux phénomènes thermo-dépendant apparaissant dans l'aiguille combustible durant l'irradiation, à savoir :

- la dilatation thermique évaluée par le modèle thermique et mécanique.
- La fissuration du combustible prise en compte à l'aide d'une loi de comportement matériau dans le modèle mécanique.
- Un modèle de délocalisation des fragments combustibles pour simuler le rattrapage de jeu combustible-gaine. Seulement certains codes en disposent, à savoir, FEAST-OXIDE, FIBER-OXIDE et GERMINAL. Nous y reviendrons plus en détail dans la section I.2.
- Le fluage d'irradiation et thermique sont pris en compte dans la loi de comportement mécanique.
- Le gonflement solide et gazeux dus à l'irradiation sont pris en compte dans la loi de comportement mécanique (voir section I.2 pour plus de détails).
- La migration des produits de fission et la formation du JOG (certains codes : GERMINAL, TRAFIC, FEAST-OXIDE et CEPTAR simule l'apparition du JOG).
- La migration radiale de l'oxygène
- La restructuration du combustible : migration de porosité, formation du trou central et guérison des fissures (nous y reviendront plus en détail dans la section I.3)
- La redistribution du Plutonium
- La corrosion de la gaine (pour certains codes : FEAST-OXIDE, GERMINAL, LIFE II, TRAFIC and CEPTAR).

Néanmoins ils subsistent des différences entre ces codes, par exemple dans le choix des algorithmes de couplages des modèles.

La physique des modèles implémentés dans ces codes est sans cesse améliorée au cours du temps, néanmoins une des difficultés majeures qui complique la modélisation de certains

phénomènes réside dans l'hypothèse géométrique 1D utilisée dans ces codes. En effet, une représentation 1D limite la possibilité de simuler certains phénomènes, la simulation 3D devient donc nécessaire. Toutefois, les temps de calcul associés à la simulation 3D restent encore élevés en regard du besoin d'utilisation de type industriel. De ce fait, une stratégie communément adoptée consiste à utiliser la simulation 3D pour comprendre les phénomènes et justifier ainsi une formulation 1D utilisable dans un code industriel.

Le contexte et les notions utiles étant décrits, nous proposons maintenant une revue bibliographique des phénomènes et modèles permettant de décrire dans un premier temps le rattrapage de jeu combustible-gaine et dans un second temps de décrire la restructuration du combustible respectivement dans les sections I.2 et I.3.

I.2 MODELISATION DU RATRAPAGE DU JEU COMBUSTIBLE-GAINE

I.2.1 Impact de la taille du jeu combustible-gaine sur le comportement de l'aiguille combustible

Durant l'irradiation, le jeu combustible-gaine, initialement d'une taille comprise en 100 et 200 μm , diminue jusqu'à être complètement supprimé, ce rattrapage a un impact direct sur l'évolution de la température du combustible et sur les sollicitations mécaniques potentiellement supportées par la gaine.

À l'ordre 1, le coefficient de transfert de chaleur entre la pastille et la gaine " h_{gaz} " (W/K) peut se définir comme le rapport de la conductivité thermique moyenne du mélange gazeux " λ_{gaz} " ($W/m^2/K$) divisée par l'épaisseur du jeu " Δ_{gap} " (m).

$$h_{gaz} = \lambda_{gaz} / \Delta_{gap} \quad (\text{I-1})$$

Ainsi l'évolution de ce coefficient de transfert avec la taille du jeu influence très fortement l'échange de chaleur entre la pastille et la gaine, et par conséquent l'évolution de la température dans le combustible. En avançant dans l'irradiation, le jeu initialement rempli d'hélium est pollué par les gaz de fission provoquant une diminution de la conductivité thermique moyenne

dans le jeu (Figure I-11). De façon concomitante la diminution de la taille du jeu, permet de réduire la température centrale du combustible en compensant la dégradation de la conductivité thermique du mélange gazeux par une réduction de l'épaisseur.

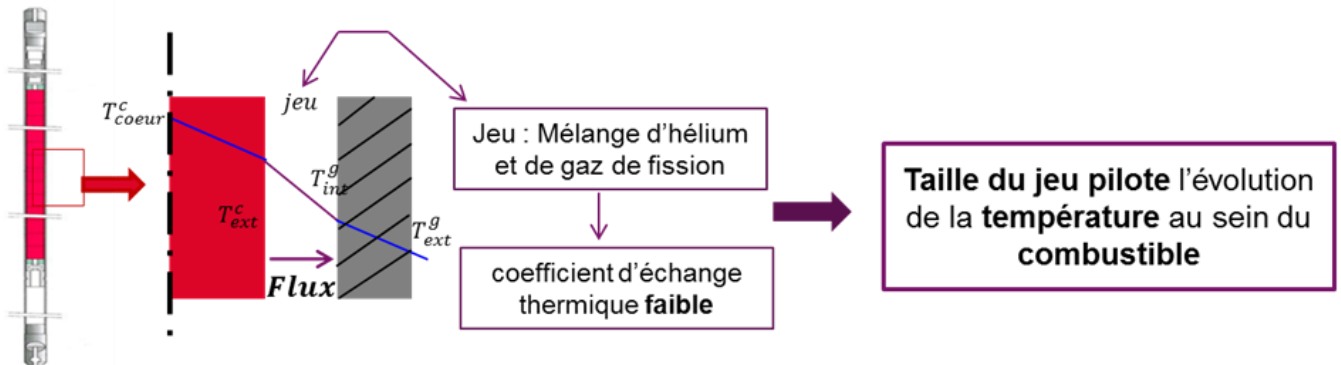


Figure I-11 : influence de la taille du jeu sur l'évolution de la température du combustible

Dans notre étude, nous nous sommes intéressés tout particulièrement au rattrapage du jeu du combustible-gaine et ses conséquences sur l'évolution de la température du combustible en début de vie.

I.2.2 Phénomènes responsables du rattrapage du jeu combustible-gaine et les modèles actuels les simulant

L'objectif de cette section est de donner une description précise des phénomènes responsables du rattrapage du jeu qui ont été identifiés dans la littérature et les modèles actuels qui permettent de les simuler ainsi que leur limite.

I.2.2.1 Dilatation thermique

Le dépôt de puissance sous irradiation se traduit par une élévation de température conséquente avec un gradient radial atteignant plusieurs milliers de degrés par centimètre [Guerin 12]. Il en résulte des déformations thermiques importantes avec notamment une dilatation moyenne qui augmente le diamètre de la pastille (voir illustration de la Figure I-12) et des dilatations différentielles.

Cette déformation thermique est proportionnelle à la différence de température entre le point étudié et la température du combustible avant irradiation, comme indiqué dans l'expression suivante :

$$\bar{\varepsilon}^{th} = \alpha^{th} \left(T, \frac{O}{M} \right) (T(r) - T_0) \cdot \bar{I} \quad (I-2)$$

où $\bar{\varepsilon}^{th}$ est le tenseur d'ordre 2 de déformation thermique, \bar{I} un tenseur unité isotrope, $T(r)$ la température à une distance r du centre de la pastille combustible (K), T_0 la température initiale du combustible (K) et α^{th} le coefficient de dilatation thermique (K^{-1}) qui dépend de la température du combustible et du rapport O/M.

Afin d'évaluer cette déformation thermique, des modèles thermomécaniques ont été implémenté dans les codes de calculs RNR "1D½".

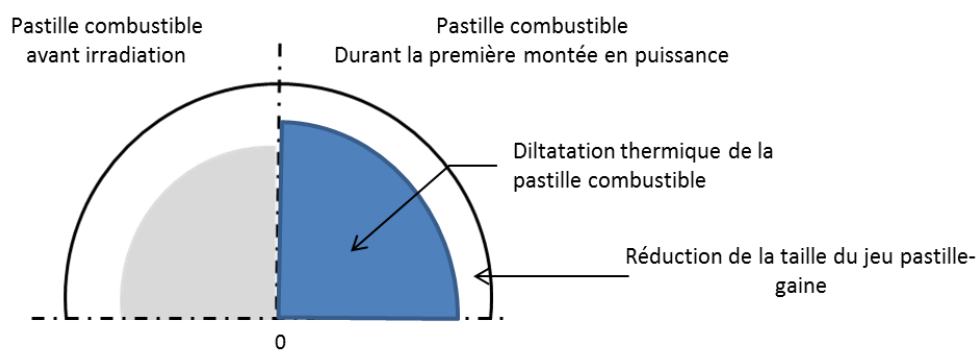


Figure I-12 : Illustration schématique de la dilatation thermique moyenne de la pastille combustible

L'évaluation de la dilatation thermique du combustible nécessite de connaître l'évolution de la température du combustible. Les codes "1D½" résolvent l'équation non linéaire de la chaleur par des méthodes numériques de type éléments finis.

$$\rho \cdot c_p \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}(\lambda \cdot \text{grad}T) + p_v \quad (I-3)$$

avec ρ la masse volumique (g/m^3), c_p la capacité thermique ($J/g/K$), λ la conductivité thermique du combustible ($W/m/K$) et p_v la puissance volumique nucléaire locale (W/m^3). La déformation thermique peut être ainsi évaluée.

1.2.2.2 Gonflement solide et gazeux

Le gonflement du combustible oxyde mixte (U, Pu)O₂ induit par les produits de fission au cours de l'irradiation est décomposé en deux : le gonflement gazeux et le gonflement solide.

Gonflement gazeux

Le gonflement gazeux est créé par les gaz présents dans le combustible. En début de vie les gaz résiduels de frittage tel que le CO et CO₂ y contribuent dans une moindre mesure. Dans la suite de l'irradiation, les gaz produits par les réactions de fission (xénon, krypton) sont peu solubles dans le réseau cristallin (U,Pu)O₂ et vont de ce fait avoir tendance à migrer dans le combustible avec deux types de conséquences. Pour des températures intermédiaires (1000°C-1400°C) les gaz de fission vont se regrouper dans des bulles engendrant ainsi un gonflement du combustible. Pour des températures élevées (> 1800°C), la majorité des gaz de fission sera relâchée dans les volumes libres internes de l'aiguille engendrant ainsi un accroissement de la pression appliquée sur la gaine et une dégradation des transferts thermiques.

Les modèles développés dans les codes de calculs RNR "1D½" pour simuler le gonflement gazeux sont très différents les uns des autres. Nous présentons dans cette section les différences et les hypothèses utilisées pour chacun de ces codes "1D½".

Dans le code FIBER-OXIDE (Chine), le gonflement gazeux est modélisé à l'aide d'une formulation empirique qui dépend du burnup « Bu », de la température « T » et de la densité initiale du combustible « fdens ». Elle s'exprime [MATPRO 01] :

$$\left(\frac{\Delta V}{V_0}\right)_{gaz}^{Fiber-Oxide} = 2.617 \times 10^{-39} \times fdens \times \Delta Bu \times (2800 - T) 11.73 e^{-0.0162(2800-T) - 2.4 \times 10^{-10} Bu \times fdens} \quad (I-4)$$

Le code LIFE II, propose une formulation de gaz parfait simple dans la zone de restructuration défini par :

$$\left(\frac{\Delta V}{V_0}\right)_i^{LIFE} = \frac{n_i R \bar{T}_i}{V_i (P_i + P_i^i)}, \text{ avec } P_i = -(\sigma_r^i + \sigma_\theta^i + \sigma_z^i)/3 \quad (I-5)$$

où $(\Delta V/V_0)_i$ correspond à la déformation volumique de la région i , V_i le volume original de la région i , n_i nombre de moles de gaz restant dans la région, \bar{T}_i la température moyenne dans le gaz qui est considéré identique à la température de la région, $\sigma_{r,\theta,z}^i$ les contraintes moyennes dans la région i , P'_i un terme constant similaire à la tension de surface mais appliqué sur la région entière i et R la constante universelle de gaz parfait. Dans la zone non restructurée, le changement de volume lié à la pression interne des bulles de gaz est considéré comme négligeable. Au cours du temps, des améliorations ont toutefois été proposées, notamment par Poeppel [Poeppel 71] qui inclut la migration, la coalescence et le relâchement de bulle de gaz dans le code LIFE II.

Le code American FEAST-OXIDE [Karahan 09] propose un modèle de gonflement gazeux plus physique que les autres. Ce dernier prend en compte trois types de gonflement de bulle de gaz, à savoir, le gonflement intra-granulaire, le gonflement des bulles sur la face des grains et le gonflement des bulles aux bords des grains, défini comme suit :

$$\left(\frac{\Delta V}{V_0}\right)_{gaz}^{Feast-Oxide} = \left(\frac{\Delta V}{V_0}\right)_f^{Feast-Oxide} + \left(\frac{\Delta V}{V_0}\right)_e^{Feast-Oxide} + \left(\frac{\Delta V}{V_0}\right)_{int}^{Feast-Oxide} \quad (I-6)$$

avec $\left(\frac{\Delta V}{V_0}\right)_{gaz}^{Feast-Oxide}$ le gonflement gazeux total, $\left(\frac{\Delta V}{V_0}\right)_f^{Feast-Oxide}$ gonflement des bulles sur la face des grains, $\left(\frac{\Delta V}{V_0}\right)_e^{Feast-Oxide}$ gonflement des bulles aux bords des grains et $\left(\frac{\Delta V}{V_0}\right)_{int}^{Feast-Oxide}$ le gonflement gazeux intra-granulaire. Le développement de ces termes n'est pas disponible dans la littérature publique, nous ne pouvons donc pas les détailler.

Les codes Russe BERKUT [Veshchunov 15] et Japonais CEPTAR [Ozawa 06] prennent en compte gonflement gazeux mais ne présentent pas dans la littérature les équations constitutives de leurs modèles.

Le code GERMINAL [Lainet 19] n'a pas retenu de contribution du gonflement gazeux considérant que son impact en régime stationnaire est négligeable dû au fort taux de relâchement dans les conditions du cœur interne type ASTRID.

Gonflement solide

Le gonflement solide entraîne une variation de volume du combustible induit par l'irradiation. Ce dernier est le résultat de deux phénomènes principaux, à savoir, la formation de précipités métalliques ou la mise en solution des produits de fission solide et l'expansion des produits de fission volatils (Cesium en majorité).

Généralement les codes actuels utilisent des modèles empiriques qui dépendent du burnup et des paramètres ajustés sur des résultats expérimentaux.

Pour le code Russe BERKUT [Veprev 18], les données empiriques issues des travaux de [Assmann 77] et [Franklin 84] ont mis en évidence que le taux de gonflement de l'oxyde est constant au cours du temps et égale à 1%/10GWD/MTU jusqu'à un burnup de 50GWD/MTU et jusqu'à une température de 1300 C°. Pour prendre en compte la densification du combustible qui apparaît en début d'irradiation, le taux de gonflement le plus faible utilisé est de 0.4%/10GWD/MTU jusqu'à 10GWD/MTU [Lambert 92] :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\Delta V}{V_0}\right)_{solide}^{Berkut} &= 0.4 * \beta \quad si \quad 0 \leq \beta < 10GWD/MTU \\ \left(\frac{\Delta V}{V_0}\right)_{solide}^{Berkut} &= 0.8 * \beta + 1 * \beta \quad si \quad 10GWD/MTU \leq \beta < 50GWD/MTU \end{aligned} \quad (I-7)$$

où $\left(\frac{\Delta V}{V_0}\right)_{solide}^{Berkut}$ est le gonflement volumique du combustible en pourcentage, et β le burnup en GWD/MTU.

Dans le code FIBER-OXIDE [Gao 17], le gonflement solide dépend du burnup mais aussi de la porosité initiale $fdens$ du combustible :

$$\left(\frac{\Delta V}{V}\right)_{solide}^{Fiber-Oxide} = 7.435 \times 10^{-13} fdens \times \Delta Bu \quad (I-8)$$

Les études expérimentales réalisées par les Américains (FEAST-OXIDE [Karahan 09]) sur le gonflement gazeux ont montré que le gonflement induit par le césium à basse température est de 0.47%/at.% et de 0.19%/at.% pour les autres produits de fission solides. Néanmoins le taux de relâchement du césium étant fortement dépendant de la température, une formulation basée sur les travaux de [Matthews 80] a été proposé pour évaluer le gonflement du césium :

$$\frac{dS_{sc}}{dt} = 5.55 \times 10^{-15} R - 2 \times 10^{-4} \exp\left(-\frac{12280}{T}\right) S_{cs} \quad (I-9)$$

$$S_{sc} = \left(\frac{\Delta V}{V_0}\right)_{césium}^{Feast-Oxide}$$

où S_{sc} est le gonflement induit par le césium en pourcentage, R est la dérivée temporelle du taux de combustion (W/kg), T est la température (K). Le premier terme correspond à la production des produits de fission et le second terme représente le relâchement du césium.

Dans le code LIFE II, le gonflement solide dû au produit de fission est simplement calculé en spécifiant le volume solide créé et en le multipliant par le nombre de fission se produisant dans chacune des régions du combustible.

Dans code GERMINAL [Lainet 19], le modèle de gonflement induit par les produits de fission solides permet de tenir compte du gonflement induit par les produits de fission solides et volatils (en majorité le césium) :

$$\left(\frac{\Delta V}{V_0}\right)_{solide}^{Germinal} = A\tau + B(1 - \tau_{rel}^{VFP})\tau \quad (I-10)$$

où A et B correspondent respectivement au gonflement induit par les produits de fission solides et volatils, τ le taux de combustion fractionnaire et τ_{rel}^{VFP} le taux de relâchement des produits de fission volatils.

Dans les codes de calculs RNR "1D½" présentés, les gonflements gazeux et solide sont définis comme étant des déformations libres isotropes : $\varepsilon_r, \varepsilon_\theta$ et ε_z étant identiques. Le tenseur de déformation thermique " $\bar{\varepsilon}^{th}$ " et le tenseur de déformation dû aux gonflements gazeux et solide " $\bar{\varepsilon}^g$ " sont introduits dans la loi de comportement du modèle mécanique (voir équation (I-11)). Cette loi de comportement permet de prendre en compte l'ensemble des déformations élastique et anélastique que subit le combustible durant l'irradiation. Sa formulation est généralement la même pour l'ensemble des codes de calculs RNR "1D½" :

$$\underline{\underline{\bar{\sigma}}} = \underline{\underline{E}} : (\underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}^{tot} - \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}^{plast} - \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}^{fluage} - \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}^{th} - \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}^g) \quad (I-11)$$

$$\underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}^{fluage} = \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}^{fluage}_{th} + \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}^{fluage}_{irr}$$

où $\bar{\sigma}$ correspond au tenseur de contrainte, $\underline{\underline{E}}$ est le tenseur de Hooke du 4ème ordre, $\bar{\varepsilon}^{tot}$ le tenseur de déformation total, $\bar{\varepsilon}^{plast}$ le tenseur de déformation plastique, $\bar{\varepsilon}^{fluage}$ le tenseur de

déformation dû au fluage thermique et d'irradiation. La résolution du modèle mécanique permettra ainsi d'évaluer le champ de déplacement résultant de ces déformations et donc d'évaluer l'impact de ces déformations sur l'évolution de la taille jeu.

I.2.2.3 Fragmentation du combustible

La fragmentation du combustible est le premier phénomène qui apparaît durant l'irradiation. En effet, dû au fort gradient de température apparaissant durant la montée en puissance, la limite à rupture du combustible est atteinte. Un réseau de fissure apparaît et divise la pastille en plusieurs fragments. Comme nous pouvons le constater sur la Figure I-13, les différentes coupes longitudinales et transversales permettent d'identifier trois types de fissures. La coupe transversale permet d'identifier les fissures radiales et circonférentielles, la coupe longitudinale d'identifier les fissures axiales. Les fissures circonférentielles moins nombreuses apparaissent durant les phases de retour à froid sous l'effet des contraintes résiduelles induites par les déformations irréversibles en fonctionnement. Dans notre étude nous nous intéresserons plus particulièrement aux fissures radiales comme expliqué ci-après.

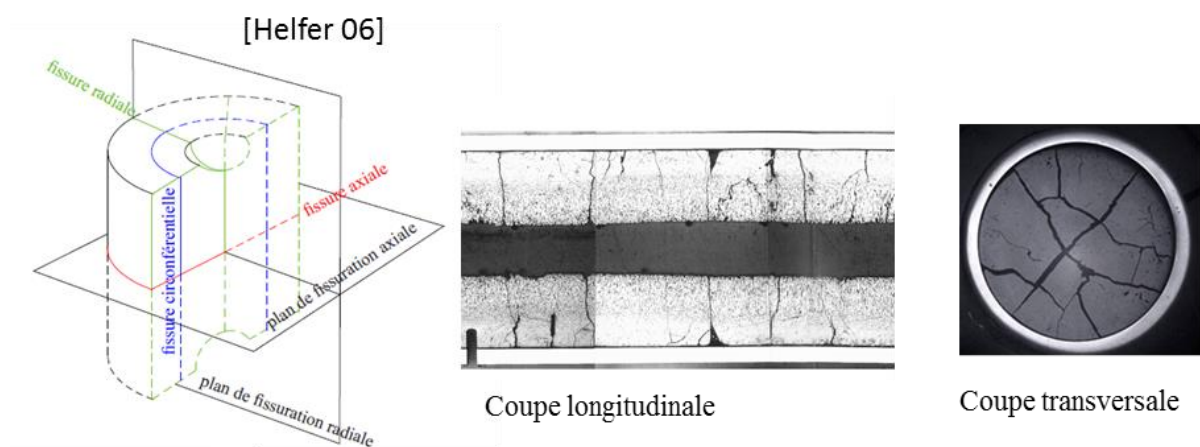


Figure I-13 : Création d'un réseau de fissures radiales, longitudinales et circonférentielles

Il a été montré que la fragmentation du combustible a un impact non négligeable sur le rattrapage de jeu. En premier lieu la dilatation thermique induite par la différence de température moyenne pastille-gaine entraîne une dilatation différentielle combustible gaine qui réduit la taille du jeu initial proportionnellement à la puissance déposée (étape 1 de la Figure

I-14). Par ailleurs le gradient de température dans la pastille induit des contraintes thermomécaniques qui provoquent la fragmentation du combustible (Figure I-13).

L'équilibre mécanique du fragment sous l'effet des contraintes thermiques entraîne une déformation élastique qui génère une courbure des surfaces inter-fragment comme illustré sur l'étape 2 de la Figure I-14. Cette courbure et la condition de contact entre les fragments de pastille induisent une augmentation significative du déplacement radial en comparaison avec une pastille non fragmentée (ΔU_r sur la Figure I-14).

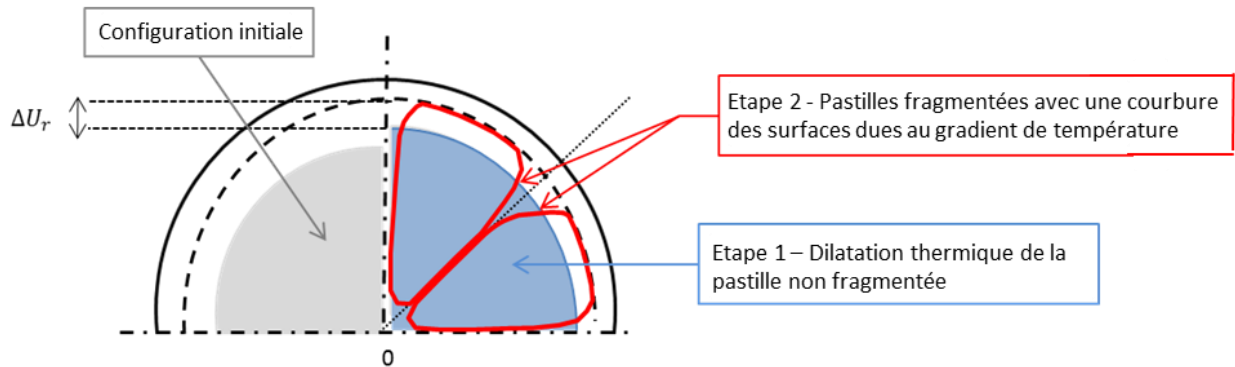


Figure I-14 : l'impact du gradient de température sur une pastille fragmentée et non fragmentée

Mise en diabolo de la pastille [Helfer 06] [Michel 13]

Le phénomène décrit précédemment s'accompagne d'une mise en diabolo du fragment de pastille du fait de la condition à la limite de surface libre sur le plan inter-pastille (Figure I-15). La courbure axiale des fragments de pastille augmente significativement le déplacement radial au plan inter-pastille permettant une fermeture du jeu pastille-gaine dans ce plan. Ainsi le rattrapage du jeu combustible gaine dépend fortement de la position axiale entre les plans médian et inter pastille comme illustré sur la Figure I-15 b).

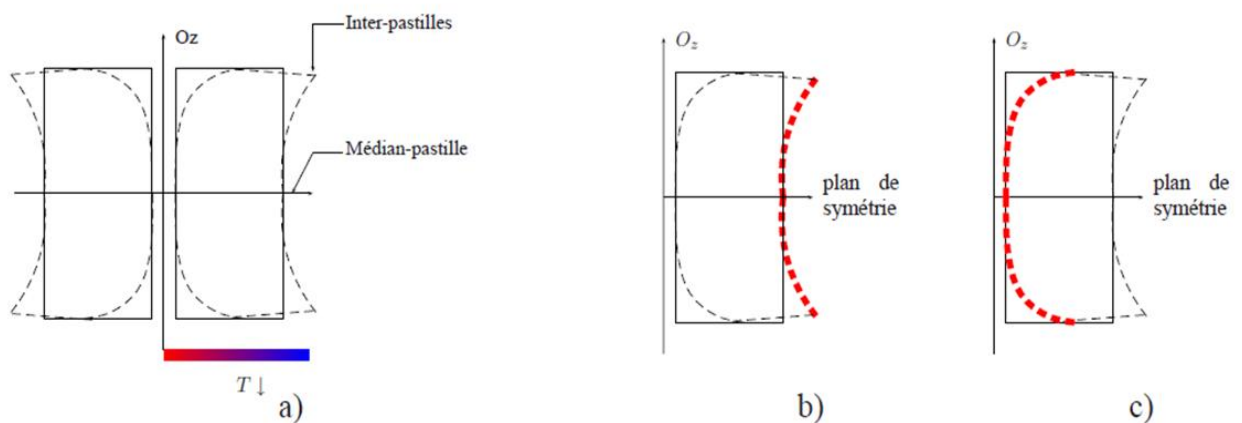


Figure I-15 : Représentation de la forme en diabolo de la pastille combustible [Helfer 06]

Modèles actuels utilisés pour simuler le mouvement des fragments

L'ensemble des codes de calculs RNR "1D½", modélise l'effet du gradient de température sur une pastille non fragmentée induisant une dilatation thermique de la pastille (Figure I-12 et étape 1 de la Figure I-14) et contribuant au rattrapage du jeu pastille-gaine comme expliqué dans la section I.2.2.1. Pour la fissuration du combustible, l'ensemble des codes disposent de loi de comportement mécanique permettant de prendre en compte l'effet de la fissuration sur les propriétés mécaniques du combustible lorsque la contrainte à rupture est atteinte. En revanche l'impact du gradient de température sur le mouvement des fragments de pastille n'est pas modélisé. En effet, une représentation 1D ne permet pas de mettre en place les conditions limites nécessaires pour simuler la fragmentation de la pastille combustible. La prise en compte de ce phénomène nous semble nécessaire afin d'obtenir une bonne estimation de l'évolution de la température du combustible durant l'irradiation, notamment pendant la première montée en puissance.

A défaut d'une modélisation détaillée des mécanismes physiques de rattrapage du jeu certains codes de calculs RNR "1D½", ont mis en place un modèle appelé « modèle de délocalisation » permettant de représenter globalement en 1D le mouvement radial des fragments de pastille et son impact sur le transfert thermique entre la pastille et la gaine (voir figure ci-dessous). C'est le cas des codes GERMINAL [Lainet 19], FEAST OXIDE ([Karahan 09] et [Karahan 10]) et FIBRE OXIDE [Gao 17].

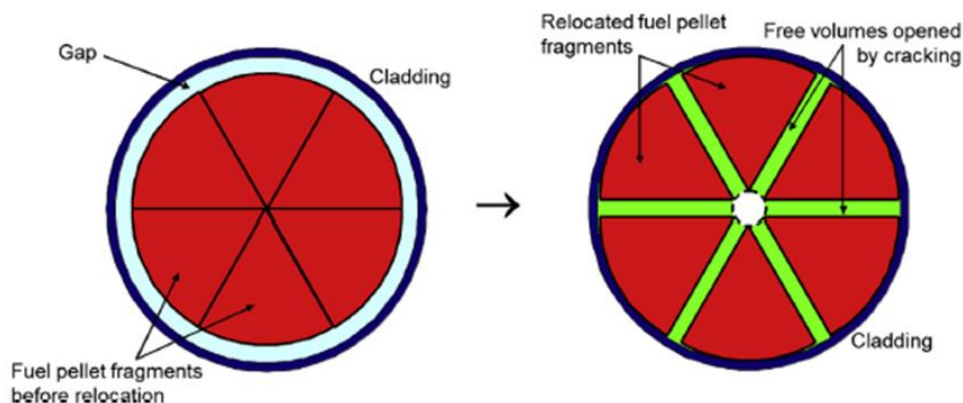


Figure I-16 : Illustration de la délocalisation radiale des fragments [Lainet 19]

Les modèles de délocalisation sont généralement basés sur une équation empirique dépendant de plusieurs paramètres (la formulation dépend des codes) qui sont recalés sur des mesures expérimentales. Les ajustements réalisés sur les paramètres de ce modèle de délocalisation

permettent d'obtenir des résultats numériques en accord avec les résultats expérimentaux. Ce modèle reste toutefois non prédictif de par sa formulation. Le modèle de délocalisation permet donc de reproduire les principaux phénomènes responsables de l'évolution de la taille du jeu pastille-gaine. Nous avons pris l'exemple de l'effet de la fragmentation et de la forme en diabolo induit par le gradient de température mais d'autres phénomènes responsables du rattrapage du jeu pastille-gaine qui ne sont pas clairement identifiés sont également pris en compte indirectement dans ce modèle de délocalisation. A titre d'exemple, l'impact du gonflement gazeux sur le rattrapage du jeu dans le code GERMINAL.

Description du modèle de délocalisation proposé dans le code GERMINAL

Le modèle de délocalisation de GERMINAL est basé sur une déformation anélastique fictive homogène " $\bar{\epsilon}^{déloc}$ " qui est prise en compte dans la loi de comportement mécanique du combustible.

$$\bar{\sigma} = \underline{\underline{E}} : (\bar{\epsilon}^{tot} - \bar{\epsilon}^{plast} - \bar{\epsilon}^{fluage} - \bar{\epsilon}^{th} - \bar{\epsilon}^g - \bar{\epsilon}^{délocalisation}) \quad (I-12)$$

Dans GERMINAL [Lainet 19], la vitesse de déformation de délocalisation est définie comme suit :

$$\dot{\epsilon}_{déloc}(t) = \frac{U_r^{max}(t) - U_r(t)}{R_{pellet}^{ext}(0)} \frac{1}{\bar{t}_0} \quad (I-13)$$

où $U_r^{max}(t)$ est la limite supérieure du déplacement radial (m) (voir équation (I-14)),
 $U_r(t) = R_{pellet}^{ext}(t) - R_{pellet}^{ext}(0)$ est le déplacement radial au bord extérieur de la pastille (m),
 $R_{pellet}^{ext}(t)$ et $R_{pellet}^{ext}(0)$ sont respectivement le rayon extérieur de la pastille à l'instant courant et à l'instant initial (m) et \bar{t}_0 une constante de temps (s) (voir référence [Lainet 19] pour plus de détails).

$$U_r^{max}(t) = Min(1, \omega(x)) \cdot (R_{clad}^{int}(t) - \delta_{JOG}(t) - R_{pellet}^{ext}(0)) \quad (I-14)$$

avec R_{clad}^{int} le rayon interne de la gaine (m), δ_{JOG} l'épaisseur du JOG (m) et ω une fonction pondération qui dépend d'une variable x sans dimension s'exprimant comme suit :

$$x(z, t) = \frac{gradT(z, t)}{gradT_{ref}} \quad (I-15)$$

$$gradT(z, t) = \frac{T_{pellet}^{int}(z, t) - T_{pellet}^{ext}(z, t)}{R_{pellet}^{ext}(z, t) - R_{pellet}^{int}(z, t)}$$

avec $gradT$ le gradient radial de température moyen dans la pastille à une position axiale donnée (K / m), $gradT_{ref}$ représente le gradient de température de référence menant à la fermeture complète du jeu (K / m), T_{pellet}^{int} et T_{pellet}^{ext} correspondent respectivement à la température interne et externe de la pastille. Les positions radiales correspondantes sont R_{pellet}^{int} et R_{pellet}^{ext} . La fonction pondération ω vise à représenter une délocalisation plus importante induite par un gradient thermique plus élevé (voir référence [Lainet 19] pour plus d'informations sur cette fonction). Un des principes de cette formulation est que la vitesse de délocalisation tend vers zéro quand le déplacement radial U_r tend vers sa limite supérieure U_r^{max} . Ceci permet d'éviter des interactions mécaniques élevées quand le contact entre le combustible et la gaine est établi. On en déduit l'expression du tenseur de déformation homogène implémenté dans la loi de comportement mécanique (équation (I-12)) du code GERMINAL :

$$\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_{déloc}(t) = \frac{U_r^{max}(t) - U_r(t)}{R_{pellet}^{ext}(0)} \frac{1}{\bar{r}_0} (\vec{e}_r \otimes \vec{e}_r + \vec{e}_\theta \otimes \vec{e}_\theta) \quad (I-16)$$

Tout comme GERMINAL, FIBRE OXIDE [Gao 17] et FEAST OXIDE [Karahana 09] utilisent une formulation empirique dans leur modèle mécanique pour représenter le mouvement radial des fragments. Mais contrairement à GERMINAL, c'est une formulation en déplacement donnée par [Inoue 03] dont l'expression est beaucoup plus simple :

$$Dr = AGD_{ci} - B \quad (I-17)$$

$$A = 0.111 \text{ et } B = 45$$

où Dr est la réduction du jeu diamétral sur une tranche donnée (μm), A un paramètre recalé, D_{ci} correspond au diamètre intérieur de la gaine (μm), G le jeu diamétral initial (μm) et B un second paramètre recalé.

Ce modèle de délocalisation, qui se rajoute au gonflement d'irradiation et à la dilatation thermique permettra ainsi de réduire la taille du jeu et d'améliorer le transfert thermique à travers le jeu.

D'autres codes qui n'ont pas de modèle de délocalisation spécifique, utilisent différents moyens pour modéliser l'effet du rattrapage du jeu. Par exemple, le code Japonais CEPTAR, modifie directement le coefficient d'échange thermique du jeu pastille-gaine afin d'obtenir une bonne estimation de la température du combustible [Ozawa 06]. D'autres, comme le code BERKUT, considère que le gonflement solide et gazeux dus aux produits de fission suffit pour expliquer la fermeture du jeu ([Veprev 18], [Boldyrev 17] et [Veshchunov 15]).

Comme expliqué dans l'introduction, la complexité des phénomènes apparaissant durant l'irradiation rend la modélisation difficile, spécialement sur une géométrie 1D. Ce qui explique la difficulté des codes de calculs RNR "1D $\frac{1}{2}$ " actuels à proposer des modèles physiques permettant de simuler correctement et de prédire l'évolution de la taille du jeu pastille-gaine.

I.3 PHENOMENE DE RESTRUCTURATION DU COMBUSTIBLE

La restructuration du combustible est un phénomène caractéristique des réacteurs à neutron rapide qui apparait en début de vie et qui est responsable de l'évolution la plus notable du combustible tant dans sa composition que sa géométrie. Comme expliqué dans la section I.1.2.1, le gradient thermique radial élevé, existant dans une pastille RNR, entraîne une migration des porosités vers le centre de la pastille. Les analyses des micrographiques réalisées en fin d'irradiation mettent en évidence la formation d'un trou central, une modification de la microstructure du combustible dans une zone où les températures estimées sont supérieures à 1800°C (formation de grains colonnaires) et une guérison des fissures dans cette même zone. Des études et des modèles ont été réalisés afin de simuler ces phénomènes ainsi que leurs impacts sur le comportement de l'aiguille combustible. L'objectif de cette section est de décrire dans un premier temps le phénomène de restructuration (migration des pores, formation du trou central, formation de grains colonnaires et la guérison des fissures) et dans un second temps de présenter les modèles actuels développés et implémentés dans les codes de calculs RNR "1D $\frac{1}{2}$ ".

I.3.1 Pores de fabrication

Plusieurs recherches ont été réalisées afin de décrire le comportement des pores présents dans le combustible nucléaire, notamment l'UO₂ [De Halas 63 67], [Nichols 67 68 69 J, A], [Sens 72], [Ronchi 74], [Clement 77 78] et [Kawamata 77]. Les pores initialement présents dans le combustible sont créés lors du processus de fabrication. Leur répartition est relativement homogène. Ces pores sont remplis avec le gaz de remplissage utilisé lors de la fabrication qui est généralement l'hélium à la pression atmosphérique. Lorsque le taux de combustion augmente, on peut noter aussi la présence du xénon et du krypton dans les pores. Ces produits de fission diffusent dans les pores ou sont balayés pendant la migration des pores. Sous l'impact du gradient de température, ces pores migrent vers le centre suivant plusieurs mécanismes de transfert de masse possible, à savoir, la diffusion de surface, de volume et par le processus d'évaporation-condensation [Welland 12].

I.3.1.1 Comportement et mécanismes de transport des pores de fabrication

Les pores issus de la fabrication peuvent migrer par diffusion des lacunes dans le volume solide, par diffusion des lacunes à l'interface solide-gaz ou par transport en phase vapeur du combustible à l'intérieur des porosités. Ainsi, ces trois mécanismes peuvent être responsables de la migration des pores de fabrication, et leur apparition varie en fonction de la géométrie du pore et des conditions de température. Les mécanismes de transport mentionnés sont représentés sur le schéma de la Figure I-17 [Welland 12].

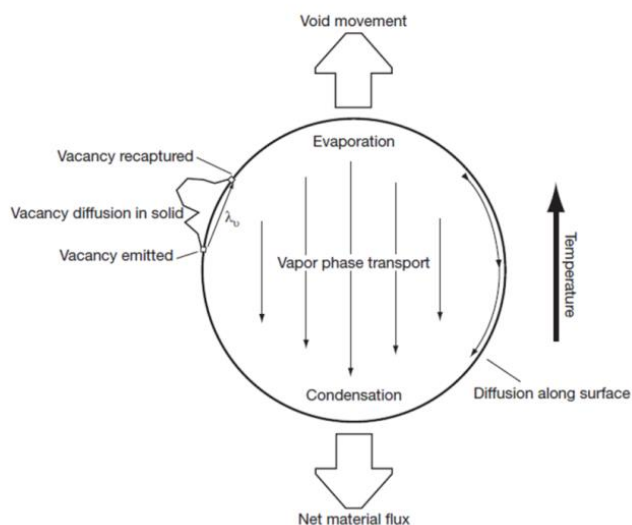


Figure I-17 : Description schématique des différents mécanismes de transport possible des pores présents dans la matrice combustible. Illustration réalisée sur un pore sphérique [Welland 12].

Des études ont été réalisées afin de déterminer le ou les mécanismes de transport prépondérants des pores de fabrication. Speight suggère la diffusion de surface et l'évaporation-condensation (transport en phase vapeur) comme les deux mécanismes principaux de migration des pores de fabrication. Il conclut qu'en dessous d'une certaine taille de pore la diffusion de surface est le principal mécanisme de transfert, tandis qu'au-dessus de cette taille c'est celui d'évaporation-condensation qui serait prépondérant. À titre d'exemple, pour une température de 2000 K, cette taille limite est de 10^{-6} m [Speight 64]. Néanmoins, d'après Guerin [Guerin 12] et Welland [Welland 12], les pores de fabrication observés durant leur migration prennent majoritairement une forme lenticulaire (voir la Figure I-18), d'une largeur 5-10 μm et d'une longueur de 50-100 μm , et sont par conséquent bien supérieurs à 10^{-6}m .

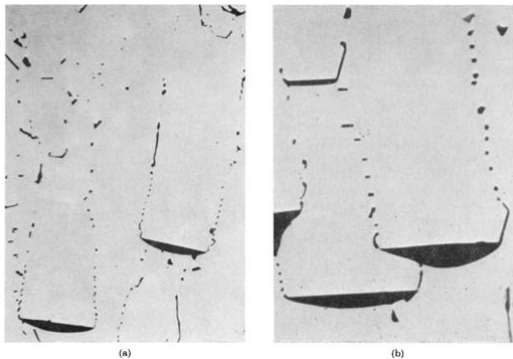


Figure I-18 : Pores lenticulaires migrant vers le centre laissant des petits pores sur leur chemins au niveau des extrémités (a) x 200 et (b) x 500 [Sens 72]

Du fait de la présence de pores lenticulaires avec une taille supérieure à 10^{-6}m , le mécanisme de transport par évaporation-condensation semble le plus probable dans les conditions RNR [Speight 64] [Sens 72] [Nichols 69 A] et [Rochi 74].

Suivant ce mécanisme de transport, les molécules d'oxydes s'évaporent de la surface la plus chaude du pore et diffusent en phase gazeuse à travers ce volume et vont se condenser sur la surface la plus froide. Durant leur migration vers le centre, les pores de forme lenticulaire (Figure I-19) balayent les grains et les joints de grains ce qui entraîne une restructuration du combustible avec une microstructure à grains colonnaires. Le rassemblement des pores au centre mène à la formation d'un trou comme l'illustre la figure ci-dessous.

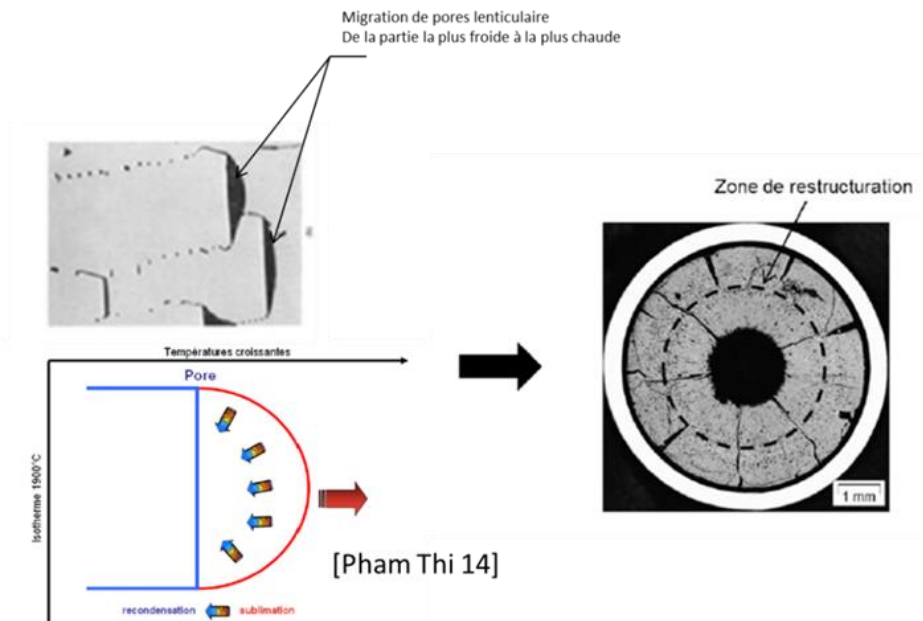


Figure I-19 : Formation du trou central et redistribution du combustible dans la zone à grains colonnaires

Des études ont été réalisées afin de comprendre comment les pores de fabrication prennent une forme lenticulaire durant leur migration. Sens [Sens 72], Oldfield et Markworth [Oldfield 69] ont ainsi réalisé une simulation 2D du mécanisme de transport en phase vapeur pour essayer de comprendre comment des pores de fabrication initialement en forme de disque prenaient une forme lenticulaire durant leur migration (voir Figure I-20). Les simulations réalisées par ces auteurs ont confirmé que les pores en forme de disque prenaient en effet la forme des pores lenticulaires laissant une trainée de petits pores derrière eux au niveau de leur circonférence. Ces résultats ont ainsi permis d'expliquer les observations expérimentales illustrées sur la Figure I-18.

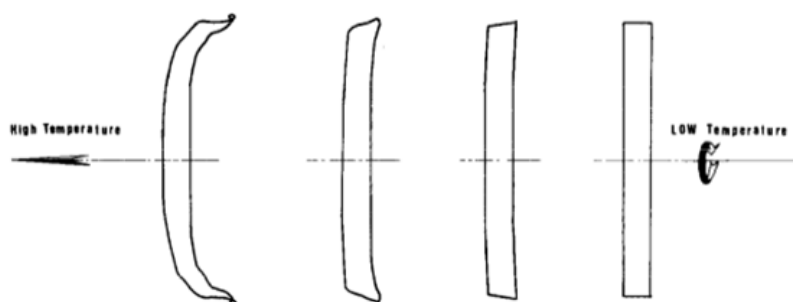


Figure I-20 : Illustration du changement de géométrie du pore initialement en forme de disque en pore lenticulaire [sens 72]

Le temps mis par les porosités de fabrication pour traverser le combustible et former le trou central dépend de leur vitesse. La cinétique de migration des pores est importante à déterminer

afin d'obtenir une bonne description du mouvement de ces pores et par conséquent du comportement du combustible durant l'irradiation. Plusieurs travaux ont été réalisés pour évaluer la vitesse moyenne des pores de fabrication. Ses travaux ont été majoritairement réalisés sur le combustible UO₂.

I.3.1.2 Cinétique de migration des pores de fabrication

Effet de la taille des pores

Speight [Speight 64] stipule une dépendance linéaire de la vitesse en fonction de la taille du pore en supposant que le gaz dans les pores est à l'équilibre avec la matrice solide l'entourant. Il déduit ainsi les expressions de la pression interne dans le pore et de la vitesse en fonction de la taille du pore supposé sphérique :

$$v_v = Ar \frac{dT}{dx} \quad (\text{I-18})$$

$$P + p = \frac{2\gamma}{r} \quad (\text{I-19})$$

où v_v est la vitesse moyenne des pores (m/s), A dépend du coefficient de diffusion ($m/s K$) (voir référence [Speight 64]), r est le rayon du pore (m), P correspond à la pression partielle du gaz de remplissage présent dans le pore (hélium) (N/m^2), p la pression en phase vapeur des espèces qui diffusent (UO₂ en phase vapeur ici) et γ la tension de surface ou communément appelé tension superficielle (N/m) [Speight 64]. Sens [Sens 72] suggère que si les pores de fabrication restent en état d'équilibre avec la tension superficielle durant leur migration, ceux-ci seraient sphériques, or il a été observé que les pores de fabrication prennent une forme lenticulaire durant leur migration. Le deuxième argument proposé par Sens, montre que si nous supposons que le pore reste en état d'équilibre avec la tension superficielle durant sa migration sous gradient thermique, nous obtiendrions une augmentation de la taille du pore, menant d'après la formulation de la vitesse établie par Speight (équation (I-18)), à une ségrégation entre des pores larges et des petits pores. Ceci n'est pas non plus observé expérimentalement. Sens conclut donc que le volume des pores de fabrication (lenticulaire durant leurs migrations) reste constant au cours de la migration et que la vitesse due au mécanisme d'évaporation-condensation est indépendante de la taille du pore. Ainsi la pression totale dans le pore n'est

plus donnée par l'équation établie par Speight (I-18) mais par celle établie par la loi des gaz parfaits.

Les hypothèses établies par Sens ont pu être validées plus tard par Rochi et Sari [Rochi 74].

Vitesse de migration par évaporation-condensation

La forme générale donnée dans la littérature [Sens 72] et [Nichols 67], pour la vitesse moyenne des pores dans l'UO₂ est définie comme suit :

$$\vec{v}_p = -N \times \Omega \times \vec{J}_{UO_2} \quad (I-20)$$

avec \vec{v}_p la vitesse moyenne des porosités (m / s), N le nombre d'Avogadro, Ω le volume molaire des molécules de la matrice combustible transportées en phase vapeur dans le gaz contenu dans la porosité (m^3) et J_{UO_2} le flux diffusif molaire de l'UO₂ en phase vapeur ($mol / m^2 / s$).

Le flux diffusif molaire J_{UO_2} de l'espèce UO₂ en phase vapeur est déterminé grâce à une loi de Fick (équation (I-21)) décrivant la diffusion de matière dans un mélange binaire UO₂-hélium ([Sens 72] et [Reid 87]).

$$\vec{J}_{UO_2} = -D_{UO_2He} (\overrightarrow{grad} c_{UO_2})_{pore} = -\frac{D_{UO_2He}}{RT} (\overrightarrow{grad} P_{UO_2})_{pore} \quad (I-21)$$

avec D_{UO_2He} le coefficient de diffusion binaire de l'espèce UO₂ en phase vapeur avec l'hélium (m^2 / s), c_{UO_2} la concentration de l'espèce UO₂ (mol / m^3), T la température macroscopique de la pastille (K), R la constante des gaz parfaits ($J / mol / K$) et P_{UO_2} la pression partielle de l'UO₂ en phase vapeur.

Pour faire apparaître le gradient thermique dans l'équation (I-21), la loi des gaz parfait reliant P_{UO_2} à la température T est utilisé :

$$\vec{J}_{UO_2} = -\frac{D_{UO_2He}}{RT} \frac{\partial P_{UO_2}}{\partial T} (\overrightarrow{grad} T)_{pore} \quad (I-22)$$

où $(\overrightarrow{grad} T)_{pore}$ est le gradient de température dans le gaz.

Cette équation est intégrée en une dimension de façon approchée avec la différence Δ des valeurs de la température entre les deux bords de la porosité séparés d'une distance D . L'équation (I-22) devient :

$$J_{UO_2}^{moy} = -\frac{D_{UO_2He}}{RT} \frac{\partial P_{UO_2}}{\partial T} \left(\frac{\Delta T}{D}\right)_{pore} \quad (I-23)$$

Des calculs numériques ont montré que le gradient de température n'évolue pas de la même manière dans l' UO_2 que dans le pore rempli d'un mélange gazeux d' UO_2 et d'hélium. La relation suivante a donc été établie :

$$\left(\frac{\Delta T}{D}\right)_{pore} = \alpha(\overrightarrow{gradT})_{matrice} \quad (I-24)$$

α étant un paramètre qui dépend de la forme du pore.

P_{UO_2} est définie à la surface du pore par une condition à la limite d'équilibre thermodynamique à l'interface solide-vapeur :

$$P_{UO_2} = P_{UO_2}|_{S-V} = p_0 \exp(-\Delta H/RT)|_{S-V} \quad (I-25)$$

où p_0 et ΔH sont respectivement la pression standard et l'enthalpie (J / mol). Cette expression (I-25) a été établie par Sens [Sens 72] et Nichols [Nichols 67].

La vitesse moyenne des pores dans l' UO_2 s'établit donc ainsi :

$$\vec{v}_p = N\Omega \frac{D_{He/UO_2} \Delta H p_0 \exp\left(\frac{-\Delta H}{RT}\right)}{R^2 T^3} \alpha(\overrightarrow{gradT})_{matrice} \quad (I-26)$$

En considérant un pore sphérique De Halas affirme que le gradient de température dans le pore $(\Delta T)_{pore}$ est approximativement égal au gradient de température de la matrice qui l'entoure $(\Delta T)_{matrice}$ [De Halas 63 67]. Ce résultat est néanmoins discutable, Nichols et Sens ont montré respectivement que $\alpha = 3/2$ pour un pore sphérique [Nichols 67] et [Sens 72]. Pour les pores lenticulaires, Nichols suppose que $\alpha = 3/2$ reste valable alors que Sens trouve $\alpha = 4$. La figure ci-dessous permet d'illustrer les résultats de la simulation 2D obtenus par Sens mettant en évidence l'impact d'un pore lenticulaire et sphérique sur l'évolution radiale de la température dans le combustible UO_2 .

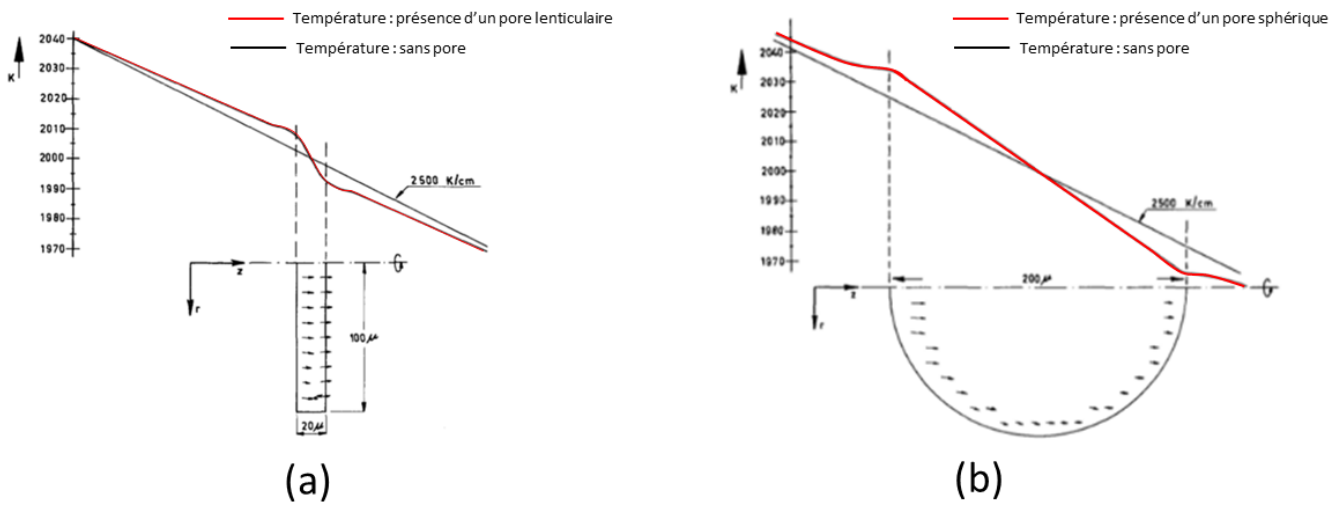


Figure I-21– Évolution de la température le long de la ligne central d'un pore lenticulaire (a) et sphérique (b) dans une matrice d'UO₂

Cette estimation de la vitesse de migration a pu être validée par les résultats de Kawamata 5 ans plus tard. Ce dernier a évalué la vitesse de migration des pores lenticulaire dans l'UO₂ grâce à des analyses réalisées sur combustible irradié (voir référence [Kawamata 77] pour plus d'informations). Les résultats obtenus montrent un bon accord avec les valeurs théoriques déduites du modèle de Sens. Kawamata a montré que la vitesse proposée par Sens [Sens 72]) était plus proche de ce qu'il a mesuré que celle proposée par Nichols [Nichols 67]), notamment dû au facteur 4 qui est bien supérieur au 3/2 donné par Nichols [Kawamata 77]. Une autre différence entre les deux auteurs provient également du coefficient de diffusion binaire D_{UO_2He} utilisé par chacun. Néanmoins, le coefficient de diffusion D_{UO_2He} des oxydes en phase vapeur retenu dans la littérature est celui utilisé par Clement [Clement 77] et Nichols [Nichols 67] et déterminé conformément à la formulation proposée par [Hirschfelder 64 page 539] qui est repris par Reid et al. [Reid 87]. Cette formulation s'appuie sur la théorie décrivant la diffusion dans un mélange binaire à des pressions modérées et qui résulte de la résolution de l'équation de Boltzmann avec la méthode de Chapman-Enskog [Hirschfelder 64] :

$$D_{UO_2He} = 0.002628 \frac{T^{\frac{3}{2}} \mu_{(UO_2,He)}}{P \sigma^2(UO_2,He) \Omega_D(T^*)} \quad (I-27)$$

$$\text{tel que : } \mu_{(UO_2,He)} = \left(\frac{M_{UO_2} + M_{He}}{M_{UO_2} * M_{He}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (I-28)$$

où M_{UO_2} et M_{He} sont respectivement les masses molaires de l'UO₂ et de l'hélium (g / mol), P la pression totale dans le pore, Ω_D l'intégrale de collision de l'oxyde UO₂ avec l'hélium à la température réduite T^* :

$$T^* = \frac{kT}{\epsilon_{(He,UO_2)}} \quad (I-29)$$

avec k est la constante de Boltzmann (J / K) et $\sigma_{(He,UO_2)}$ et $\epsilon_{(He,UO_2)}$ sont les paramètres du potentiel intermoléculaire pour une interaction hétérogène (entre l'UO₂ et l'hélium) qui dépendent respectivement des diamètres de collision σ (m) et des énergies caractéristiques ϵ (J) de l'UO₂ et de l'hélium :

$$\sigma_{(He,UO_2)} = \frac{\sigma_{He} + \sigma_{UO_2}}{2} \quad (I-30)$$

$$\epsilon_{(He,UO_2)} = \sqrt{\epsilon_{UO_2} \epsilon_{He}} \quad (I-31)$$

Pour estimer le coefficient de diffusion de l'UO₂ en phase vapeur (équation (I-27)), il est nécessaire de déterminer les grandeurs qui caractérisent l'interaction entre l'UO₂ et l'hélium (Ω_D , σ et ϵ) et qui dépendent du potentiel intermoléculaire que nous choisissons (équations (I-30) et (I-31)). D'après Reid and Sherwood (1958), le potentiel de Lennard-Jones (Figure I-22) permet de bien décrire l'interaction entre ces deux molécules [Ghosh 07] :

$$\varphi(r)_j = 4\epsilon_j \left[\left(\frac{\sigma_j}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_j}{r} \right)^6 \right] \quad (I-32)$$

$$j = He \text{ ou } UO_2$$

avec $\varphi(r)_j$ le potentiel de Lennard-Jones de l'UO₂ ou de l'hélium (Figure I-22), (ϵ_{UO_2} , σ_{UO_2}) respectivement les paramètres de Lennard-Jones de l'hélium ou de l'UO₂ et r la distance entre deux mêmes particules « j ». Le terme à la puissance 6 correspond au terme attractif dominant à grande distance, portant le nom d'interaction de Van der Waals. En revanche, l'exposant 12 du terme répulsif, dominant à courte distance, est empirique : il s'agit là de rendre compte du phénomène de répulsion de Pauli entre les électrons, qui empêche l'interpénétration mutuelle des nuages électroniques de deux molécules.

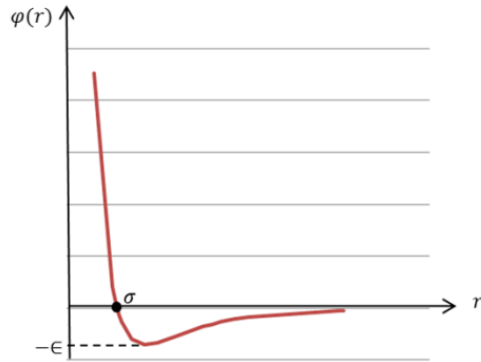


Figure I-22– le potentiel intermoléculaire de Lennard Jones

Le calcul de l'énergie caractéristique ϵ se fait donc en déterminant la valeur minimale de $\varphi(r)$ ($d\varphi/dr = 0$) et celui du diamètre de collision σ qui est la distance qui sépare deux molécules « j » (He ou UO_2 ici) quand $\varphi = 0$. Ainsi, $(\epsilon_{He}, \sigma_{He})$ et $(\epsilon_{UO_2}, \sigma_{UO_2})$ » peuvent être déterminés et $(\sigma_{(UO_2, He)}; \epsilon_{(UO_2, He)})$ calculés grâce aux formules exprimées précédemment (équations (I-30) et (I-31)). L'intégrale de collision Ω_D fonction de T^* est ensuite calculée par une corrélation établie par Neufeld et al. [Neufeld 72] :

$$\Omega_D(T^*) = \frac{A}{(T^*)^B} + \frac{C}{\exp(DT^*)} + \frac{E}{\exp(FT^*)} + \frac{G}{\exp(HT^*)} \quad (I-33)$$

où $A = 1.06036$ $B = 0.15610$ $C = 0.19300$ $D = 0.47635$ $E = 1.03587$
 $F = 1.52996$ $G = 1.76474$ $H = 3.89411$

A noter que l'intégrale de collision Ω_D est arrondie à l'unité par Sens, Nichols et Clement.

Sur la base de ces évaluations, la vitesse de migration des porosités de fabrication prenant une forme lenticulaire peut être calculée.

I.3.1.3 Modèle de restructuration développé dans les codes actuels RNR "1D½"

Dans les codes RNR "1D½", des modèles dits de restructuration permettent de prendre en compte la restructuration du combustible. Pour représenter le mouvement des pores de fabrication, les codes GERMINAL, CEPTAR, FIBER OXIDE, FEAST OXIDE, TRAFIC et LIFE-II, résolvent l'équation d'advection dite de continuité, qui est définie comme suit :

$$\frac{\partial p(t)}{\partial t} = -div(\vec{v}_p(t)p(t)) \quad (I-34)$$

Appliqué sur une géométrie 1D en coordonnée cylindrique, l'équation (I-34) devient :

$$\frac{\partial p(r,t)}{\partial t} = -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rv_{p_r}(r,t)p(r,t)) \quad (I-35)$$

où p correspond à la fraction volumique de porosité considérée initialement homogène, v_{p_r} la vitesse moyenne radiale des pores (m/s). Des critères sont toutefois ajoutés pour éviter que la porosité ne dépasse l'unité ou que celle-ci soit en dessous de sa valeur minimale. La valeur minimale de porosité à un nœud donné dépend du critère de densification maximale qui diffère en fonction des codes "1D½". Nous y reviendrons plus en détail pour le code GERMINAL dans les chapitres suivants. Notons que récemment les Américains ont proposé une nouvelle équation pour décrire le mouvement des pores [Novascone 18] :

$$\frac{\partial p(t)}{\partial t} = -div\left(\left(1 - p(t)\right)\vec{v}_p(t)p(t) - Kgrad(p(t))\right) \quad (I-36)$$

Un terme de diffusion est ajouté avec K le coefficient de diffusion effective de la porosité, le terme $(1 - p(t))$ permet d'annuler la vitesse de migration lorsque la porosité tend vers 1, ce qui arrête naturellement la migration.

Il existe des différences sur le choix de la vitesse moyenne des porosités \vec{v}_p entre les codes.

La majorité des codes "1D½" reprennent le développement donné par Sens en ajoutant quelques modifications, du fait que le combustible étudié soit l'(U,Pu)O₂ et non l'UO₂. La formulation du champ de vitesse est la même qu'établie dans l'équation (I-20) et celle du flux de diffusion de l'équation (I-22), mais en prenant en compte les autres espèces d'oxyde « i » en phase vapeur de l'(U,Pu)O₂, à savoir :

$$\vec{v}_p = -N \times \Omega \times \sum_i \vec{J}_i \quad (I-37)$$

$$i = [UO], [UO_2], [UO_3], [PuO], [PuO_2]$$

Les codes GERMINAL et CEPTAR utilisent la même expression du coefficient de diffusion binaire que celle définit dans l'équation (I-27) tout en l'appliquant sur les autres espèces d'oxyde « i » en phase vapeur. LIFE II et BERKUT [Veshchunov 11] font de même mais considèrent que l'intégrale de collision vaut l'unité comme Sens, Nichols et Clement. Pour ce

qui est du choix du facteur « α » permettant d'exprimer le gradient de température dans le pore en fonction de celui de la matrice, il subsiste des différences entre les codes "1D $\frac{1}{2}$ " :

- Dans le code GERMINAL, α est un paramètre ajusté.
- Dans le code CEPTAR, les Japonais considèrent que α vaut 4 comme Sens pour l' UO_2 mais 5 pour l'(U,Pu) O_2 .
- Dans le code LIFE II, le facteur α vaut 3/2 tout comme Nichols.
- Dans le code BERKUT, α vaut (L/d), L et d correspondant respectivement à la longueur et la largeur du pore lenticulaire [Veshchunov 11]. A titre de comparaison, en prenant les dimensions du pore lenticulaire données par Sens, α vaut 5.
- Dans le nouveau modèle de migration des porosités proposé par Novascome (équation (I-36)), la même valeur que celle établie par Sens est utilisée pour α , à savoir 4.

La taille du trou central résultant de la migration radiale des pores est évaluée dans les codes RNR "1D $\frac{1}{2}$ " simplement en regardant les nœuds où le critère de porosité maximale est atteint (ce dernier varie en fonction des codes). Ainsi, la somme des volumes des éléments où ce critère est atteint (généralement compris entre 0.97 et 1) donne le volume du trou central.

Une relation est utilisée pour assurer la conservation de la masse après migration des pores (codes GERMINAL, CEPTAR et LIFE-II).

Toutefois, les observations expérimentales ont montré que le volume des pores de fabrication n'était pas suffisant pour expliquer les tailles de trou mesurées dans les examens post irradiation. Pour assurer la conservation de la masse, des volumes libres supplémentaires à ceux issus des pores de fabrication doivent participer au développement du trou central au cours de l'irradiation.

I.3.2 Les fissures

Durant la première montée en puissance la pastille combustible se fragmente due au fort gradient de température présent dans le combustible, créant ainsi des volumes libres (voir section I.2.2.3 pour plus de détails). Les examens post-irradiations réalisés sur des aiguilles combustibles irradiées dans des RNR-Na, ont montré une guérison partielle des fissures dans la zone de restructuration sous-entendant un apport de matière dans les volumes libres induits par ces fissures.

I.3.2.1 La guérison des fissures

Comme l'illustre la Figure I-24, la restructuration du combustible permet de guérir partiellement les fissures formées durant la première montée de puissance. Pour expliquer la guérison des fissures plusieurs hypothèses ont été proposées. Bain [Bain 63] a notamment suggéré le gonflement des grains se produisant durant l'irradiation pour expliquer cette guérison des fissures. D'autres auteurs, comme [Roberts 73] suggèrent que le processus de guérison des fissures est contrôlé par un phénomène de transfert de masse (diffusion ou évaporation-condensation) indépendamment du gonflement/accroissement des grains. Néanmoins la compréhension de ce phénomène de transfert de masse reste un problème difficile. Selon Hoffmann [Hoffmann 74], le principal phénomène de transfert de masse impliqué dans le processus de guérison des fissures sous les conditions d'irradiation des RNR est l'évaporation-condensation. C'est donc le même processus que pour la migration des pores de fabrication. Pour l'expliquer, Sens et Hoffmann [Sens 72] [Hoffmann 74] suggèrent que les fissures agissent comme une source de pores lenticulaires, proche des surfaces libres, qui migrent alors dans le combustible par évaporation-condensation sous le gradient de température. Cette explication est basée sur les observations expérimentales où plusieurs petits pores lenticulaires proches des surfaces des fissures ont pu être identifiés (voir Figure I-23).

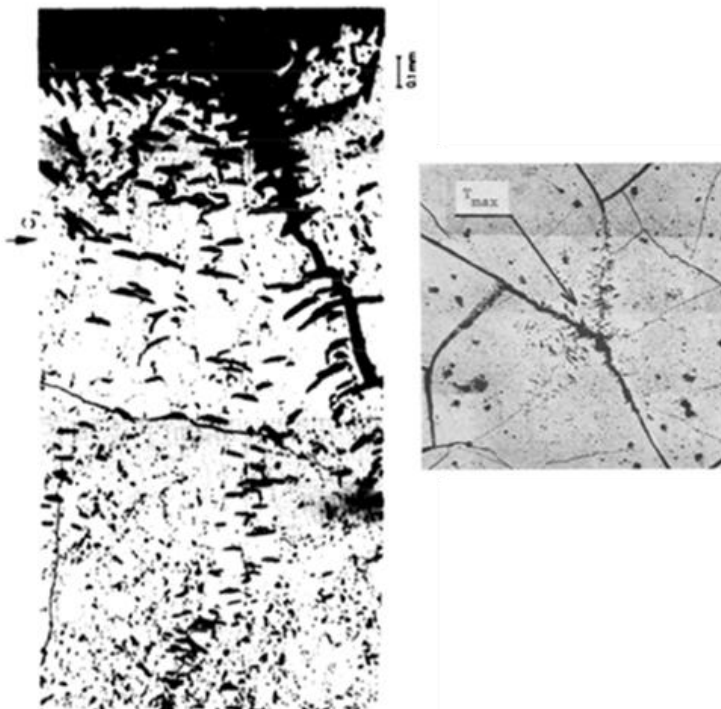


Figure I-23 – Fissure agissant comme une source of de pores lenticulaires [Sens 72] [Hoffman 74]

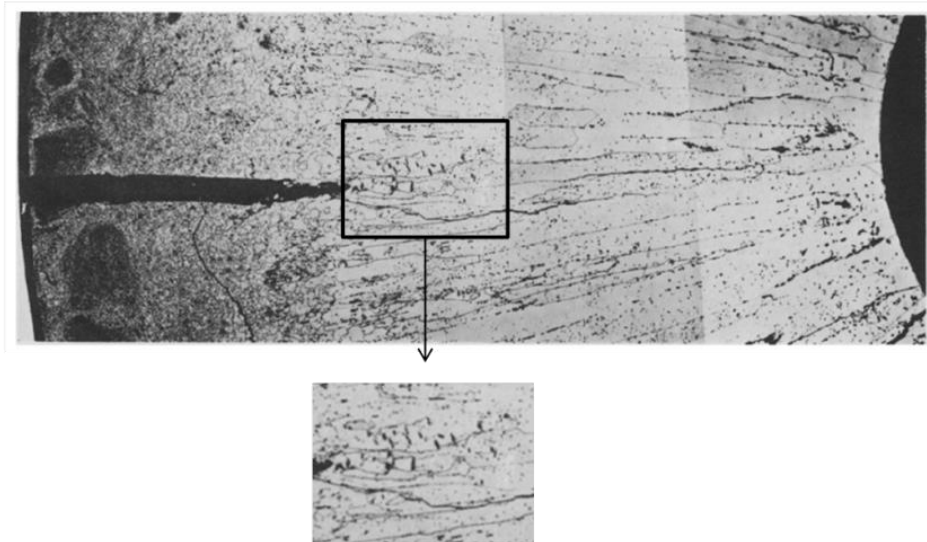


Figure I-24 – Guérison des fissures par production et migration de pores lenticulaires [Hoffman 74].

I.3.2.2 Cinétique de migration de volume induit par les fissures

Contrairement au cas des pores issus de la fabrication, il n’y a aucune étude qui a permis de caractériser parfaitement le processus de migration induit par les fissures. Toutefois, si nous faisons référence à l’hypothèse de nucléation de pores au voisinage des surfaces libres des fissures proposée par Sens et Hoffman, il semblerait que ces porosités migrent également selon le mécanisme d’évaporation-condensation [Sens 72] [Hoffman 74]. Cependant le temps total de migration peut être différent, notamment si on rajoute le temps nécessaire pour la nucléation d’un pore dans le solide.

I.3.2.3 Modèle existant dans les codes “1D½” pour représenter la guérison des fissures

Dans les codes RNR “1D½”, il existe des modèles permettant de prendre en compte la guérison des fissures. C’est le cas de BERKUT, FEAST OXIDE, FIBER OXIDE et LIFE II.

Ces derniers disposent d’un modèle permettant de prendre en considération la guérison des fissures. Pour cela, chacun de ces codes “1D½” dispose de critère permettant d’activer le processus de guérison des fissures. Lorsque la guérison des fissures est détectée, les propriétés mécaniques du combustible sont restaurées à leur valeur usuelle. À titre d’exemple dans le code LIFE II, les fissures sont supposées guéries à chaque fois que les contraintes passent en compression dans une zone où la température est supérieure à 1400°C.

Dans le code GERMINAL, il n'existe pas de modèle de guérison des fissures, en revanche un modèle de gonflement de porosité permet de prendre en compte des pores issus des fissures. La fraction volumique de porosité à l'instant courant est modifiée en prenant en compte la croissance liée à l'apport de volume par les fissures. Cette hypothèse est basée sur le mécanisme d'émission des pores par les surfaces libres expliquée par Sens et Hoffmann (voir section I.3.2.1). L'accroissement du volume des pores présents dans le combustible est supposé instantané, c'est une réactualisation de la condition initiale de la résolution du problème d'advection (voir équation (I-34)). Ainsi, avant résolution du modèle de restructuration, la fraction volumique de porosité est mise à jour tenant compte de l'incrément de gonflement. En effet, comme nous l'avons expliqué dans la section I.3.2.2, aucune étude dans la littérature ne permet de caractériser la vitesse de nucléation des pores issus des surfaces libres des fissures vers le combustible. L'hypothèse retenue dans GERMINAL est que ce processus est instantané.

BILAN DU CHAPITRE I

Ce chapitre a permis de décrire le contexte de l'étude, le comportement de l'aiguille combustible irradiée dans les RNR-Na et les codes de calculs nucléaires actuels qui permettent de simuler le comportement de l'aiguille combustible RNR durant l'irradiation.

Les notions et le vocabulaire nécessaires à notre étude ont été précisés. Les différents phénomènes apparaissant et influençant le comportement de l'aiguille combustible durant l'irradiation ont été décrits permettant de mettre en évidence le phénomène de restructuration du combustible et le rôle important du jeu pastille-gaine sur le comportement thermique du combustible. Les aspects physiques associés à la description du phénomène de restructuration et du rattrapage du jeu pastille-gaine ont été détaillé ainsi que les modèles actuellement développés dans les codes de calculs RNR "1D½" permettant de simuler ces phénomènes. Les limites de l'état de l'art ont été identifiées, notamment pour simuler l'ensemble des phénomènes responsables du rattrapage du jeu de manière physique en raison des simplifications géométriques 1D et du fait de la méconnaissance de certains mécanismes.

Compte tenu de ces limites les outils de calculs actuels, dont le code GERMINAL, utilisent une modélisation empirique appelée délocalisation, basée sur une formulation ajustée en considérant les mesures expérimentales post-irradiation.

Afin d'apporter plus de précision sur la simulation du phénomène de rattrapage de jeu, nous proposons dans le chapitre II, une modélisation 3D permettant de quantifier l'impact des différents mécanismes identifiés dans l'état de l'art. Les résultats de la simulation 3D, obtenus dans le chapitre II, seront ensuite utilisés pour proposer un modèle 1D de délocalisation à base physique ayant pour but de remplacer le modèle empirique implémenté actuellement dans le code de calcul GERMINAL. Afin d'améliorer notre compréhension du processus de migration des porosités par les fissures, connu seulement qualitativement dans la littérature, nous proposons dans le chapitre IV, une analyse 2D des mécanismes de transfert de matière par évaporation condensation au voisinage des surfaces libres créées par les fissures.

CHAPITRE II : SIMULATION 3D ET ANALYSE DES DIFFERENTS MÉCANISMES DE RATRAPAGE DE JEU

Objet du chapitre :

L'objectif de ce chapitre est de caractériser les principaux phénomènes contribuant au rattrapage de jeu pastille-gaine afin d'améliorer le modèle empirique de délocalisation du code RNR "1D½" GERMINAL. Pour compléter l'analyse des phénomènes de rattrapage de jeu du chapitre I un nouveau mécanisme lié au transfert de masse lors de la formation du trou central est identifié et modélisé dans ce chapitre. Afin de quantifier la contribution des principaux phénomènes de rattrapage de jeu, et valider ainsi l'importance du nouveau mécanisme proposé, une simulation 3D de l'aiguille combustible a été réalisée. La modélisation utilisée repose sur un chainage entre le code de calcul RNR "1D½" GERMINAL et l'application multidimensionnelle LICOS. Nous présentons ainsi dans ce chapitre les hypothèses de modélisation retenues dans notre simulation 3D, les méthodes de chainage utilisées et les développements spécifiques à la prise en compte du nouveau mécanisme proposé. Une comparaison des résultats de simulation 3D avec les mesures expérimentales est réalisée sur quatre aiguilles combustibles qui se différencient par leurs géométries et leurs conditions d'irradiation. Cette comparaison permet de valider la nécessité de prendre en compte le nouveau mécanisme de rattrapage de jeu par transfert de masse lors de la formation du trou central.

Ces travaux font l'objet de la première partie de la publication [Temmar 19].

SOMMAIRE DU CHAPITRE II

| | |
|--|-----------|
| II.1 PROPOSITION D'UN NOUVEAU MECANISME DE RATRAPAGE DE JEU ET MODELISATION..... | 65 |
| II.1.1 Identification d'un nouveau phénomène de rattrapage de jeu..... | 66 |
| II.1.2 Mécanisme représentant l'impact du transfert de masse lié à la formation du trou central sur la délocalisation des fragments. | 67 |
| II.2 SIMULATION 3D DES PHENOMENES RESPONSABLES DU RATRAPAGE DU JEU COMBUSTIBLE-GAINE | 68 |
| II.2.1 Simulation 3D..... | 68 |
| II.2.2 Géométrie, conditions limites et maillage..... | 69 |
| II.2.3 Schéma de couplage physico-chimiques et thermomécaniques..... | 71 |
| II.2.4 Modèles thermomécaniques | 74 |
| II.2.4.1 Modèle thermique..... | 74 |
| II.2.4.2 Modèle mécanique..... | 75 |
| II.2.5 Initialisation du pas de temps : délocalisation du combustible par transfert de masse | 77 |
| II.2.5.1 Représentation géométrique du transfert de masse | 77 |
| II.2.5.2 Champ de déplacement pour la simulation 3D de la délocalisation..... | 80 |
| II.3 APPLICATION ET RESULTATS..... | 82 |

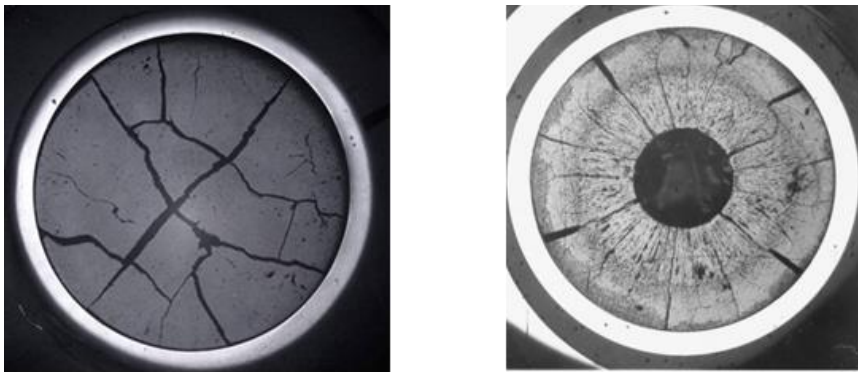
II.1 PROPOSITION D'UN NOUVEAU MECANISME DE RATRAPAGE DE JEU ET MODELISATION

L'étude bibliographique a permis de montrer que plusieurs phénomènes apparaissant en début d'irradiation sont responsables de la réduction de la taille du jeu combustible-gaine, impactant au premier ordre l'évolution de la température du combustible, de par la corrélation subsistant entre la taille du jeu et la thermique du combustible (voir équation (I-1) de la section I.2.1). Trois phénomènes principaux ont pu être caractérisés dans le chapitre I, à savoir, la dilatation thermique, le gonflement dû aux produits de fission et la fragmentation du combustible. Des modèles ont pu être développés dans les codes de calculs RNR "1D½" pour simuler ces phénomènes, néanmoins comme nous l'avons expliqué dans la section I.2.2.3, la multitude et la complexité des phénomènes apparaissant en début d'irradiation rendent l'identification et la caractérisation de tous les phénomènes participant au rattrapage de jeu compliquées. D'autre part la simplification géométrie 1D proposée par ces codes rend la simulation de certains phénomènes impossible. À titre d'exemple, parmi les trois phénomènes de rattrapage de jeu identifiés dans la littérature, la simulation de la fragmentation et la mise en diablo du combustible (voir section I.2.2.3 pour plus de détails sur ce phénomène) ne sont pas simulables sur une géométrie 1D. C'est pourquoi le code "1D½" GERMINAL a mis en place un modèle dit de délocalisation basé sur une formulation empirique (la déformation établie dans le code GERMINAL est donnée par l'équation (I-13) et dans la référence [Lainet 19]) pour représenter globalement l'impact de l'ensemble des phénomènes sur le mouvement des fragments et le rattrapage de jeu combustible-gaine induit. Les paramètres recalés en fonction des résultats expérimentaux permettent d'obtenir des rayons de taille de trou et de zone à grains colonnaires qui sont fortement corrélés à la température du combustible, en accord avec les mesures expérimentales. Néanmoins ce modèle empirique n'est pas prédictif de par la dépendance des paramètres à la géométrie et aux conditions d'irradiation du combustible étudié.

L'objectif de cette section est d'identifier à l'aide d'observations micrographiques, un nouveau phénomène de rattrapage de jeu combustible-gaine et de proposer un mécanisme physique permettant de représenter ce phénomène.

II.1.1 Identification d'un nouveau phénomène de rattrapage de jeu

Basé sur les résultats expérimentaux ([Bailly 96], [Sens 72] et [Hoffman 74]), nous avons identifié un phénomène apparaissant en début d'irradiation menant à la fermeture du jeu combustible-gaine. Ce phénomène est en théorie connue par la littérature mais son impact sur la taille du jeu n'est pas décrit. Il s'agit du phénomène de restructuration que nous avons décrit durant l'étude bibliographique réalisée dans la section I.3 du chapitre I. Plus précisément le rattrapage de jeu serait lié au transfert de masse se déroulant durant la formation du trou central menant au phénomène de guérison des fissures. Le changement notable de géométrie observé entre le moment où le combustible se fragmente et après restructuration, nous laisse penser que la taille du jeu évolue et est notablement impacté à la fin de la restructuration du combustible (voir Figure II-1).



a) Fragmentation du combustible b) Restructuration du combustible

Figure II-1 : Micrographies illustrant l'impact de la fragmentation a) puis de la restructuration b) sur la géométrie du combustible

Basé sur les observations micrographiques illustrant le changement géométrique que subit le combustible durant le processus de restructuration, nous avons proposé un nouveau mécanisme représentant l'impact du transfert de masse lié à la formation du trou central sur la délocalisation radiale des fragments.

II.1.2 Mécanisme représentant l'impact du transfert de masse lié à la formation du trou central sur la délocalisation des fragments.

Des analyses micrographiques (voir par exemple la Figure I-24) laissent supposer que le transfert de masse et la guérison des fissures observés dans la zone de restructuration conduit à augmenter le volume de cette zone et, par conséquent, se traduit par l'ouverture circonférentielle des fissures en périphérie du combustible. Ce dernier point peut expliquer une augmentation du diamètre du combustible, en comparaison à un combustible qui ne subirait pas de restructuration, et ainsi une fermeture du jeu combustible-gaine. Sur la base de ces observations, nous avons proposé un mécanisme couplé entre le transfert de masse et la délocalisation radiale des fragments du combustible pour simuler de manière physique la réduction du jeu combustible-gaine. Dans ce mécanisme, nous considérons que le volume dense du combustible qui quitte le centre de la pastille, selon le processus d'évaporation-condensation (voir section I.3 pour plus de détails sur la description de ce processus), se décompose en deux parties dans la zone restructurée: la première partie remplit les pores de fabrication et l'autre partie migre pour s'insérer entre les fragments du combustible (voir le parallélépipède rouge de la Figure II-2). Selon ce mécanisme, le changement de volume dans la zone de restructuration mènera à la délocalisation radiale des fragments (Figure II-2). Comme expliqué dans l'étude bibliographique, il semblerait que c'est le même mécanisme de transport, à savoir l'évaporation-condensation, qui permet d'expliquer la migration des pores issus de la fabrication ou des volumes libres issus des fissures. En théorie il faudrait rajouter le temps nécessaire de nucléation des porosités induites par les surfaces libres des fissures vers le combustible, mais celui-ci étant inconnu, nous considérerons ce temps de nucléation négligeable. Ce qui laisse supposer que la vitesse des pores en provenance des fissures est la même que celle des pores de fabrication. L'expression de cette vitesse est définie dans la section I.3.1.2 au paragraphe « *la vitesse des pores lenticulaires durant leur migration* ».

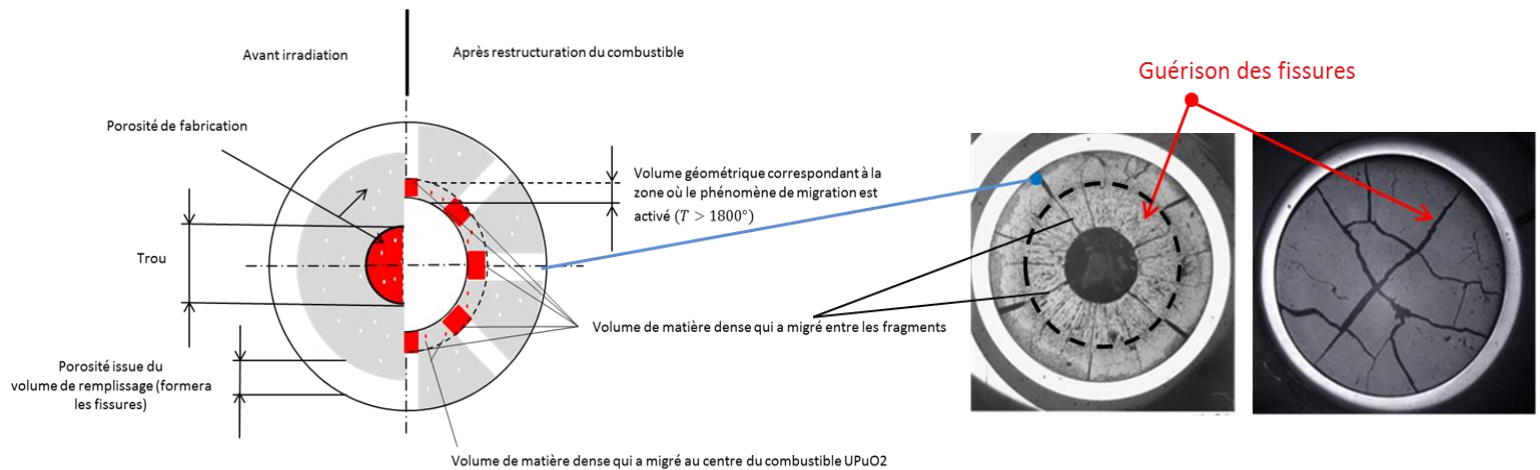


Figure II-2 : Mécanisme de transfert de masse responsable de la délocalisation radiale des fragments

Dans cette approche le principe de conservation de la masse est considéré indépendant du champ de déplacement mécanique, ce qui signifie que la contribution de la délocalisation induite par le transfert de masse se réfère à une configuration initiale du combustible. Le processus de migration est un phénomène irréversible, ainsi son impact sur le mouvement radial des fragments ne peut qu'accroître avec le temps, d'où l'intérêt de raisonner sur une configuration non déformée.

II.2 SIMULATION 3D DES PHENOMENES RESPONSABLES DU RATTRAPAGE DU JEU COMBUSTIBLE-GAINE

II.2.1 Simulation 3D

Afin de quantifier la contribution des différents phénomènes sur l'évolution de la taille du jeu combustible-gaine au cours de l'irradiation un modèle 3D a été proposé. L'objectif étant d'obtenir une description physique de l'évolution de la taille du jeu au cours de l'irradiation. La fragmentation du combustible est décrite grâce à un maillage 3D éléments finis d'un seul fragment de pastille avec des conditions aux limites appropriées (voir [Michel 13] pour la simulation 3D de l'Interaction Pastille Gaine (IPG)). Pour notre application une extension de l'approche 3D existante [Michel 13] a été proposée, afin de simuler la délocalisation imposée par la restructuration du combustible suivant le mécanisme présenté sur la Figure II-2. Cette

simulation 3D a été réalisée grâce à un couplage entre l'application RNR "1D½" GERMINAL et l'application prototypique 3D LICOS [Helfer 15], chacune étant des Outils de Calcul Scientifiques (OCS) de la plateforme logicielle PLEIADES [Marelle 17]. Dans cette section, nous présenterons ainsi les hypothèses retenues pour le modèle 3D ainsi que les méthodes de chaînage réalisées avec le code GERMINAL.

II.2.2 Géométrie, conditions limites et maillage

Basé sur les examens post-irradiation, le fragment de pastille modélisé représente 1/8 de la pastille combustible. En considérant les symétries axiales et circonférentielles du fragment étudié, nous pouvons étudier seulement un quart de ce fragment de pastille. Les conditions de symétries sont ainsi appliquées sur les surfaces $S5_c, S3_c, S4_c$ et $S4_p$ de la Figure II-3. Les interactions mécaniques avec le reste de l'aiguille combustible sont modélisées grâce aux conditions limites suivantes :

- au plan inter-pastille $S5_p$: condition de contact unilatéral $U_z \geq 0$ (permet de simuler la forme en diabol),
- au plan inter-fragment $S3_p$: condition de contact unilatéral $U_\theta \geq 0$ (permet de simuler l'effet de la fragmentation de la pastille comme illustré sur la Figure I-14 du chapitre I),
- entre la pastille et la gaine quand le contact est établi sur les surfaces $S6_p$ et $S1_c$: contact avec frottement,
- le plan médian de la pastille et de la gaine sont soumis à une relation cinématique d'ensemble avec l'hypothèse de déformation plane généralisée ($U_z = U_p$ sur $S2_p$ and $U_z = U_c$ sur $S2_c$), avec une condition d'ancrage de ces deux plans quand le jeu pastille-gaine est fermé ($U_p - U_c = constant$).
- afin d'éviter le déplacement de corps rigide, notamment au niveau des plans où les conditions de contact unilatéral sont appliquées ($S5_p$ et $S3_p$), nous imposons une raideur de rappel sur un nœud situé sur chacune des deux surfaces $S5_p$ et $S3_p$. Une étude de sensibilité a été réalisée afin que la rigidité choisie soit suffisamment faible pour éviter que la force exercée sur ces nœuds ait un impact sur l'état mécanique du fragment, tout en permettant d'empêcher le mouvement de corps rigide. Pour plus de

détails sur la méthode utilisée et l'étude de sensibilité réalisée pour appliquer cette raideur voir l'Annexe A.

Ces conditions limites ont pu être modélisées à l'aide de l'application LICOS qui utilise pour les calculs thermo-mécanique le code éléments finis CAST3M [Verpeaux 88].

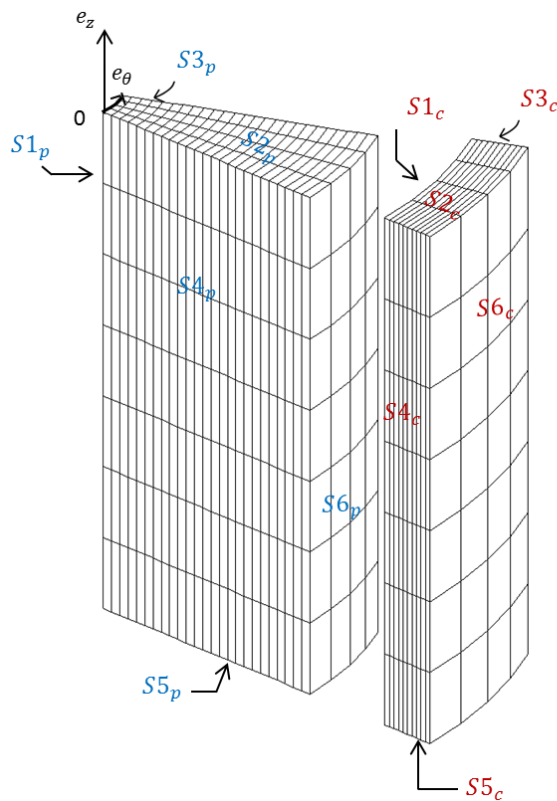


Figure II-3 : Représentation 3D d'un fragment de pastille RNR et de son tronçon de gaine associé

Maillage

Nous avons vu que durant l'irradiation la pastille combustible subissait un bon nombre de transformations (voir chapitre I section I.1.2) provoquant des déplacements conséquents. L'hypothèse des grands déplacements sous CAST3M consiste à résoudre l'équilibre mécanique sur la configuration déformée avec une approche Lagrangienne réactualisée. En théorie, il est préférable de prendre des éléments quadratiques CU20 qui offrent des fonctions de forme du second degré et des solutions mécaniques plus précises. Cependant la gestion du contact pour les nœuds qui sont situés au milieu de chaque arête n'est pas prise en compte dans les éléments d'interface de CAST3M. Cet aspect n'a pas été étudié pendant la thèse et nous

nous sommes limités à l'utilisation des éléments CUB8 comme cela était proposé dans la modélisation 3D initiale proposée par Michel [Michel 13].

II.2.3 Schéma de couplage physico-chimiques et thermomécaniques

Pour prendre en compte l'état physicochimique dans notre modèle 3D, nous utilisons une méthode de couplage chaînage entre GERMINAL et LICOS. Cette méthode nous permet d'utiliser comme données d'entrée du schéma 3D, certaines variables physiques pré-calculées par GERMINAL. Pour pouvoir prendre en compte l'ensemble des effets physico chimiques liés à l'irradiation nous avons sélectionné les variables suivantes :

- Teneur en gaz et pression dans le jeu pastille-gaine
- Température du caloporteur sodium
- Puissance volumique moyenne et burnup/taux de combustion dans la pastille
- Fraction de porosité moyenne dans le combustible
- Densification du combustible et gonflement dû aux produits de fission (section I.2.2.2 pour plus de détails)
- Rayon de la zone de restructuration/grains colonnaires
- Rayon du trou central

Toutes ces données d'entrée dépendent du temps et parfois de l'espace. Dans ce dernier cas, les champs 3D entrants sont construits à partir des champs 1D sortants de GERMINAL grâce à une technique de « krigeage » basée sur une hypothèse de géométrie cylindrique axisymétrique [Krige 51] [Matheron 63]. Le schéma de calcul 3D thermomécanique de LICOS résolu à chaque pas de temps est présenté sur la Figure II-4, où les données précalculées par GERMINAL sont imposées sous forme de chargements externes dus à l'irradiation. Une boucle de convergence thermomécanique interne est réalisée. Dans le cas où la résolution diverge, un algorithme de pas de temps adaptatif est alors utilisé.

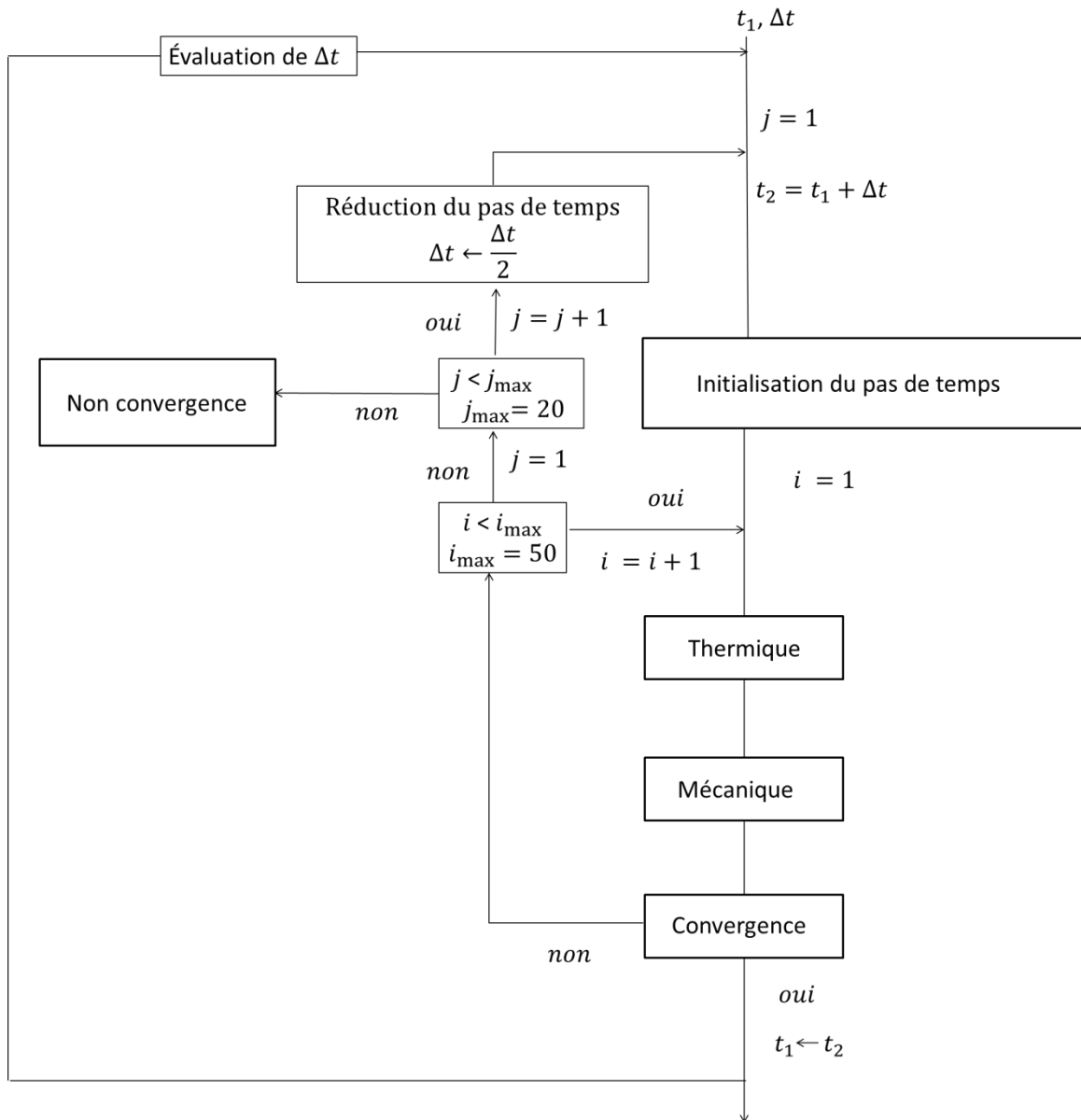


Figure II-4 : Schéma de calcul thermomécanique de LICOS

Explication du schéma de calcul thermomécanique présenté dans la Figure II-4 :

- *Initialisation du pas de temps* : initialisation des données issues de l'historique d'irradiation en fin de pas de temps (utilisation de la liste des paramètres définis au-dessus pour le chaînage).
- Calcul itératif de la solution thermomécanique en fin de pas de temps :
 - *Thermique* : calcul thermique (voir section II.2.4.1 pour plus de précision)
 - *Mécanique* : calcul mécanique (voir section II.2.4.2)

- *Convergence* :
 - Vérification de la convergence interne mécanique
 - ⇒ Méthode de résolution non linéaire du problème (voir section II.2.4.2)
 - Vérification de la convergence thermomécanique
 - ⇒ On applique donc un critère de stationnarité sur la température entre deux itérations thermo-mécaniques :
 Critère de convergence : $|T^i - T^{i-1}| < \varepsilon_T$
 où ε_T est la précision requise
 Une méthode de relaxation est utilisée pour éviter une non convergence du point fixe itératif :
 Méthode de relaxation : $T_c^i = \alpha T^i + (1 - \alpha)T^{i-1}$
 avec α le coefficient de relaxation.

- *Non convergence* : en cas de non convergence on itère 50 fois, si le calcul ne converge toujours pas, on réduit le pas de temps par deux. Si la réduction du pas de temps est trop conséquente ($jmax = 20$) le calcul s'arrête pour non convergence.

- Mise à jour des solutions et post-traitement

Les sections suivantes sont consacrées à la description de chaque modèle utilisé dans le schéma de calcul 3D présenté dans la Figure II-4.

II.2.4 Modèles thermomécaniques

Le schéma 3D utilise les mêmes modèles thermique et mécanique que GERMINAL ([Lainet 19] et [Michel 17]).

II.2.4.1 Modèle thermique

Le modèle thermique nous permet de déterminer la variation du champ de température en résolvant l'équation de la chaleur pour la pastille et la gaine. Cette équation a déjà été donnée dans le chapitre I pour les codes de calcul RNR "1D½" de façon générale (équation (I-3)), ici nous la décrivons de manière plus détaillée.

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}(\lambda \text{grad} T) + p_v \quad (\text{II-1})$$

avec T la température (K), ρ la densité volumique (kg/m^3), λ la conductivité thermique ($W/m/K$) et p_v la puissance volumique nucléaire locale (W/m^3).

En pratique, cette équation aux dérivées partielles est résolue par la méthode éléments finis avec le code Cast3M.

Le flux thermique à travers le gaz présent dans le jeu pastille-gaine est calculé comme suit :

$$\Phi = h_{gaz}(T)(T_{clad}^{int} - T_{pellet}^{ext}) \quad (\text{II-2})$$

avec $h_{gaz}(T)$ le coefficient de transfert de chaleur homogénéisé non linéaire du jeu pastille-gaine ($w/m^2/K$), T_{clad}^{int} et T_{pellet}^{ext} correspondent respectivement aux températures interne de la gaine et externe de la pastille.

Le fragment de pastille étudié et la gaine associée sont soumis à des chargements thermiques qui sont issus de la méthode de chainage expliquée précédemment, à savoir :

- La puissance volumique moyenne induite par les réactions de fission qui est appliquée comme une source dans le combustible " p_v ".
- La température du caloporteur sodium qui est appliquée comme une condition limite de Dirichlet sur la surface externe de la gaine $S6_c$ (voir Figure II-3).

II.2.4.2 Modèle mécanique

Le champ de déplacement de la pastille ou de la gaine est calculé en résolvant l'équation d'équilibre statique non linéaire (équation (II-3)) par la méthode des éléments finis (code Cast3M). Le modèle mécanique permet de tenir compte de la formation et de l'évolution du trou central résultant de la migration des pores dans la pastille (voir équation (II-8)).

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{div} \bar{\sigma} = 0 \text{ dans } \Omega \\ \bar{\sigma} \vec{n} = \vec{T}_s \text{ sur } \partial\Omega_{\vec{T}} \\ \vec{u}^{mec} = \vec{U}_{imp} \text{ sur } \partial\Omega_u \end{array} \right. \quad \text{tel que, } \partial\Omega_T \cap \partial\Omega_u = \emptyset \text{ and } \partial\Omega_T \cup \partial\Omega_u = \partial\Omega \quad (\text{II-3})$$

On considère un domaine Ω de frontière $\partial\Omega$. Ce domaine contient deux domaines $\partial\Omega_u$ et $\partial\Omega_{\vec{T}}$ qui correspondent respectivement aux frontières où l'on applique les conditions limites en déplacement \vec{U}_{imp} et les forces surfaciques \vec{T}_s . Le principe de résolution du problème thermoélastique non linéaire (II-3) est présenté dans l'Annexe B.

Le tenseur de contrainte $\bar{\sigma}$ est défini grâce à la loi de comportement associée à la pastille et à la gaine. La non linéarité du comportement de la pastille et de la gaine est prise en compte à travers plusieurs modèles mécaniques via une formulation élasto-viscoplastique basée sur la loi de Hooke (II-4), une formulation incompressible pour la plasticité et le fluage (équations (II-5) et (II-6) et en tenant compte d'un gonflement d'irradiation isotrope (gonflement solide dû aux produits de fission, voir équation (II-7)).

Si le point de calcul est localisé à l'extérieur du trou central :

$$\underline{\underline{\dot{\bar{\sigma}}}} = \underline{\underline{E}} : (\underline{\underline{\dot{\bar{\epsilon}}}}^{tot} - \underline{\underline{\dot{\bar{\epsilon}}}}^{th} - \underline{\underline{\dot{\bar{\epsilon}}}}^{plast} - \underline{\underline{\dot{\bar{\epsilon}}}}^{fluage} - \underline{\underline{\dot{\bar{\epsilon}}}}^g) \quad (\text{II-4})$$

$$\underline{\underline{\dot{\bar{\epsilon}}}}^{plast} = g(\underline{\underline{\dot{\bar{\sigma}}}}, T) \cdot \frac{\partial \sigma_{eq}}{\partial \bar{\sigma}} \quad (\text{II-5})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \underline{\underline{\dot{\bar{\epsilon}}}}_{pastille}^{fluage} = (f_{ir}(\bar{\sigma}, \dot{\phi}, T) + f_{th}(\bar{\sigma}, \dot{\phi}, T)) \cdot \frac{\partial \sigma_{eq}}{\partial \bar{\sigma}} \\ \underline{\underline{\dot{\bar{\epsilon}}}}_{gaine}^{fluage} = (f_{ir}(\bar{\sigma}, D, T) + f_{th}(\bar{\sigma}, D, T)) \cdot \frac{\partial \sigma_{eq}}{\partial \bar{\sigma}} \end{array} \right. \quad (\text{II-6})$$

Pour le transfert thermique dans le jeu, nous imposons une loi de comportement qui permet de calculer le coefficient de transfert en fonction de la rugosité au contact de la gaine, de la pastille et du coefficient d'émissivité.

II.2.5 Initialisation du pas de temps : délocalisation du combustible par transfert de masse

II.2.5.1 Représentation géométrique du transfert de masse

La formulation mécanique 3D présentée dans les sections précédentes ne permet pas de simuler directement le mécanisme de transfert de masse proposé dans la section II.1.2 (voir Figure II-2). La délocalisation du combustible induite par le transfert de masse est donc simulée par ailleurs avec une expansion volumique du combustible au niveau de la zone restructurée.

En supposant que cette expansion volumique n'affecte pas l'équilibre mécanique interne du fragment de pastille, la transformation géométrique associée est effectuée en dehors du calcul mécanique, dans le modèle « d'initialisation du pas de temps » (voir Figure II-4). La transformation géométrique est calculée à chaque pas de temps en fonction du volume dense inséré entre les fragments. Ce volume est supposé être de forme parallélépipédique.

En considérant le mécanisme de transfert de masse proposé dans la section II.1.2, le volume dense V_{tmd} qui migre dans la zone de restructuration (voir Figure II-4), peut être décomposé comme étant la somme du volume V_{tmd}^{fab} qui migre dans les pores de fabrication et du volume V_{tmd}^{rem} remplissant la zone entre les fragments (voir Figure II-5) :

$$V_{tmd}(t) = V_{tmd}^{fab}(t) + V_{tmd}^{rem}(t) \quad (II-9)$$

Selon l'équation de conservation de la masse, le volume dense total transféré V_{tmd} est donné par le volume du trou central V_{trou} , calculé à partir de la géométrie initiale (sans prendre en compte les déformations mécaniques), et la fraction volumique de porosité de fabrication présente initialement p_{ini}^{fab} comme suit :

$$V_{tmd}(t) = V_{trou}(t)(1 - p_{ini}^{fab}) \quad (II-10)$$

Le volume potentiel disponible pour le transfert de masse entre les fragments de pastille V^{remp} peut être défini approximativement comme le volume libre présent dans le jeu pastille-gaine quand le processus de restructuration a commencé (i.e quand la température maximale du combustible dépasse 1800 °C). En effet, avant que les pores commencent à migrer, le jeu est principalement réduit par la dilatation thermique de la pastille combustible. Par conséquent, nous prenons en considération la dilation thermique différentielle entre la pastille et la gaine jusqu'à une température de 1850 °C afin de déterminer ce volume potentiel disponible pour remplir la zone entre les fragments de pastille (Figure II-5). Cette dilatation thermique différentielle a été calculée analytiquement pour une pastille non fragmentée en considérant que le combustible a un comportement élastique isotrope, sous l'hypothèse des déformations plane et en supposant qu'aucune forces extérieures ne s'appliquent sur le combustible. Cette solution analytique est donnée dans le chapitre III dans la section III.2.1 pour une pastille cylindrique pleine et annulaire.

Pour l'application numérique nous considérons une température du combustible à cœur de 1850°C et de 900 °C en périphérie, et une température constante de 500 °C dans la gaine.

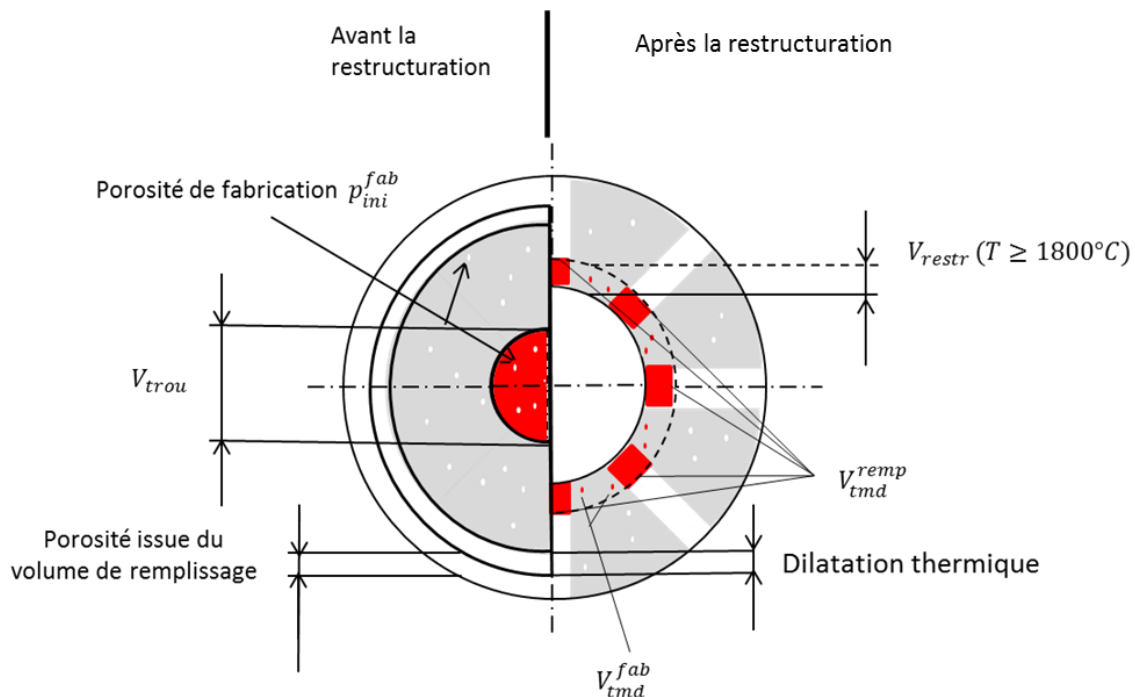


Figure II-5 : Le volume libre potentiel disponible entre les fragments

La porosité de remplissage initiale associée au volume V^{rempl} est définie comme suit :

$$p_{ini}^{rempl} = \frac{v^{rempl}}{V_{pastille}(t_{restructuration})} \quad (\text{II-11})$$

où $V_{pastille}$ est le volume de la pastille et $t_{restructuration}$ correspond à l'instant où le processus de restructuration commence.

La fraction volumique de porosité initiale disponible pour la migration des pores est alors donnée par :

$$p_{ini} = p_{ini}^{fab} + p_{ini}^{rempl} \quad (\text{II-12})$$

La fraction volumique de porosité initiale et la fraction volumique disponible pour remplir la zone entre les fragments sont supposées constantes dans la pastille. Comme proposé dans la section II.1.2, nous supposons que la vitesse des pores migrant sous le mécanisme d'évaporation-condensation est la même pour les pores issus de la fabrication et ceux issus des volumes libres/remplissage. Si nous nous référons à l'équation de migration (II-13) (détaillée dans le chapitre I à la section I.3.1.3 pour les codes de calcul RNR "1D^{1/2}"), le ratio entre la fraction volumique de porosité de remplissage et de porosité totale reste constant et est égale à sa valeur initiale γ_{ini} (équation (II-14)).

La démonstration mathématique est détaillée dans le chapitre III section III.2.2.1.

$$\frac{\partial p(x_i, t)}{\partial t} = -div(\vec{v}_p(x_i, t)p(x_i, t)) \quad (\text{II-13})$$

$$\frac{p^{rempl}(x_i, t)}{p(x_i, t)} = \frac{p_{ini}^{rempl}}{p_{ini}} = \gamma_{ini} \quad (\text{II-14})$$

où x_i représente les coordonnées spatiales, \vec{v}_p la vitesse moyenne des pores lenticulaires issus de la fabrication et du volume de remplissage (voir étude bibliographique réalisée dans chapitre I à la section I.3.1.2). Ainsi, connaissant à chaque pas de temps le volume du trou central dans la configuration initiale (V_{trou} donné par GERMINAL grâce à la méthode de chaînage expliquée dans la section II.2.3) et le ratio γ_{ini} , le volume dense V_{tmd}^{rempl} inséré entre les fragments peut être calculé de la façon suivante :

$$V_{tmd}^{rempl}(t) = \gamma_{ini} V_{tmd}(t) = \gamma_{ini} V_{trou}(t)(1 - p_{ini}^{fab}) \quad (\text{II-15})$$

Suivant l'hypothèse que l'expansion volumique de la zone de restructuration est de forme parallélépipédique on calcule l'épaisseur de cette zone avec le paramètre e suivant :

$$e = \frac{1}{2Nb_{fragment}} \frac{V_{tmd}^{rem}}{h(R_{col}-R_{trou})} \quad (\text{II-16})$$

où h est la hauteur du combustible, R_{col} et R_{trou} sont respectivement les rayons de la zone à grains colonnaires (dit de restructuration) et du trou central dans la configuration initiale et $Nb_{fragment}$ est le nombre de fragments de pastille, qui est égal à 8 suivant l'hypothèse géométrique retenue dans la section II.2.2. Le facteur 2 vient de la symétrie de notre géométrie 3D. Afin d'obtenir une meilleure estimation de l'épaisseur e , les rayons R_{col} et R_{trou} donnés par GERMINAL ont été ajustés en amont à partir des mesures expérimentales de ces rayons lors des examens post-irradiations.

II.2.5.2 Champ de déplacement pour la simulation 3D de la délocalisation

Le champ de déplacement \vec{u} utilisé pour effectuer la transformation géométrique (accroissement de volume de la zone restructurée décrite dans la section II.2.5.1) du maillage éléments finis est défini dans un repère cylindrique (u_r, u_θ, u_z) selon les hypothèses suivantes :

- Les déplacements radiaux et axiaux sont nuls.
- Le déplacement circonférentiel est égal à zéro en dehors de la zone de restructuration et est fixé par le paramètre e de l'équation (II-16) sur le bord du fragment dans la zone restructurée.

Afin d'éviter une dégénérescence du maillage éléments finis, la composante u_θ est une fonction linéaire de l'angle polaire θ définie comme suit :

$$u_\theta = a\theta + b \quad (\text{II-17})$$

a et b étant définis tel que l'équation (II-17) respecte la symétrie géométrique et la condition à la limite en bord de fragment (paramètre e de l'équation (II-16)).

$$\begin{aligned} u_\theta(\theta = 0^\circ) &= 0 \\ u_\theta(\theta = 22.5^\circ) &= e \end{aligned} \quad (\text{II-18})$$

À partir des équations (II-17) et (II-18), le champ de déplacement imposé dans la zone de restructuration $[R_{trou} ; R_{col}]$ est déterminé ainsi :

$$\begin{cases} u_\theta = e^{\frac{\theta}{22.5}} , \theta \in [0; 22.5] \\ u_r = 0 \\ u_z = 0 \end{cases} \quad (\text{II-19})$$

Le champ de déplacement \vec{u} de l'équation (II-19), représente la transformation géométrique totale associée au transfert de masse depuis le début de l'irradiation. Ainsi, à chaque pas de temps, une transformation incrémentale du maillage est définie comme suit (voir l'illustration sur la Figure II-6) :

$$\vec{x}(t_2) = \vec{x}(t_1) - \vec{u}(t_1) + \vec{u}(t_2) \quad (\text{II-20})$$

avec x les coordonnées du maillage et $(t_1; t_2)$ correspondant respectivement au début et à la fin du pas de temps. Du fait que la modification des coordonnées du maillage est réalisée en dehors du calcul mécanique (modèle d'initialisation du pas de temps sur la Figure II-4), la condition de contact unilatéral définie sur le plan inter-fragment le long de la zone restructurée doit être mise à jour au début de chaque pas de temps de la manière suivante (voir la Figure II-6) :

$$\begin{aligned} u_\theta^{tot}(r, \theta = 22.5^\circ, t_2) &= u_\theta(r, \theta = 22.5^\circ, t_2) + u_\theta^{MEC}(r, \theta = 22.5^\circ, t_2) \leq 0 \quad (\text{II-21}) \\ \Leftrightarrow u_\theta^{MEC}(r, \theta = 22.5^\circ, t_2) &\leq -u_\theta(r, \theta = 22.5^\circ, t_2) \end{aligned}$$

où u_θ^{MEC} est la solution du déplacement circonférentiel du problème thermomécanique et u_θ le déplacement effectué pour simuler l'expansion volumique du combustible induit par le transfert de masse dans la zone de restructuration (équation (II-19)).

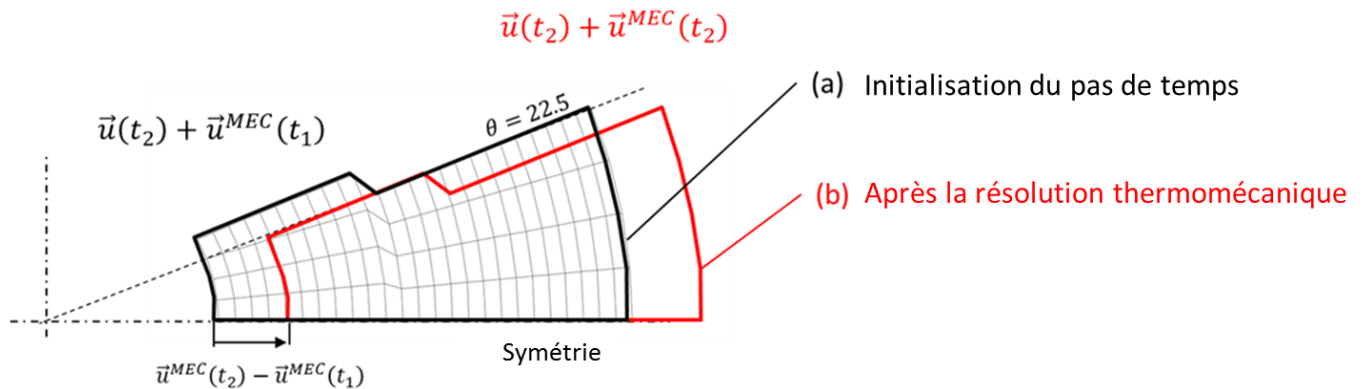


Figure II-6: Illustration de la transformation du maillage due au champ de déplacement \vec{u} avant et après la mise à jour de la condition de contact unilatéral

Grâce à la mise à jour de la condition de contact unilatéral, l'effet du transfert de masse permettra aux fragments du combustible de se déplacer et ainsi de réduire le jeu pastille-gaine durant la résolution du problème mécanique.

II.3 APPLICATION ET RESULTATS

Dans cette section, les résultats 3D obtenus avec la formulation proposée sont présentés afin de discuter de chaque mécanisme responsable de la délocalisation radial du combustible, à savoir l'effet du gradient de température sur une pastille fragmentée et non fragmentée, le gonflement solide dû à l'irradiation et le phénomène de transfert de masse. Une comparaison avec les résultats expérimentaux pour des pastilles pleines et annulaires est proposée. Ces résultats expérimentaux sont issus de quatre expériences d'irradiation réalisées dans le réacteur à neutrons rapide PHENIX [Pelletier 09] [Guidez 13] :

- Pastilles pleines : aiguille combustible N°1 et aiguille combustible N°2
- Pastilles annulaires : aiguille combustible N°3 et aiguille combustible N°4

Les historiques d'irradiation de ces quatre aiguilles sont présentés sur la Figure II-7 avec l'évolution de la puissance linéique normalisée au cours du temps. Les simulations 3D ont été effectuées sur ces quatre pastilles qui diffèrent de par leurs conditions d'irradiation et leurs géométries. La comparaison calcul-expérience est basée sur les rayons de la zone à grains colonnaires obtenus en fin d'irradiation. En effet, ce paramètre est fortement corrélé à la température maximale atteinte au centre du combustible (située au plan médian pastille) en début d'irradiation, du fait que le processus de migration menant à la restructuration du combustible est seulement activé quand la température dépasse 1800°C. Par conséquent, le critère de validation basé sur ce rayon donne une validation indirecte du calcul thermique du combustible et de son couplage avec les autres phénomènes apparaissant sous irradiation.

L'objectif principal de ces comparaisons est de discuter de la validité de la délocalisation du combustible et du mécanisme de fermeture de jeu proposé dans la section II.1. Comme expliqué précédemment, les rayons du trou central et de la zone à grains colonnaires donnés par GERMINAL ont été ajustés en amont seulement pour calculer le plus précisément possible le paramètre e (pour éviter par exemple la compensation d'erreur dans le schéma de calcul multiphysique de GERMINAL). Ainsi, le rayon de la zone à grains colonnaires déduit du calcul 3D de la température nous permettra d'évaluer la validité des mécanismes de délocalisation

proposés. La mesure finale du rayon du trou central n'a pas été incluse dans cette validation 3D car ce schéma de calcul ne dispose pas de modèle de migration et ne peut donc pas estimer son propre rayon de trou central.

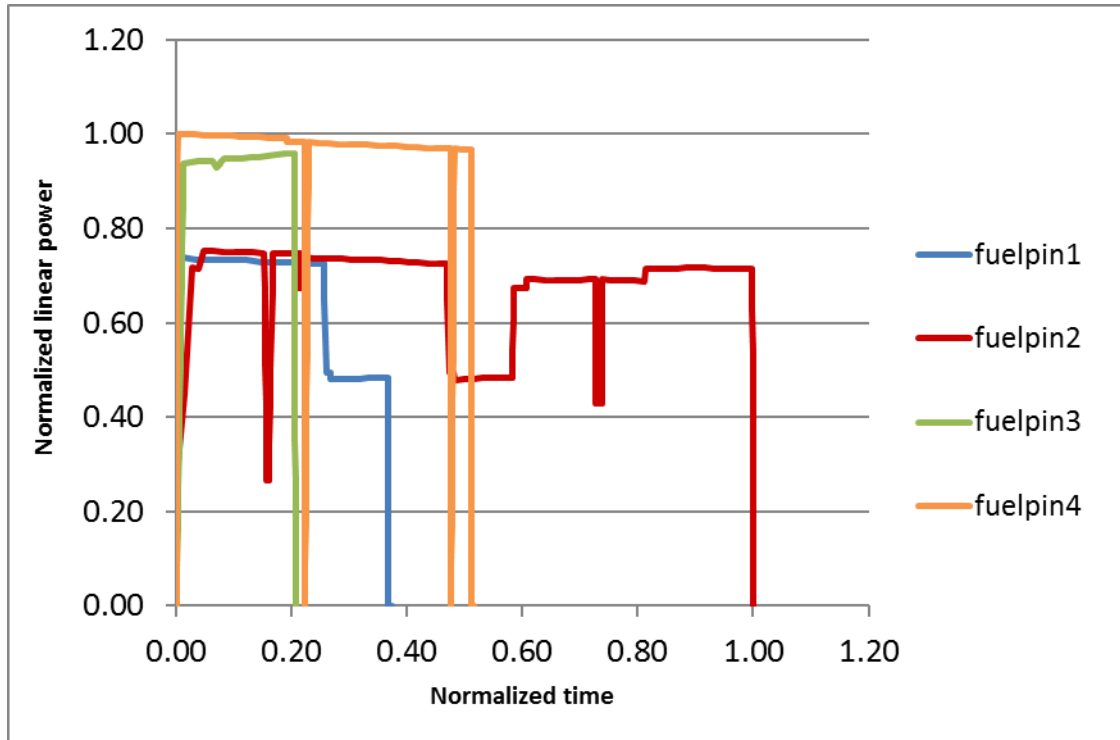


Figure II-7 : Historique de puissance linéique normalisée des 4 aiguilles

Pour mettre en évidence l'impact distinct des mécanismes proposés, nous comparons le rayon de la zone à grains colonnaires obtenu à la fin de l'irradiation pour chaque aiguille dans trois cas différents :

- Cas 1 : pastille non-fragmentée soumise au gradient de température et au gonflement solide,
- Cas 2 : pastille fragmentée soumise au gradient de température et au gonflement solide,
- Cas 3 : pastille fragmentée soumise au gradient de température, au gonflement solide avec la contribution du transfert de masse.

L'ensemble des comparaisons calcul-mesures sont données sur la Figure II-8.

- *Effet diabololo*

Comme expliqué précédemment dans le chapitre I à la section I.2.2.3, la forme en diabololo de la pastille mène à une variation du jeu pastille-gaine entre le plan médian et le plan inter de la pastille. Afin de quantifier l'impact de cette variation sur la température du combustible au plan médian-pastille, nous avons comparé les résultats 3D à la fin de la première montée en puissance avec une pastille fragmentée avec et sans la forme en diabololo¹. Comme illustré dans le Tableau II-1, l'erreur relative obtenue entre ces deux cas est négligeable. Par conséquent, dans les sections suivantes, la délocalisation radiale induite par la fragmentation de la pastille ne tiendra pas compte de l'effet diabololo.

| Pellet relative error | Fuelpin1 | Fuelpin2 | Fuelpin3 | Fuelpin4 |
|--|----------|----------|----------|----------|
| $\left(\frac{T_{\text{hourglass}}^{\text{median-plane}} - T_{\text{median-plane}}}{T_{\text{hourglass}}^{\text{mediab-plane}}} \right) * 100$ | 0,573% | 0,574% | 0,778% | 1,143% |

Tableau II-1 : Comparaison de la température maximale atteinte à la fin de la première montée en puissance au plan médian pastille avec et sans “la mise en diabololo”

- *Délocalisation radiale du combustible induite par la fragmentation et le gonflement dû aux produits de fission*

Si nous comparons sur la Figure II-8 les résultats des cas 1 et 2, nous pouvons observer que la fragmentation induit une diminution significative du rayon de la zone à grains colonnaires calculé. Cet impact est illustré également sur la Figure II-9 durant la première montée en puissance (voir l'historique de puissance linéique sur la Figure II-7) en comparant les pastilles fragmentées et non-fragmentées. Cette délocalisation radiale des fragments peut être expliquée grâce à la visualisation 2D au plan médian-pastille pour une pastille annulaire et pleine (voir Figure II-11). Comme expliqué dans le chapitre I à la section I.2.2.3, cela est dû à la courbure

¹ Pour modéliser une pastille fragmentée sans la mise en diabololo, la condition de contact unilatéral imposé sur la surface inter-fragment ($S5_p$, voir II.2.2) est modifié en une condition de symétrie.

des surfaces libres des fragments de pastille sous le gradient de température radial. Par conséquent, la température maximale atteinte à la fin de la première montée en puissance est plus petite pour une pastille fragmentée en comparaison à une pastille non-fragmentée (voir Figure II-10). Néanmoins, comme nous pouvons le voir sur la Figure II-8, en dépit de la prise en compte de la délocalisation radiale des fragments induite par le gradient de température, les rayons de la zone à grains colonnaires obtenus restent toujours trop élevés comparés aux mesures expérimentales. En effet la délocalisation induite par le gradient de température est seulement activée durant les montées de puissance. Quand la puissance maximale est atteinte, seul le gonflement solide dû à l'irradiation ($\dot{\epsilon}^g$ de l'équation (II-4) et voir chapitre I à la section I.2.2.2 pour plus de détails sur ce phénomène) permet de réduire la taille du jeu, mais ce dernier est négligeable (cf Figure II-9). La température du combustible continue donc d'augmenter (voir Figure II-10) dû aux relâchements des produits de fission qui viennent dégrader le transfert thermique dans le jeu (voir chapitre I section I.1.2.1). Ces résultats montrent qu'un autre mécanisme est nécessaire pour représenter correctement l'évolution de la taille du jeu pastille-gaine et de la température maximale du combustible après la première montée en puissance.

- ***L'impact du transfert de masse***

Comme on peut le voir sur la Figure II-8, lorsque le mécanisme de délocalisation par transfert de masse est introduit (cas 3), les rayons calculés de la zone restructurée sont en bon accord avec les résultats expérimentaux. Le rayon maximal de la zone restructurée est atteint à la fin de la première augmentation de puissance, lorsque le transfert de masse commence tout juste. Après la première montée en puissance, la délocalisation induite par le transfert de masse mène à la réduction de la taille du jeu pastille-gaine, par conséquent, la température maximale du combustible diminue comme illustré sur la Figure II-9 et la Figure II-10. Grâce à la visualisation 3D présentée sur la Figure II-12, nous pouvons observer l'ouverture des fissures en périphérie de la pastille qui est due au changement de volume de la zone restructurée implémenté dans le modèle 3D (voir section II.2.5.2).

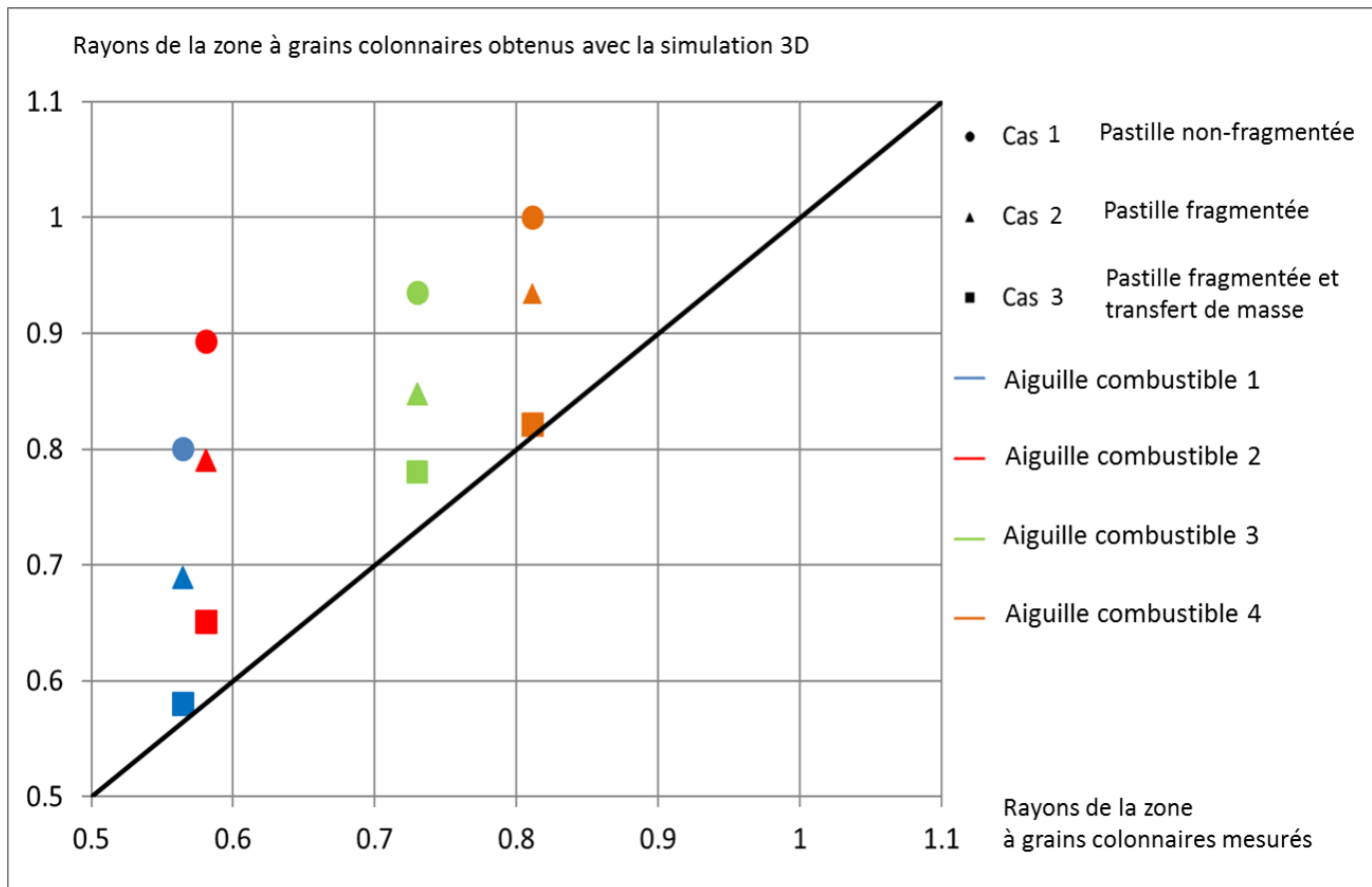


Figure II-8 : Comparaison des rayons de la zone à grains colonnaires entre le modèle éléments finis 3D et les résultats expérimentaux.

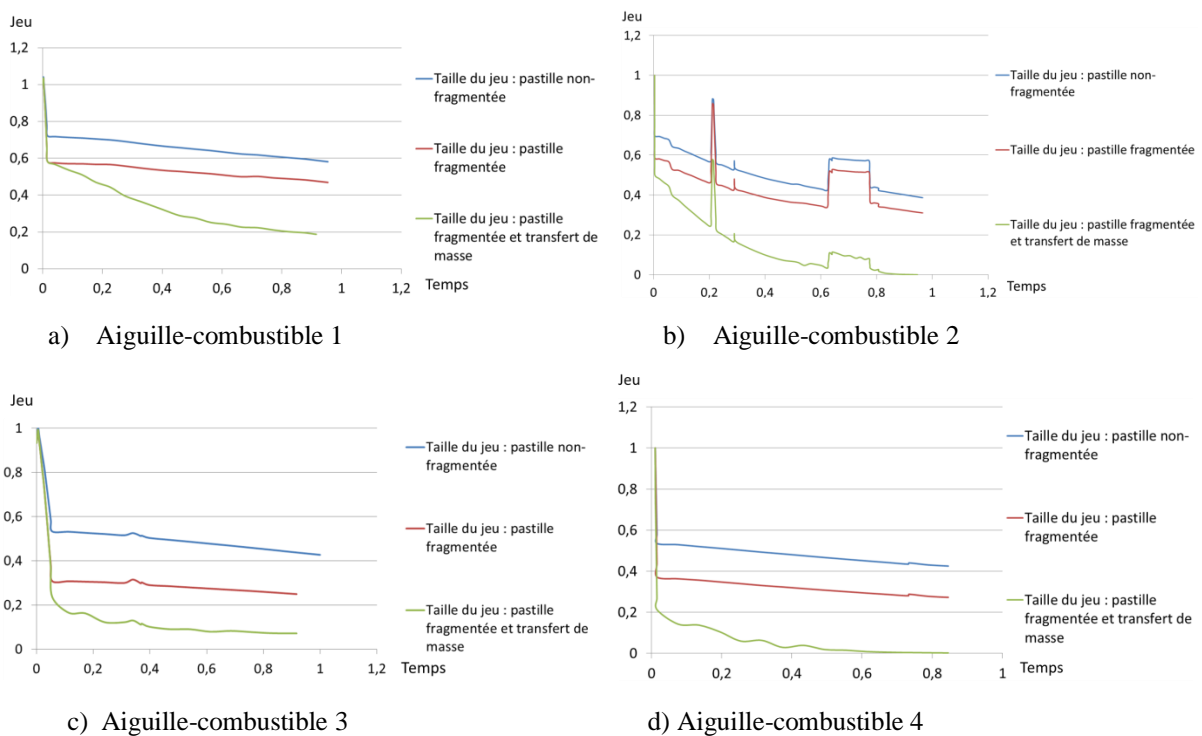


Figure II-9 : Evolution de la taille du jeu

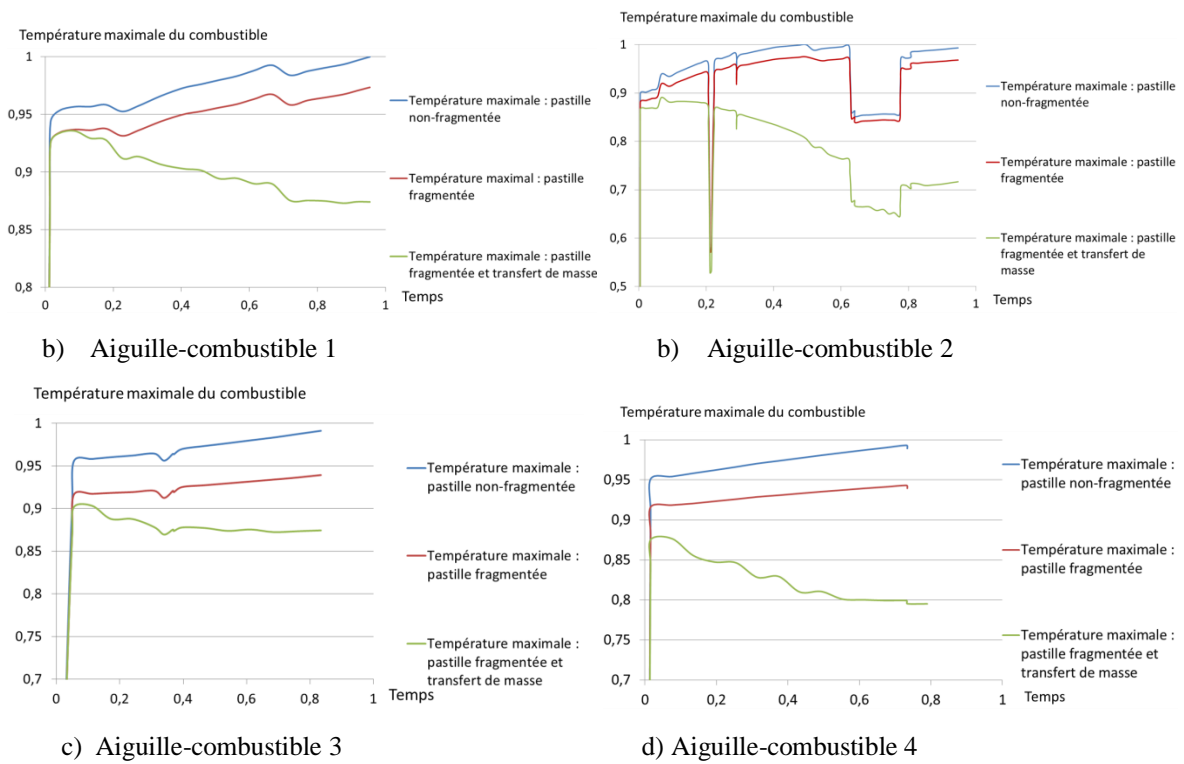


Figure II-10 : Evolution de la température maximale

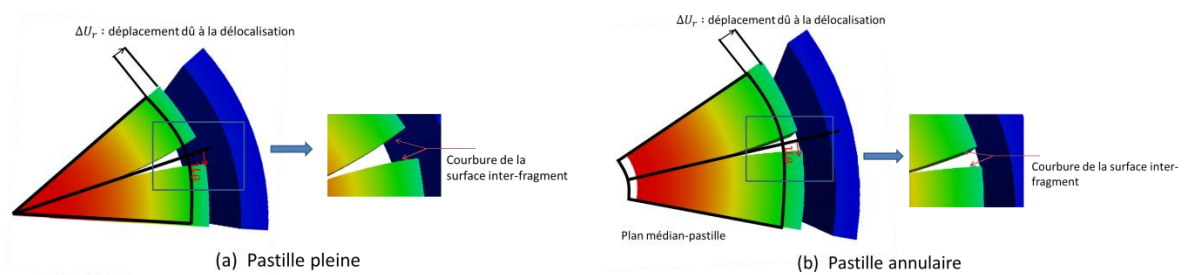


Figure II-11 : Visualisation de l'impact du gradient de température sur le déplacement radial de la pastille pour une pastille fragmentée et non fragmentée au plan médian

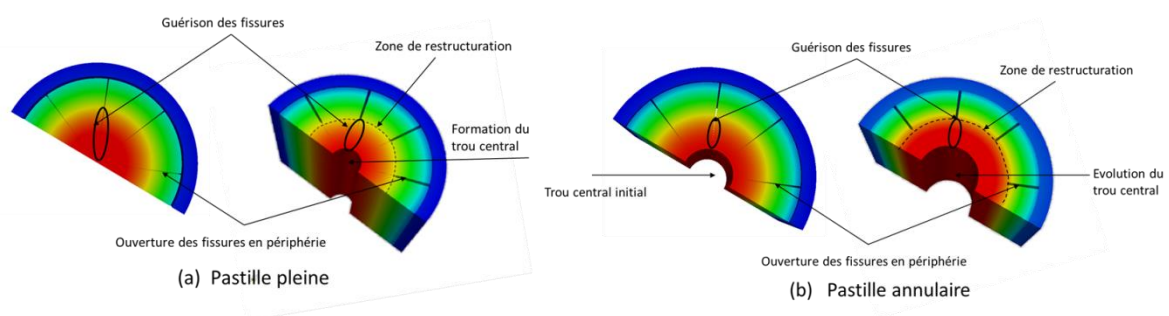


Figure II-12 : Visualisation du processus de transfert de masse dans la zone de restructuration

Pour conclure cette section, les résultats numériques 3D confirment l'importance de prendre en compte l'effet de la fragmentation de la pastille. Cependant celle-ci n'est pas suffisante pour obtenir une bonne estimation de la température maximale du combustible. De plus, il a été mis en évidence que la délocalisation radiale due à la mise en diablo de la pastille a effet négligeable sur la température maximale au plan médian pastille. Cet effet ne sera donc pas pris en compte par la suite. Les résultats 3D ont aussi montré l'effet négligeable du gonflement solide dû aux produits de fission. En revanche le mécanisme que nous avons proposé dans ce chapitre, basé sur le transfert de masse se produisant dans la zone de restructuration, améliore significativement les résultats et nous donne une compréhension physique du phénomène de rattrapage de jeu pastille-gaine après la première montée en puissance.

BILAN DU CHAPITRE II

Dans ce chapitre, un phénomène responsable du rattrapage de jeu a pu être identifié à l'aide des observations micrographiques réalisées sur des examens en post irradiation. Ce phénomène est lié au transfert de masse induit par la restructuration du combustible. Un mécanisme a été proposé pour décrire ce phénomène et son impact sur la délocalisation des fragments de pastille. Une simulation 3D a été réalisée pour quantifier la contribution de l'ensemble des phénomènes responsables de la fermeture du jeu. Ce modèle 3D a pu être réalisé grâce à un couplage entre le code de calcul RNR "1D½" GERMINAL et l'application 3D LICOS. Des développements spécifiques ont été réalisés pour introduire dans cette modélisation le mécanisme de délocalisation induit par le transfert de masse lors de la formation du trou central. Les résultats ont tout d'abord permis de montrer l'impact significatif de la fragmentation du combustible. Néanmoins la comparaison des rayons de la zone à grains colonnaires entre la simulation 3D et les mesures expérimentales réalisées sur des pastilles annulaires et pleines, ont montré que la fragmentation et le gonflement solide n'étaient pas suffisants pour obtenir des résultats cohérents. Nous avons donc conclu que le phénomène de transfert de masse identifié dans ce chapitre était indispensable pour obtenir des rayons de la zone à grains colonnaires en accord avec les mesures expérimentales.

Grâce à ces résultats, un nouveau modèle de délocalisation permettant de prendre en compte l'effet de la fragmentation et l'effet du transfert de masse par une formulation à base physique est proposé dans le chapitre III.

CHAPITRE III : NOUVEAU MODÈLE 1D POUR LE RATTRAPAGE DU JEU COMBUSTIBLE-GAINE

Objet du chapitre :

L'objet de ce chapitre est de proposer un nouveau modèle 1D de délocalisation avec une description physique permettant de simuler les contributions séparées de l'effet de la fragmentation et du transfert de masse dans la zone de restructuration. Ce modèle vise à être plus prédictif que celui existant actuellement dans le code de calcul RNR "1D½" GERMINAL. Pour cela, une formulation couplée entre la fragmentation, le transfert de masse et la délocalisation radiale des fragments est proposée et implémentée dans le schéma de calcul multi-physique du code GERMINAL. Ce nouveau modèle est testé sur quatre aiguilles combustibles, identiques à celles utilisées au chapitre II, afin d'établir les comparaisons calcul/mesure et de se prononcer sur la validation.

Ces travaux font l'objet de la deuxième partie de la publication [Temmar 19].

SOMMAIRE DU CHAPITRE III

| | |
|--|------------|
| III.1 FORMULATION DU COUPLAGE MULTI-PHYSIQUE DANS GERMINAL | 93 |
| III.2 NOUVEAU MODÈLE DE DÉLOCALISATION DES FRAGMENTS DE PASTILLE COMBUSTIBLE ET FORMULATION DU COUPLAGE | 96 |
| III.2.1 Déformation de délocalisation induit par la fragmentation de la pastille combustible | 96 |
| III.2.1.1 Formulation mécanique..... | 96 |
| III.2.1.2 Pastille non-fragmentée..... | 98 |
| III.2.1.3 Pastille fragmentée..... | 100 |
| III.2.1.4 Déformation de délocalisation..... | 102 |
| III.2.2 Déformation de délocalisation par transfert de masse | 105 |
| III.2.2.1 Calcul de la masse transférée | 105 |
| III.2.2.2 Formulation de la déformation de délocalisation induit par le transfert de masse | 108 |
| III.3 Résultats et comparaisons avec les mesures expérimentales | 110 |

III.1 FORMULATION DU COUPLAGE MULTI-PHYSIQUE DANS GERMINAL

Dans le chapitre I à la section I.2.2.3, nous avons vu que le modèle de délocalisation actuel, utilisé dans le code de calcul RNR “1D½” GERMINAL est empirique et ne permet pas de séparer les différents phénomènes à l’origine du déplacement radial des fragments. Basé sur les deux phénomènes mis en évidence dans le modèle 3D (fragmentation de la pastille et transfert de masse lors de la formation du trou central), une nouvelle formulation 1D du modèle de délocalisation et sa formulation couplée avec le schéma de calcul multi-physique de GERMINAL a été établie. La formulation multi-physique actuelle de GERMINAL (voir la Figure III-1 reprise de la référence [Lainet 19]) a été adaptée afin de remplacer le modèle de délocalisation des fragments de pastille du combustible et d’améliorer la formulation de son couplage avec le modèle de restructuration du combustible (notamment la migration radiale des porosités et le modèle de formation du trou central).

Cette nouvelle formulation est expliquée schématiquement ci-dessous avec les équations (III-1) à (III-4).

Equation de la chaleur :

$$\rho c_p \frac{\partial T(\vec{u}^{mec}, p)}{\partial t} = div(\lambda(p). gradT(\vec{u}^{mec}, p)) + p_v \quad (III-1)$$

Equation de migration/advection:

$$\frac{\partial p(T)}{\partial t} = -div(\vec{v}_p(T). p(T)) \quad (III-2)$$

Equation de la déformation de délocalisation :

$$\bar{\epsilon}^{delocalisation}(T, p) = \bar{\epsilon}_{frag}^{delocalisation}(T) + \bar{\epsilon}_{tmd}^{delocalisation}(p) \quad (III-3)$$

Equation d'équilibre statique mécanique non linéaire et loi de comportement

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{div} \bar{\sigma} = 0 \text{ in } \Omega \\ \bar{\sigma} \vec{n} = \vec{T}_s \text{ sur } \partial\Omega_T \\ \bar{u}^{mec} = \vec{U}_{imp} \text{ on } \partial\Omega_u \end{array} \right. \quad (\text{III-4})$$

tel que, $\partial\Omega_T \cap \partial\Omega_u = \emptyset$ et $\partial\Omega_T \cup \partial\Omega_u = \partial\Omega$

$$\underline{\underline{\dot{\bar{\sigma}}}} = \underline{\underline{E}} : \left(\underline{\underline{\dot{\bar{\epsilon}}}}^{tot}(\bar{u}^{mec}) - \underline{\underline{\dot{\bar{\epsilon}}}}^{th}(T) - \underline{\underline{\dot{\bar{\epsilon}}}}^{plast}(T, p) - \underline{\underline{\dot{\bar{\epsilon}}}}^{fluage}(T, p) - \underline{\underline{\dot{\bar{\epsilon}}}}^g(T) - \underline{\underline{\dot{\bar{\epsilon}}}}^{delocalisation}(T, p) \right)$$

Et si le nœud est localisé dans le trou central :

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{\sigma} = 0 \\ \vec{v}_p = 0 \end{array} \right. \quad (\text{III-5})$$

avec ρ la masse volumique (g/m^3), c_p la capacité thermique ($J/g/K$), λ la conductivité thermique ($W/m/K$), p_v la puissance volumique nucléaire locale (W/m^3), p la fraction volumique de porosité (fabrication et remplissage/volume libres), \vec{v}_p est la vitesse moyenne des porosités de remplissage et des porosités de fabrication (m/s) (voir section I.3.1.2 du chapitre I) \bar{u}^{mec} est le champ de déplacement mécanique (m), $\bar{\epsilon}_{frag}^{delocalisation}$ et $\bar{\epsilon}_{tmd}^{delocalisation}$ correspondent respectivement à la déformation de délocalisation liée à la fragmentation de la pastille et au transfert de masse. Des conditions aux limites appropriées permettent de fixer les degrés de liberté des points localisés dans le trou (voir Annexe D).

Comme on peut le constater, les équations constitutives (III-1)-(III-5) sont couplées directement ou indirectement principalement par l'intermédiaire des variables T , p et \bar{u}^{mec} comme suit :

- la cinétique de migration des pores est contrôlée par la température.
- la déformation de délocalisation liée au transfert de masse et à la fragmentation du combustible dépend respectivement de la fraction volumique des pores et de la température.
- le déplacement mécanique dépend de la déformation de délocalisation, de la température et de la porosité à travers les déformations inélastiques.
- l'état thermique dépend du déplacement mécanique et de la porosité via l'échange de chaleur dans le jeu pastille-gaine et les propriétés thermiques du combustible.

| | |
|---|--|
| Global resolutions needed by the local resolutions to come | |
| ⇒ Simplified thermal-hydraulics of coolant channel | |
| <i>Determines the boundary conditions for the local thermal analyses to come: cladding outer temperature in each axial slice.</i> | |
| <i>N.B. Preliminary resolution for a stationary analysis only. For a transient analysis, coupled resolution with fuel pin thermal analysis.</i> | |
| Local resolutions ⇔ Loop on axial slices | |
| ⇒ Neutronics | |
| ⇒ Calculation of average Oxygen to Metal ratio in fuel slice (<i>burn-up dependent</i>) | |
| ⇒ Local convergence loop | |
| → Thermal analysis of fuel and cladding | |
| <i>Coupled with coolant thermal-hydraulics for a transient analysis</i> | |
| → Thermally activated fuel physical processes | |
| ~ Oxygen radial migration with <i>specific update frequency</i> | |
| ~ Fuel irradiation shrinkage | |
| ~ Fuel swelling (<i>gas and solid swelling</i>) | |
| ~ Fuel pellet fragments relocation | |
| ~ Gaseous and volatile fission products behavior | |
| <i>Includes "Joint Oxyde-Gaine" formation.</i> | |
| → Mechanics of fuel and cladding | |
| ⇒ Oxygen potential calculation with <i>specific update frequency</i> | |
| ⇒ Major actinides radial redistribution with <i>specific update frequency</i> | |
| ⇒ Fuel restructuring: porosities radial migration and central hole formation with <i>specific update frequency</i> | |
| Global resolutions needing the previous local resolutions | |
| ⇒ Plenum gas composition and pressure | |
| ⇒ Fuel column axial relocation | |
| ⇒ Cladding internal and external corrosion | |
| ⇒ Fuel column compression spring reaction | |

Figure III-1 : Résolution d'un pas de temps dans le code GERMINAL [Lainet 19]

Le nouveau modèle de délocalisation des fragments de pastille combustible et sa formulation de couplage avec les modèles de migration radiale de porosités et de formation de trou central sont détaillés dans les sections suivantes.

III.2 NOUVEAU MODÈLE DE DÉLOCALISATION DES FRAGMENTS DE PASTILLE COMBUSTIBLE ET FORMULATION DU COUPLAGE

Comme indiqué précédemment, le nouveau modèle de délocalisation est composé de deux déformations (voir l'équation (III-3)), une reliée à l'impact du gradient thermique sur une pastille fragmentée et l'autre liée à l'impact du transfert de masse dans la zone de restructuration. Les équations constitutives proposées pour modéliser ces déformations de délocalisation sont présentées dans les sections suivantes.

III.2.1 Déformation de délocalisation induit par la fragmentation de la pastille combustible

L'objectif de nos travaux est de proposer une formulation physique permettant d'estimer l'impact du gradient de température sur pastille combustible fragmentée.

III.2.1.1 Formulation mécanique

Dans notre modèle 1D, l'effet de la mise en diabolo de la pastille n'est pas considéré. En effet, nous avons montré que dans le chapitre II (voir Tableau II-1) son impact sur la température au plan médian pastille, où la température atteinte est maximale, est faible. Ainsi, la déformation de délocalisation décrit uniquement le supplément de déplacement radial induit par le contact en les fragments de pastille. La déformation de délocalisation est estimée grâce à la différence de déplacement obtenue entre une pastille non-fragmentée et une pastille fragmentée soumises à un gradient de température. Cette différence de déplacement, appelée " ΔU_r ," est illustrée sur la Figure III-2 (voir section I.2.2.3 du chapitre I pour plus de détails). En effet, l'impact du gradient de température sur une pastille non-fragmentée est déjà pris en compte dans GERMINAL via la déformation thermique introduite dans la loi de comportement ($\dot{\epsilon}^{th}(T)$ équation (III-4)).

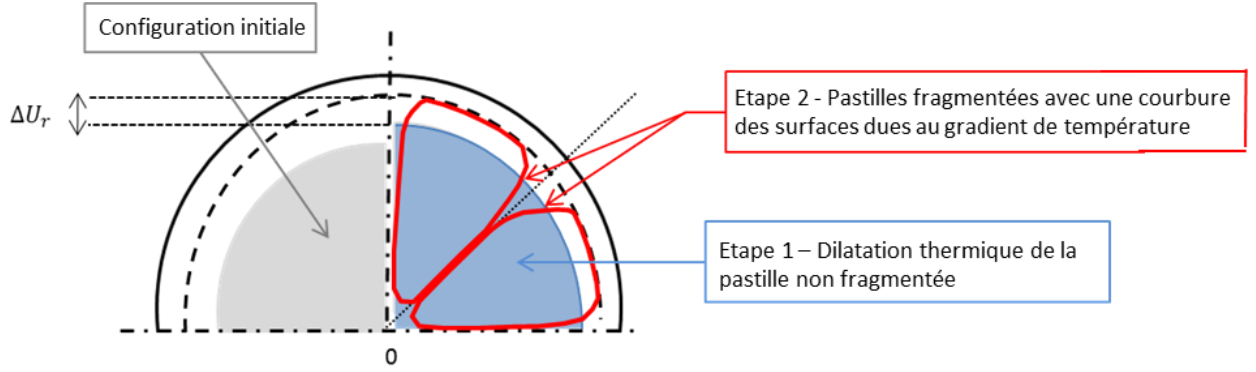


Figure III-2: l'impact du gradient de température sur une pastille fragmentée et non fragmentée

Dans notre approche, nous avons considéré une pastille annulaire et pleine avec les hypothèses suivantes :

- Représentation 2D dans le plan (r, θ) ,
- Comportement élastique isotrope,
- Aucune forces extérieures, seulement des chargements thermiques sont appliqués.

Chaque déplacement radial " U_r " est obtenu en résolvant le système d'équation mécanique (III-6) en considérant une approche en petites déformations pour les pastilles fragmentées et non-fragmentées de géométrie annulaire et pleine.

$$\begin{aligned}
 \text{div } \bar{\sigma} &= 0 \\
 \bar{\sigma} &= 2G \left(\frac{\nu}{1-2\nu} \text{tr}(\bar{\varepsilon}^{\text{tot}} - \bar{\varepsilon}^{\text{th}}) \bar{I} + (\bar{\varepsilon}^{\text{tot}} - \bar{\varepsilon}^{\text{th}}) \right) \\
 \bar{\varepsilon} &= \frac{1}{2} \left(\overline{\text{grad}}(\vec{u}) + \overline{\text{grad}}^T(\vec{u}) \right)
 \end{aligned} \tag{III-6}$$

où G et ν désignent le module de cisaillement et le coefficient de Poisson de la pastille, $\bar{\varepsilon}^{\text{tot}}$ et $\bar{\varepsilon}^{\text{th}}$ sont respectivement le tenseur de déformation total et le tenseur de déformation thermique, \vec{u} est le champ de déplacement et $\bar{\sigma}$ le tenseur de contrainte.

Les déformations thermiques sont introduites via un champ de déformation libre de contrainte $\bar{\varepsilon}^{\text{th}}(r)$ défini dans les équations (III-7) et (III-8) et (III-9) pour une pastille annulaire et pleine dans des conditions thermiques appliquées en régime permanent.

$$\begin{aligned}
 \bar{\varepsilon}_{\text{pleine}}^{\text{th}}(r) &= \alpha(T^{\text{pleine}}(r) - T_0) \bar{I} = \hat{\varepsilon}_{\text{pleine}}^{\text{th}}(r) \bar{I} + \tilde{\varepsilon}_{\text{pleine}}^{\text{th}}(r) \bar{I} \\
 \bar{\varepsilon}_{\text{an}}^{\text{th}}(r) &= \alpha(T^{\text{an}}(r) - T_0) \bar{I} = \hat{\varepsilon}_{\text{an}}^{\text{th}}(r) \bar{I} + \tilde{\varepsilon}_{\text{an}}^{\text{th}}(r) \bar{I}
 \end{aligned} \tag{III-7}$$

où $T_{pleine}(r)$ et $T_{an}(r)$ sont respectivement le champ de température radial pour une pastille pleine et annulaire, T_0 est la température initial de la pastille (considérée constante dans son ensemble et égale à la température ambiante), α est le coefficient de dilatation thermique de la pastille, $(\varepsilon_{pleine}^{th}(r), \varepsilon_{an}^{th}(r))$ et $(\tilde{\varepsilon}_{pleine}^{th}(r), \tilde{\varepsilon}_{an}^{th}(r))$ sont respectivement la distribution non harmonique et harmonique de la déformation thermique pour une pastille pleine et annulaire.

$$\begin{aligned}\varepsilon_{pleine}^{th}(r) &= \varepsilon_3^{pleine} r^2 \\ \tilde{\varepsilon}_{pleine}^{th}(r) &= \varepsilon_1^{pleine}\end{aligned}\tag{III-8}$$

tel que :

$$\begin{cases} \varepsilon_3^{pleine} = -\frac{\alpha(T_{pleine}(0) - T_{pleine}(R_e))}{R_e^2} \\ \varepsilon_1^{pleine} = -\varepsilon_3^{pleine} R_e^2 + \alpha(T_{pleine}(R_e) - T_0) \end{cases}$$

$$\begin{aligned}\varepsilon_{an}^{th}(r) &= \varepsilon_3^{an} r^2 \\ \tilde{\varepsilon}_{an}^{th}(r) &= \varepsilon_2^{an} \ln(r) + \varepsilon_1^{an}\end{aligned}\tag{III-9}$$

tel que :

$$\begin{cases} \varepsilon_3^{an} = -\frac{\alpha(T^{an}(R_i) - T^{an}(R_e))}{(R_e^2 - R_i^2 + 2R_i^2 \ln(\frac{R_i}{R_e}))} \\ \varepsilon_2^{an} = -2\varepsilon_3^{an} R_i^2 \\ \varepsilon_1^{an} = -\varepsilon_3^{an}(R_e^2 - 2R_i^2 \ln(R_e)) + \alpha(T^{an}(R_e) - T_0) \end{cases}$$

où R_e et R_i sont respectivement le rayon externe et interne de la pastille. Le détail de la détermination des expressions des constants ε_i^j ($i = 1, 2$ et 3 ; $j =$ pleine ou an) est donnée dans l'Annexe E.

III.2.1.2 Pastille non-fragmentée

En considérant un problème axisymétrique pour la pastille non fragmentée, nous trouvons la solution analytique suivante (équations (III-10) et (III-11)).

$$u_r^{pleine-axi}(r) = \left(\frac{1}{1-\nu}\right) \frac{1}{r} \int_0^r t(\varepsilon_1^{pleine} + \varepsilon_3^{pleine} t^2) dt + ar\tag{III-10}$$

$$u_r^{an-axi}(r) = \left(\frac{1}{1-\nu}\right) \frac{1}{r} \int_{R_i}^r t(\varepsilon_1^{an} + \varepsilon_2^{an} \ln(t) + \varepsilon_3^{an} t^2) dt + \frac{b}{r} + cr\tag{III-11}$$

où a, b et c sont les constantes données par les conditions aux limites en contraintes sur la pastille:

Pastille pleine :

$$-\sigma_{rr}^{pleine-axi}(R_e) = 0 \quad (III-12)$$

Pastille annulaire :

$$\begin{cases} \sigma_{rr}^{an-axi}(R_e) = 0 \\ \sigma_{rr}^{an-axi}(R_i) = 0 \end{cases} \quad (III-13)$$

où, σ_{rr}^{an-axi} et $\sigma_{rr}^{pleine-axi}$ sont respectivement les contraintes radiales pour une pastille annulaire et pleine dérivées de la loi thermoélastique donnée dans l'équation (III-6). On déduit ainsi les expressions de σ_{rr}^{an-axi} , $\sigma_{rr}^{pleine-axi}$ en fonction de a, b et c (équations (III-14) et (III-15)):

$$\sigma_{rr}^{pleine-axi}(r) = -\frac{2G}{1-\nu} \left[\frac{\varepsilon_1^{pleine}}{2} + \frac{\varepsilon_3^{pleine}}{4} r^2 \right] + \frac{2G}{1-2\nu} a \quad (III-14)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{rr}^{an-axi}(r) = & -\frac{2G}{1-\nu} \left[\frac{\varepsilon_1^{an}}{2} \left(1 - \frac{R_i^2}{r^2} \right) + \frac{\varepsilon_2^{an}}{2} \left(\ln(r) - \frac{R_i^2}{r^2} \ln(R_i) - \frac{1}{2} + \frac{R_i^2}{2r^2} \right) + \right. \\ & \left. \frac{\varepsilon_3^{an}}{4} \left(r^2 - \frac{R_i^4}{r^2} \right) \right] + \frac{2G}{1-2\nu} c - 2G \frac{b}{r^2} \end{aligned} \quad (III-15)$$

En utilisant les conditions limites, les expressions des constantes pour une pastille non-fragmentée sont déterminées comme suit :

$$\sigma_{rr}^{pleine-axi}(R_e) = 0 \rightarrow a = \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} \left(\varepsilon_1^{pleine} + \frac{\varepsilon_3^{pleine}}{2} R_e^2 \right) \quad (III-16)$$

$$\begin{cases} \sigma_{rr}^{an-axi}(R_e) = 0 \\ \sigma_{rr}^{an-axi}(R_i) = 0 \end{cases} \rightarrow \begin{aligned} c &= \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} \left[\varepsilon_1^{an} + \frac{\varepsilon_2^{an}(\ln(R_i)R_i^2 - \ln(R_e)R_e^2)}{R_i^2 - R_e^2} - \frac{\varepsilon_2^{an}}{2} + \frac{\varepsilon_3^{an}}{2} (R_i^2 + R_e^2) \right] \\ b &= \frac{1}{2(1-\nu)} \left[\varepsilon_1^{an} R_i^2 + \frac{\varepsilon_2^{an}(\ln(R_i)R_i^4 - \ln(R_e)R_e^2 R_i^2)}{R_i^2 - R_e^2} - \frac{\varepsilon_2^{an}}{2} R_i^2 + \frac{\varepsilon_3^{an}}{2} R_i^2 (R_i^2 + R_e^2) \right] \end{aligned} \quad (III-17)$$

III.2.1.3 Pastille fragmentée

Pour la pastille fragmentée, pour laquelle la condition axisymétrique n'est plus valable, l'approche proposée par Muskhelishvili [Muskhelishvili 63] a été étendue. La composante radiale du champ de déplacement pour une pastille pleine a déjà été déterminée par Sercombe et al. [Sercombe 13], utilisant l'approche de Muskhelishvili (voir développement dans l'Annexe F) :

$$u_r^{pleine-frag}(r, \theta) = \varepsilon_3^{pleine} \left[\left(\frac{1}{1-\nu} \right) \frac{1}{r} \left(\int_0^r t^3 dt \right) - \frac{1}{2G} [4\nu\gamma^{pleine}(G, \nu) \cos(2\theta) + \beta^{pleine}(G, \nu) \cos(4\theta)] r^3 \right] + \varepsilon_1^{pleine} r + \frac{A}{2G} \left[(4 - 4\nu) \cos(\theta) \ln\left(\frac{r}{r_0}\right) + (2 - 4\nu)\theta \sin(\theta) - \cos(\theta) \right] \quad (\text{III-18})$$

Comme expliqué dans [Sercombe 13], le champ de déplacement est singulier au centre de la pastille pleine (voir la fonction $\ln\left(\frac{r}{r_0}\right)$ avec $r_0 > 0$) dans l'équation (III-18)) et n'est pas compatible avec la condition aux limites $u_r^{pleine-frag}(0, \theta) = 0$. Pour résoudre ce problème, cette condition limite est approximée par l'équation (III-19) où le paramètre r_0 est défini afin d'obtenir la même condition aux limites pour le déplacement radial moyen à un petit rayon $r = r_i$ (voir Annexe G pour les développements). Par conséquent, du fait de cette approximation, le champ de déplacement n'a pas de sens physique quand le rayon de la pastille est inférieur à r_i .

$$\frac{1}{2\theta_m} \int_{-\theta_m}^{\theta_m} u_r^{pleine-frag}(r_i, \theta) d\theta = 0 \quad (\text{III-19})$$

où, $\theta_m = 22.5^\circ$ et $r_i \ll R_e$.

À partir des travaux établis par Sercombe dans la référence [Sercombe 13], nous avons proposé une nouvelle solution pour les pastilles annulaires (voir Annexe F pour les développements) :

$$u_r^{an-frag}(r, \theta) = \varepsilon_3^{an} \left[\left(\frac{1}{1-\nu} \right) \frac{1}{r} \left(\int_{R_i}^r t^3 dt \right) - \frac{1}{2G} [4\nu\gamma^{an}(G, \nu) \cos(2\theta) + \beta^{an}(G, \nu) \cos(4\theta)] r^3 \right] + \varepsilon_1^{an} r + \varepsilon_2^{an} r (\ln(r) - 1) + \frac{d}{r} + \frac{B}{2G} \left[(4 - 4\nu) \cos(\theta) \ln\left(\frac{r}{R_i}\right) + (2 - 4\nu)\theta \sin(\theta) - \cos(\theta) \right] \quad (\text{III-20})$$

Dans les équations précédentes (III-18) - (III-20) γ^{pleine} , β^{pleine} , A , γ^{an} , β^{an} , d et B sont les constantes d'intégration dérivées des conditions aux limites données par les équations (III-21) - (III-24). Les expressions des composantes du tenseur des contraintes et le calcul des valeurs des constantes d'intégration sont détaillés dans l'Annexe G.

Comme expliqué dans la référence [Sercombe 13], le champ de contrainte dérivée des solutions en déplacement n'est pas rigoureusement admissible. De ce fait les conditions aux limites des constantes A , B et d sont définies, telles que la contrainte radiale moyenne sur le rayon extérieur de la pastille ($r = R_e$) et sur le rayon interne de la pastille annulaire ($r = R_i$) soit égale à zéro :

Pastille pleine :

$$\frac{1}{2\theta_m} \int_{-\theta_m}^{\theta_m} \sigma_{rr}^{pleine-frag}(R_e, \theta) d\theta = 0 \quad (\text{III-21})$$

Pastille annulaire :

$$\frac{1}{2\theta_m} \int_{-\theta_m}^{\theta_m} \sigma_{rr}^{an-frag}(R_e, \theta) d\theta = 0 \quad (\text{III-22})$$

$$\frac{1}{2\theta_m} \int_{-\theta_m}^{\theta_m} \sigma_{rr}^{an-frag}(R_i, \theta) d\theta = 0$$

Les constantes γ^{pleine} , β^{pleine} , γ^{an} et β^{an} sont calculées en considérant les conditions limites sur les surfaces libres du fragment de pastille ($\theta = \pm\theta_m$) suivantes :

Pastille pleine :

$$\begin{cases} \sigma_{r\theta}^{pleine-frag}(r, \pm\theta_m) = 0 \\ \sigma_{\theta\theta}^{pleine-frag}(r, \pm\theta_m) = 0 \end{cases} \text{ tel que } r_i \leq r \leq R_e \quad (\text{III-23})$$

Pastille annulaire :

$$\begin{cases} \sigma_{r\theta}^{an-frag}(r, \pm\theta_m) = 0 \\ \frac{1}{(R_e - R_i)} \int_{R_i}^{R_e} \sigma_{\theta\theta}^{an-frag}(r, \pm\theta_m) = 0 \end{cases} \text{ tel que } R_i \leq r \leq R_e \quad (\text{III-24})$$

Comme mentionné précédemment, le champ de contrainte n'étant pas rigoureusement statiquement admissible, la condition aux limites de la contrainte circonférentielle de la pastille annulaire est également modifiée afin d'obtenir une valeur moyenne égale à zéro sur la surface libre de la pastille.

III.2.1.4 Déformation de délocalisation

Pour déterminer l'expression analytique de la déformation de délocalisation, la différence de déplacement entre une pastille fragmentée et non fragmentée est d'abord évaluée (voir l'Annexe H étape 1). La déformation de délocalisation étant homogène [Lainet 19], cette dernière est déduite de la valeur maximale de la différence de déplacement, soit au point $r = R_e$ et $\theta = \frac{\pi}{8}$ (voir Annexe H, étape 2).

Enfin, si l'on considère les solutions de déplacement données dans les sections III.2.1.2 et III.2.1.3 en substitution les valeurs des constantes (voir Annexe H, étape 3), les différences de déplacement radial obtenues sont les suivantes:

$$\Delta u_r^{pleine} \left(R_e, \frac{\pi}{8} \right) = -k_{pleine} \varepsilon_3^{pleine} R_e^3 \quad (\text{III-25})$$

$$\Delta u_r^{an} \left(R_e, \frac{\pi}{8} \right) = -k_{an} \varepsilon_3^{an} \quad (\text{III-26})$$

Où k_{pleine} et k_{an} dépendent du matériau et de la géométrie et sont définis dans l'Annexe H. Nous pouvons enfin obtenir l'expression du tenseur de déformation de délocalisation liée à la fragmentation de la pastille en fonction de la dilatation thermique pour une pastille pleine et

annulaire (voir les expressions de ε_3^{pleine} et ε_3^{an} respectivement dans les équations (III-8) et (III-9)) :

$$\bar{\varepsilon}_{frag-pleine}^{delocalisation} = k_{pleine} \alpha (T^{pleine}(0) - T^{pleine}(R_e)) (\vec{e}_r \otimes \vec{e}_r + \vec{e}_\theta \otimes \vec{e}_\theta) \quad (III-27)$$

$$\bar{\varepsilon}_{frag-an}^{delocalisation} = k_{an} \frac{\alpha (T^{an}(R_i) - T^{an}(R_e))}{(R_e^2 - R_i^2 + 2R_i^2 \ln(\frac{R_i}{R_e})) R_e} (\vec{e}_r \otimes \vec{e}_r + \vec{e}_\theta \otimes \vec{e}_\theta) \quad (III-28)$$

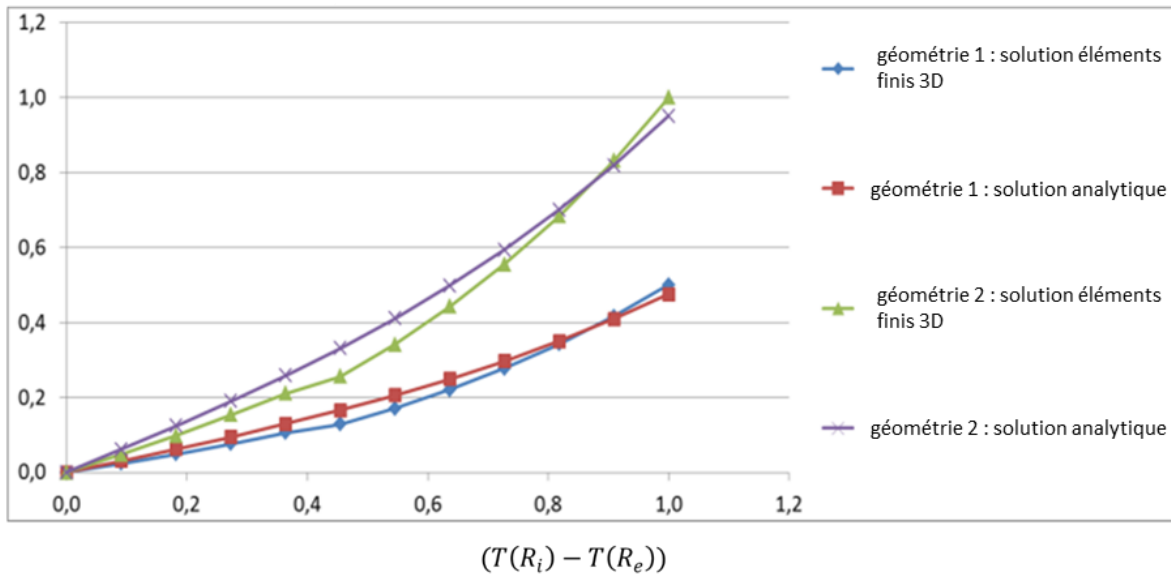
Une modification de cette solution a été proposée (voir les équations (III-29) et (III-30)) afin de prendre en compte le comportement non linéaire thermomécanique de la pastille combustible pendant l'irradiation. Ceci est fait en introduisant un paramètre empirique k_{fit} qui dépend du comportement en fluage et plasticité du matériau et qui doit être égal à un dans le cas élastique. Ce paramètre empirique k_{fit} a été ensuite ajusté à l'aide d'une simulation 3D par éléments finis, afin de tenir compte des propriétés matériau du combustible proposées dans GERMINAL [Lainet 19], dans le cas d'une pastille pleine et annulaire lors de la première montée en puissance en cas nominal. Cette simulation 3D est basée sur le schéma de calcul décrit dans la section II.2 du chapitre II.

$$\bar{\varepsilon}_{frag-pleine}^{delocalisation} = k_{fit} k_{pleine} \alpha (T^{pleine}(0), O/M(0)) (T^{pleine}(0) - T^{pleine}(R_e)) (\vec{e}_r \otimes \vec{e}_r + \vec{e}_\theta \otimes \vec{e}_\theta) \quad (III-29)$$

$$\bar{\varepsilon}_{frag-an}^{delocalisation} = k_{fit} k_{an} \frac{\alpha (T^{an}(R_i), O/M(R_i)) (T^{an}(R_i) - T^{an}(R_e))}{(R_e^2 - R_i^2 + 2R_i^2 \ln(\frac{R_i}{R_e})) R_e} (\vec{e}_r \otimes \vec{e}_r + \vec{e}_\theta \otimes \vec{e}_\theta) \quad (III-30)$$

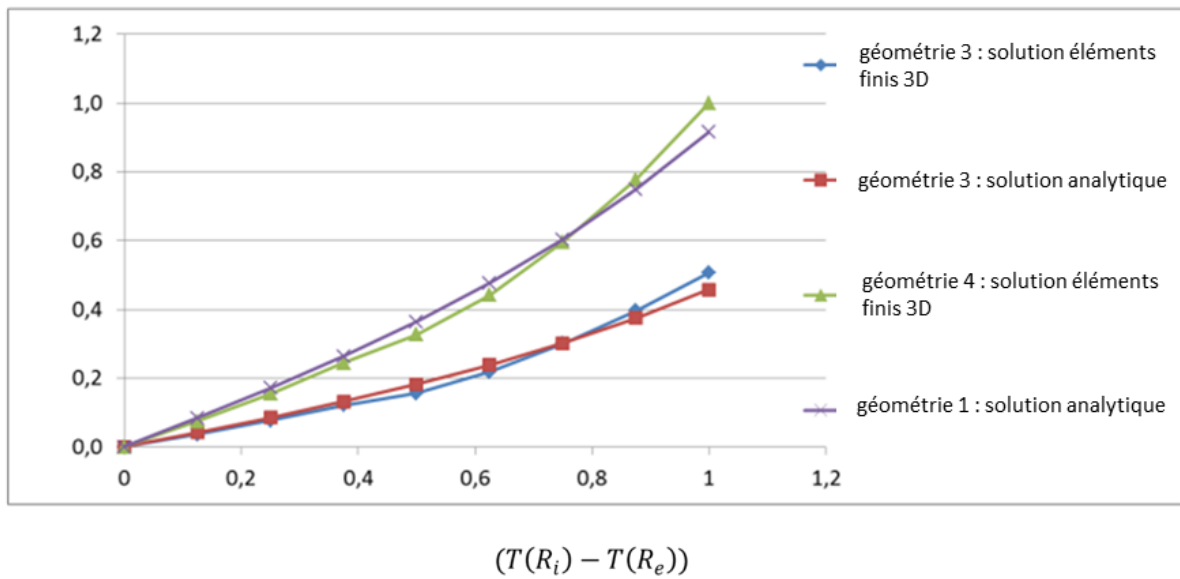
Le coefficient de dilatation thermique du combustible dépend de la température et du rapport oxygène/métal [Lainet 19]. Les solutions analytiques des équations (III-27) et (III-28) considèrent un coefficient de dilatation thermique constant. Pour être cohérent avec cette hypothèse, la valeur proposée dans les équations (III-29) et (III-30) est définie au rayon intérieur de la pastille. Ce choix donne le meilleur ajustement du paramètre k_{fit} entre les résultats éléments finis 3D (où le coefficient de dilatation thermique dépend de la température et du rapport O / M) et la solution analytique. Sur la Figure III-3, nous pouvons voir le bon accord entre la déformation de délocalisation obtenue analytiquement et la déformation de délocalisation dérivée du champ de déplacement calculé dans la simulation 3D.

$\varepsilon_{rr}^{\text{délocalisation}}, \varepsilon_{\theta\theta}^{\text{délocalisation}}$



a) Pastille pleine

$\varepsilon_{rr}^{\text{délocalisation}}, \varepsilon_{\theta\theta}^{\text{délocalisation}}$



b) Pastille annulaire

Figure III-3 : Évolution de la déformation de délocalisation liée à la fragmentation de la pastille en fonction de la dilatation thermique pour différentes géométries : géométrie 1 ($R_i = 0$; $R_e = 3$), géométrie 2 ($R_i = 0$; $R_e = 6$), géométrie 3 ($R_i = 1$; $R_e = 4$) et géométrie 4 ($R_i = 2$; $R_e = 8$).

III.2.2 Déformation de délocalisation par transfert de masse

Les travaux réalisés dans le chapitre II ont permis de montrer à l'aide d'une simulation 3D, l'importance de prendre en compte la déformation de délocalisation induite par le transfert de masse dans la zone de restructuration. Cette déformation doit donc être prise en compte dans le nouveau modèle 1D de délocalisation.

III.2.2.1 Calcul de la masse transférée

La masse transférée peut être déduite du phénomène de migration de porosité grâce à l'équation d'advection (III-2). Dans l'équation ci-dessous, p est la porosité totale incluant les porosités de fabrication et de remplissage.

$$p(r, t) = p^{fab}(r, t) + p^{rempl}(r, t) \quad (\text{III-31})$$

Comme déjà présenté à la section II.2.5 du chapitre II, le rapport entre la porosité de remplissage et la porosité totale s'écrit :

$$\gamma(r, t) = \frac{p^{rempl}(r, t)}{p(r, t)} \quad (\text{III-32})$$

De plus, on a supposé que sa valeur initiale ne dépend pas du rayon :

$$\gamma(r, 0) = \gamma_{ini} = \frac{p_{ini}^{rempl}}{p_{ini}} \quad \forall r \in R^+ \quad (\text{III-33})$$

La nouvelle équation d'advection résolue est alors :

$$\begin{cases} \frac{\partial p(r, t)}{\partial t} = -\text{div}(\vec{v}_p(r, t)p(r, t)) \\ p(r, 0) = p_{ini}^{fab} + p_{ini}^{rempl} \end{cases} \quad \forall r \in R^+ \text{ et } \forall t \geq 0 \quad (\text{III-34})$$

où \vec{v}_p est la vitesse des pores lenticulaires associée à la fraction volumique des porosités de fabrication et de remplissage (voir étude bibliographique réalisée à la section I.3.1 du chapitre I). L'évolution de la taille du trou central pendant l'irradiation est déduite de la solution de l'équation (III-34) comme suit :

$$V_{Trou}(t) = \int_V H(p(r,t))dv \quad (III-35)$$

$$\text{tel que : } \begin{cases} H(p(r,t)) = 1 & \text{if } p(r,t) = p_{max} \\ H(p(r,t)) = 0 & \text{if } p(r,t) < p_{max} \end{cases}$$

où p_{max} est la porosité maximale (proche de 100%) imposée sur la solution de l'équation d'advection (III 36). Quand cette condition est atteinte, à savoir quand $p = p_{max}$, la vitesse moyenne des porosités $v_p(r,t)$ est mise à zéro.

Pour évaluer le volume dense transféré entre les fragments de pastille (voir V_{tmd}^{rempl} sur la Figure III-4), nous devons calculer la proportion du volume du trou central provenant des porosités de remplissage. Ainsi, le volume V_{tmd}^{rempl} est défini à l'aide de l'équation (III-36) où l'on ne considère que la porosité de remplissage et le volume dense initial situé dans le trou central :

$$V_{tmd}^{rempl}(t) = \int_V H(p^{rempl}(r,t))(1 - p_{ini}^{fab})dv \quad (III-36)$$

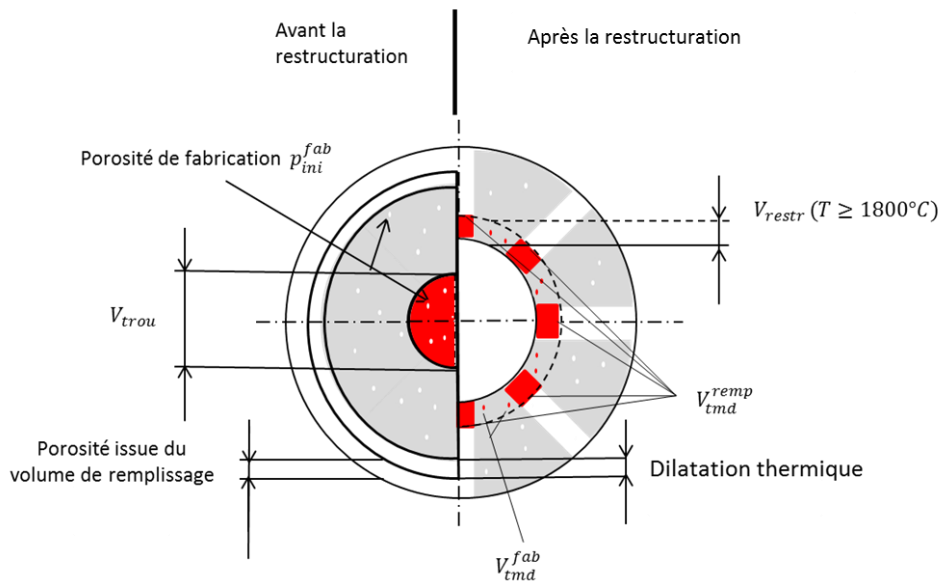


Figure III-4 : Le volume libre potentiel disponible entre les fragments

L'évolution de $p^{rempl}(r, t)$, nécessaire pour calculer $V_{tmd}^{rempl}(t)$, découle de l'hypothèse selon laquelle les porosités de remplissage et de fabrication ont la même vitesse de migration. De ce fait, la porosité de remplissage $p^{rempl}(r, t)$ est solution du problème d'advection suivant (III-37) :

$$\begin{cases} \frac{\partial p^{rempl}(r, t)}{\partial t} = -div(v_p(r, t)p^{rempl}(r, t)) \\ p^{rempl}(r, 0) = p_{ini}^{rempl} \end{cases} \quad (III-37)$$

Pour éviter de résoudre deux problèmes d'advection ((III-34) et (III-37)), selon le théorème de Cauchy-Lipschitz, l'équation d'advection de type (III-34) ou (III-37) admet une unique solution $p \in C^1$ donnée par la formule suivante [Evans 98] [Perthame 04] :

$$p(R(r_{ini}, t), t) = J^{-1}(r_{ini}, t)p_{ini} \quad (III-38)$$

avec :
$$\begin{cases} J(r_{ini}, t) = e^{\int_0^t div v_p(R(r_{ini}, t), s) ds} \\ J(r_{ini}, t = 0) = 1 \\ R(r_{ini}, t) = r \end{cases}$$

tel que $r_{ini} \in \mathbb{R}^+ \rightarrow R(r_{ini}, t) \in \mathbb{R}^+$ est l'application appelée flot et $J(r_{ini}, t)$ est le Jacobien du flot des caractéristiques [Evans 98] [Perthame 04]. On appelle caractéristiques de l'équation de transport/advection, les trajectoires issues du système différentiel suivant :

$$\begin{cases} \dot{R} = v_p(R(t, r_{ini}), t) \\ R(r_{ini}, t = 0) = r_{ini} \end{cases} \quad (III-39)$$

Selon les équations données par (III-38), la solution p^{rempl} de l'équation (III-37) s'écrit :

$$p^{rempl}(r, t) = J^{-1}(r_{ini}, t)\gamma_{ini}p_{ini} \quad (III-40)$$

$$\Leftrightarrow \frac{p^{rempl}(r, t)}{\gamma_{ini}} = J^{-1}(r_{ini}, t)p_{ini}$$

De même, on en déduit la solution analytique $p(r, t)$ de l'équation (III-34) :

$$p(r, t) = J^{-1}(r_{ini}, t)p_{ini} \quad (III-41)$$

Par identification, nous pouvons conclure que :

$$p^{rem p}(r, t) = \gamma_{ini} p(r, t) \quad (III-42)$$

Selon les équations données par (III-36) et (III-42), nous pouvons finalement déduire l'expression de $V_{tmd}^{rem p}$ comme une fonction de V_{Trou} :

$$\begin{aligned} V_{tmd}^{rem p}(t) &= \int_V H(\gamma_{ini} p(r, t)) (1 - p_{ini}^{fab}) dv \\ \Leftrightarrow V_{tmd}^{rem p}(t) &= \gamma_{ini} V_{Trou}(t) (1 - p_{ini}^{fab}) \end{aligned} \quad (III-43)$$

Quand le jeu est fermé, si le transfert de masse est toujours actif, cela entraînera une contrainte de compression dans les fragments de pastille en raison de l'accroissement du volume de la zone de restructuration. Ce phénomène, qui conduirait à des interactions mécanique pastille-gaine en début d'irradiation, n'a pas été observé durant les examens post-irradiation. Pour éviter cette interaction mécanique artificielle, le processus de migration de la porosité doit être stoppé afin d'avoir atteint la valeur maximale de $V_{tmd}^{rem p}$ lorsque le jeu est fermé. En raison des simplifications du processus de migration de la porosité de remplissage, ce mécanisme d'arrêt ne peut pas être garanti pour toutes les conditions d'irradiation dans le modèle actuel.

III.2.2.2 Formulation de la déformation de délocalisation induit par le transfert de masse

Il est désormais possible de calculer la déformation de délocalisation induite par l'expansion volumique lors du transfert de masse " $V_{tmd}^{rem p}$ ", dans la zone de restructuration " V_{restr} " comme décrit dans le chapitre II :

$$\varphi_{tmd}^{delocalisation} = \int_{V_0}^{V_1} \frac{dV}{V} = \ln\left(\frac{V_1}{V_0}\right) \quad (III-44)$$

$$\text{tel que : } \begin{cases} V_1 = V_0 + V_{tmd}^{rem p} \\ V_0 = V_{restr} \end{cases}$$

où $\varphi_{tmd}^{delocalisation}$ est le taux d'expansion volumique de la zone restructurée, V_0 et V_1 correspondent respectivement au volume de la zone restructurée avant et après le transfert en masse (voir Figure III-5). Afin de considérer uniquement la transformation due au transfert de

masse dans le calcul de la contrainte associée à cette délocalisation, les volumes V_0 et V_1 sont évalués sur une configuration géométrique initiale (sans tenir compte du déplacement mécanique). Le volume de la zone de restructuration V_{restr} est donné par le critère de température $T > T_{restr}$ (ici $T_{restr} = 1800^\circ C$). La déformation de délocalisation est supposée être homogène dans le plan (r, θ) , ainsi l'expression du tenseur $\bar{\bar{\epsilon}}_{tmd}^{delocalisation}$ est donnée par :

$$\bar{\bar{\epsilon}}_{tmd}^{delocalisation} = \frac{1}{2} \phi_{tmd}^{delocalisation} (\vec{e}_r \otimes \vec{e}_r + \vec{e}_\theta \otimes \vec{e}_\theta) \quad (III-45)$$

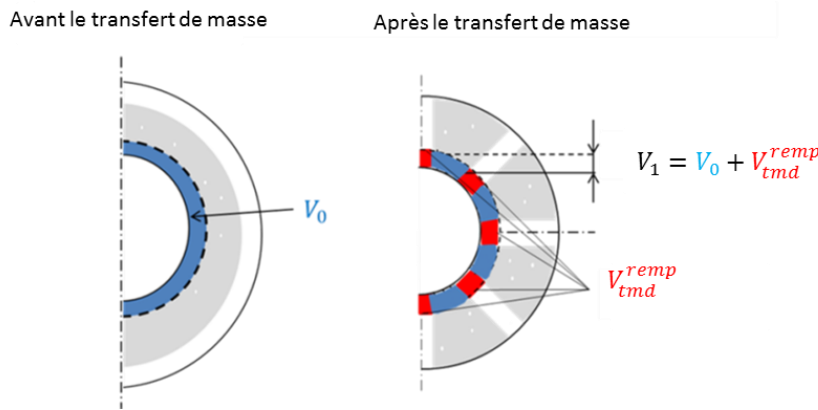


Figure III-5 : Illustration du changement de volume de la matrice UPuO2 généré par le transfert de masse se produisant entre les fragments dans la zone en restructuration.

On obtient finalement la formulation de couplage entre la déformation de délocalisation et le transfert de masse intervenant lors de la formation du trou central :

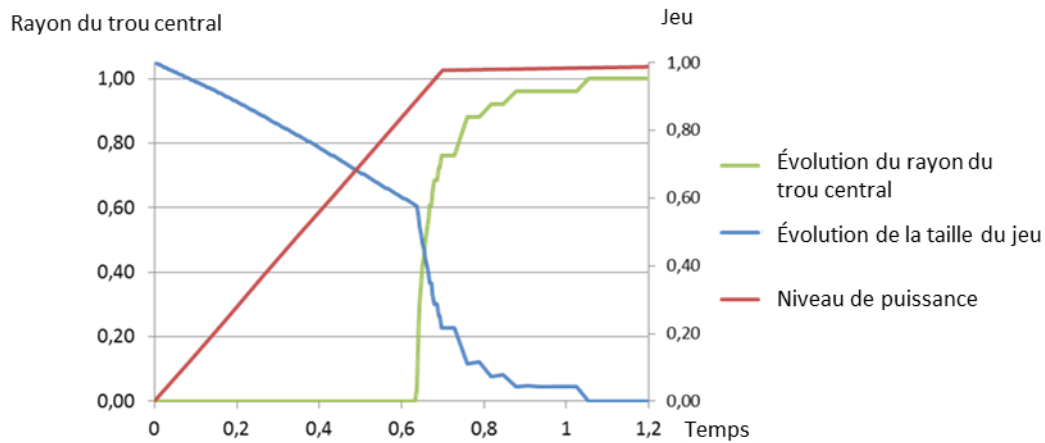
$$\begin{cases} \bar{\bar{\epsilon}}_{tmd}^{delocalisation} = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{V_{restr} + V_{tmd}^{remp}}{V_{restr}} \right) (\vec{e}_r \otimes \vec{e}_r + \vec{e}_\theta \otimes \vec{e}_\theta) \\ V_{tmd}^{remp} = \gamma_{ini} V_{Trou} (1 - p_{ini}^{fab}) \end{cases} \quad (III-46)$$

D'après l'équation (II-3), la déformation totale de délocalisation est obtenue en sommant les équations (III-29) et (III-46) pour la pastille pleine et les équations (III-30) et (III-46) pour la pastille annulaire.

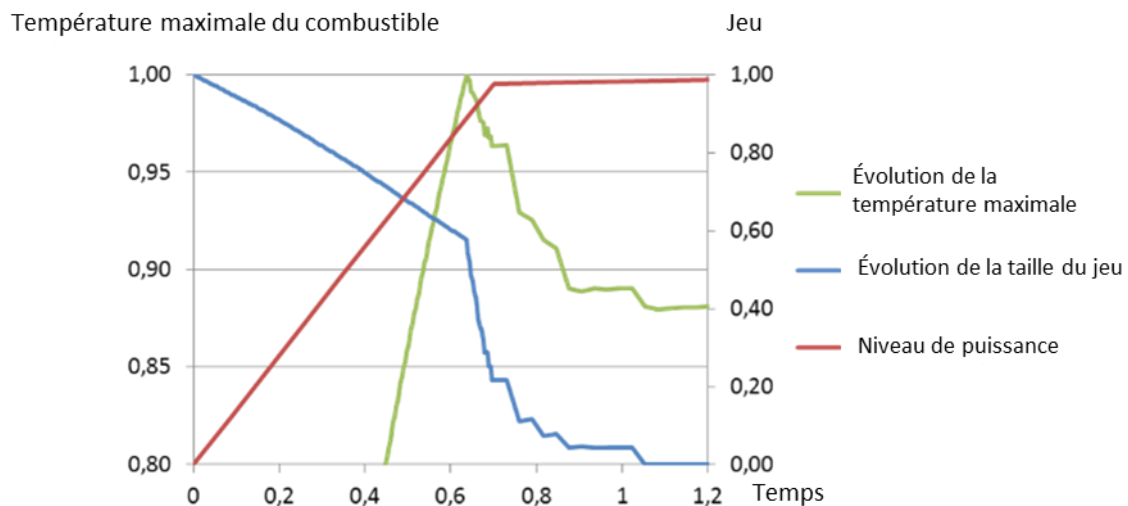
III.3 Résultats et comparaisons avec les mesures expérimentales

L'objectif de cette section est d'illustrer les résultats et la validité de ce nouveau modèle de délocalisation mis en œuvre dans GERMINAL. Lors de cette étude, les mêmes pastilles annulaires et pleines que celles introduites au chapitre II ont été prises en compte. Les rayons des trous centraux et des zones à grains colonnaires obtenus à la fin de l'irradiation avec le nouveau schéma de couplage ont été comparés à ceux obtenus avec la version précédente de GERMINAL mais également avec les mesures expérimentales associées. La Figure III-6 illustre nos nouveaux résultats concernant le couplage entre le rayon du trou central, la taille du jeu pastille-gaine et l'évolution de la température maximale du combustible. Au début de l'irradiation (temps $< 0,62$ sur la Figure III-6), la température maximale du combustible augmente avec la puissance linéaire dans la pastille. Au cours de cette première étape, on peut voir une réduction de la taille du jeu pastille-gaine due à la dilatation thermique différentielle existant entre la pastille et la gaine, ainsi qu'à la délocalisation du combustible induite par la fragmentation de la pastille, comme décrit à la section III.2.1. Dans la Figure III-6, 20% de la réduction de la taille du jeu pastille-gaine est due à l'effet de la fragmentation pendant la première montée en puissance, et les 80% restants sont dus à la dilatation thermique différentielle. Juste avant la fin du régime transitoire, la température est suffisamment élevée (supérieure à 1800°C) pour activer le processus de migration de la porosité, ce qui entraîne une augmentation du rayon du trou central. Par conséquent, la taille du jeu pastille-gaine diminue considérablement, tout comme la température du combustible. Cet effet de rétroaction entre l'évolution du trou central et la taille du jeu pastille-gaine est obtenu grâce à la formulation de couplage entre le transfert de masse et la délocalisation du combustible. Dans la Figure III-6, nous pouvons également constater que ce second mécanisme peut conduire à une fermeture complète du jeu pastille gaine, et par conséquent à une réduction de la température maximale d'environ 10%.

Comme expliqué dans le chapitre II, le gonflement solide participe aussi au rattrapage du jeu après la première montée en puissance mais son effet reste négligeable.



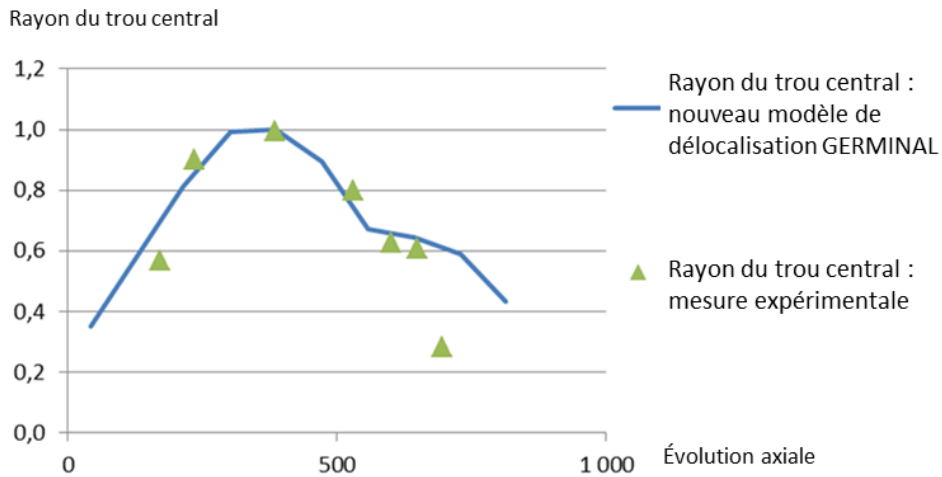
(a) Évolution de la taille du jeu et du trou central durant l'irradiation de l'aiguille combustible 1



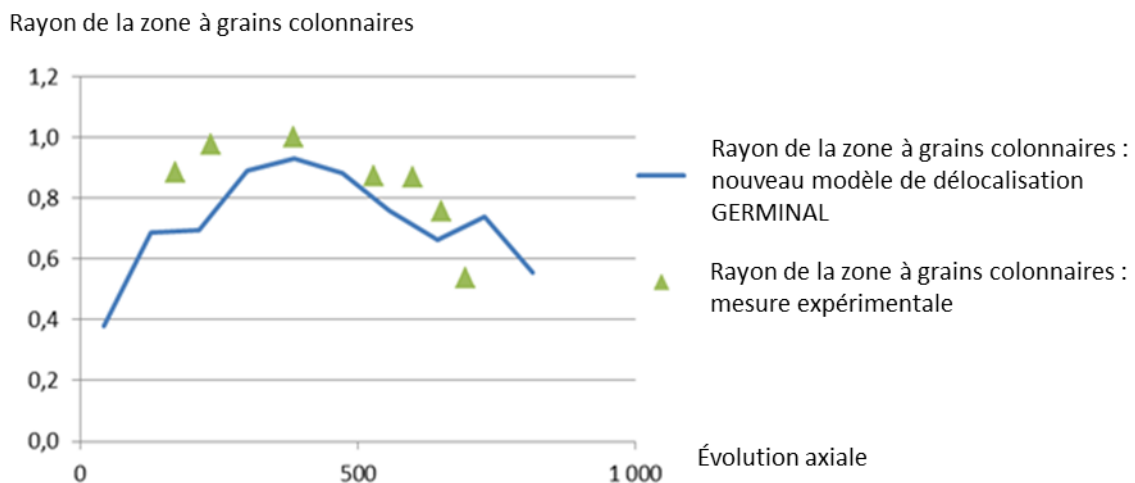
(b) Évolution de la taille du jeu et de la température maximale du combustible durant l'irradiation de l'aiguille combustible 1

Figure III-6 – illustration du couplage entre le modèle de délocalisation, la taille du jeu et l'évolution de la température maximale du combustible pendant l'irradiation de l'aiguille combustible 1

Sur la Figure III-7, la sensibilité au niveau de puissance maximal est illustrée par la distribution axiale des rayons du trou central et de la zone à grains colonnaires obtenus par notre nouvelle formulation et qui est comparée avec les mesures expérimentales. Les résultats de la simulation sont en bon accord avec les expériences pour les différents niveaux axiaux considérés le long de l'aiguille, en particulier, en ce qui concerne la dépendance de ces deux rayons au régime thermique du combustible. Cela prouve que notre nouveau modèle et notre nouvelle formulation de couplage permettent de bien représenter l'effet du régime thermique sur l'évolution du trou central et la taille de la zone restructurée.



(a) Rayon du trou central



(b) Rayon de la zone à grains colonnaires

Figure III-7 – Comparaison du rayon de la zone à grains colonnaires et du rayon du trou central obtenus avec l'aiguille combustible 2 sur toutes les tranches axiales entre GERMINAL, GERMINAL avec le nouveau modèle de délocalisation et les résultats expérimentaux

Comme l'illustre la Figure III-8, avec en particulier la comparaison mesure-simulation, les résultats obtenus avec le nouveau modèle de délocalisation sont très satisfaisants pour les deux types de géométrie testés (pastilles pleines et annulaires). Lorsque l'on compare au précédent modèle de délocalisation de GERMINAL, nous pouvons également observer une amélioration significative des résultats de la simulation, en particulier pour le rayon de la zone à grains colonnaires, pour ces quatre aiguilles. Ces bons résultats et ces améliorations peuvent être

clairement attribués à une formulation plus physique où l'effet de la température, du transfert de masse et de la géométrie est rigoureusement pris en compte dans l'équation constitutive du nouveau modèle de délocalisation.

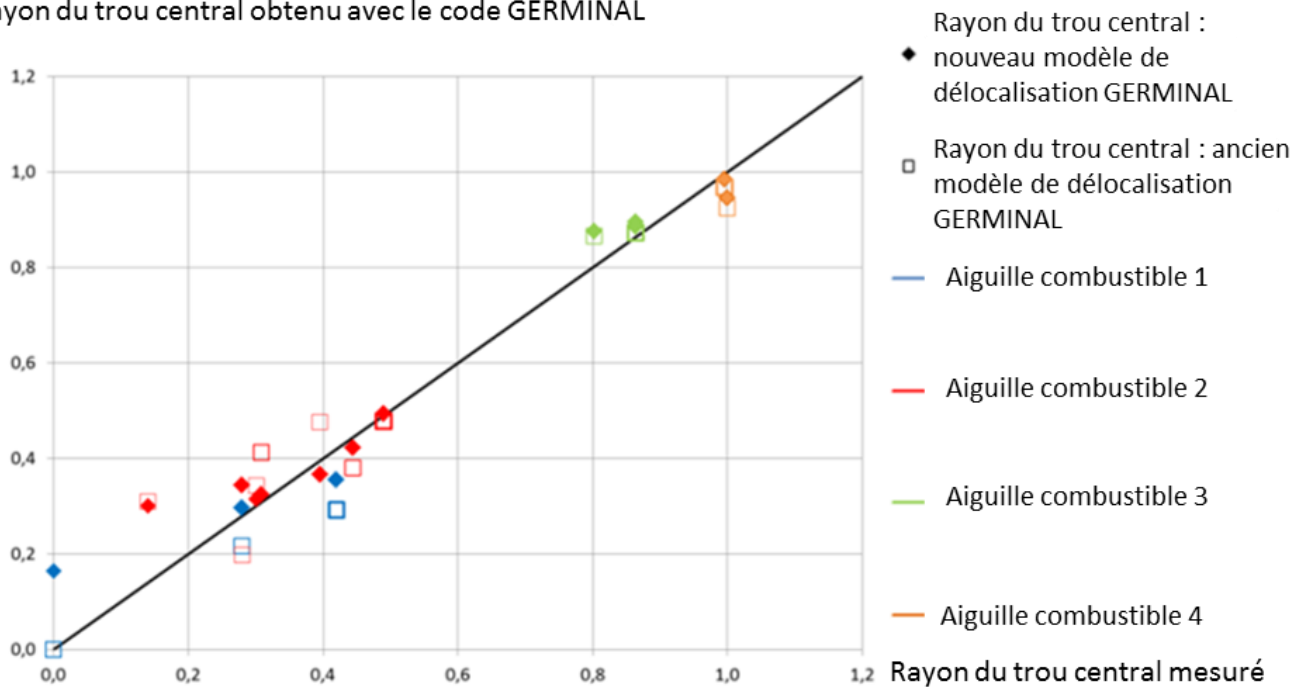
Néanmoins, certaines améliorations sont nécessaires pour modéliser avec plus de précision les zones de puissance intermédiaires pour lesquelles le processus de restructuration par évaporation-condensation n'est pas observé dans les expériences. En effet, nous pouvons voir que les rayons de la zone à grains colonnaires et du trou central sont surestimés en bas et en haut de l'aiguille combustible, lorsque la température du combustible est plus basse en raison du profil de puissance (voir la Figure III-7 et les petits rayons sur la Figure III-8). Ce problème semble être lié à une surestimation de la température du combustible dans ces zones, qui peut résulter d'une surestimation de la taille du jeu pastille-gaine ou à des incertitudes liées aux propriétés thermiques du combustible (U, Pu)O₂ irradié. En ce qui concerne l'amélioration du calcul du jeu pastille-gaine pour ces situations à faible puissance, différents aspects pourraient être examinés, tels que :

- Considérer la variation de température du combustible entre le plan médian-pastille et le plan inter-pastille afin de le comparer aux résultats expérimentaux pour lesquels la position axiale dans la pastille est inconnue (cela signifie introduire l'effet de la forme en diablo négligée précédemment en raison de son faible impact sur la température moyenne de la pastille au plan médian pastille).
- Considérer un autre mécanisme responsable de la réduction de taille de jeu pastille-gaine tel que le gonflement gazeux.

De plus, afin de réduire les incertitudes, l'hypothèse concernant la vitesse de migration de la porosité de remplissage pourrait être réexaminée avec une modélisation détaillée du processus d'évaporation-condensation autour des fissures.

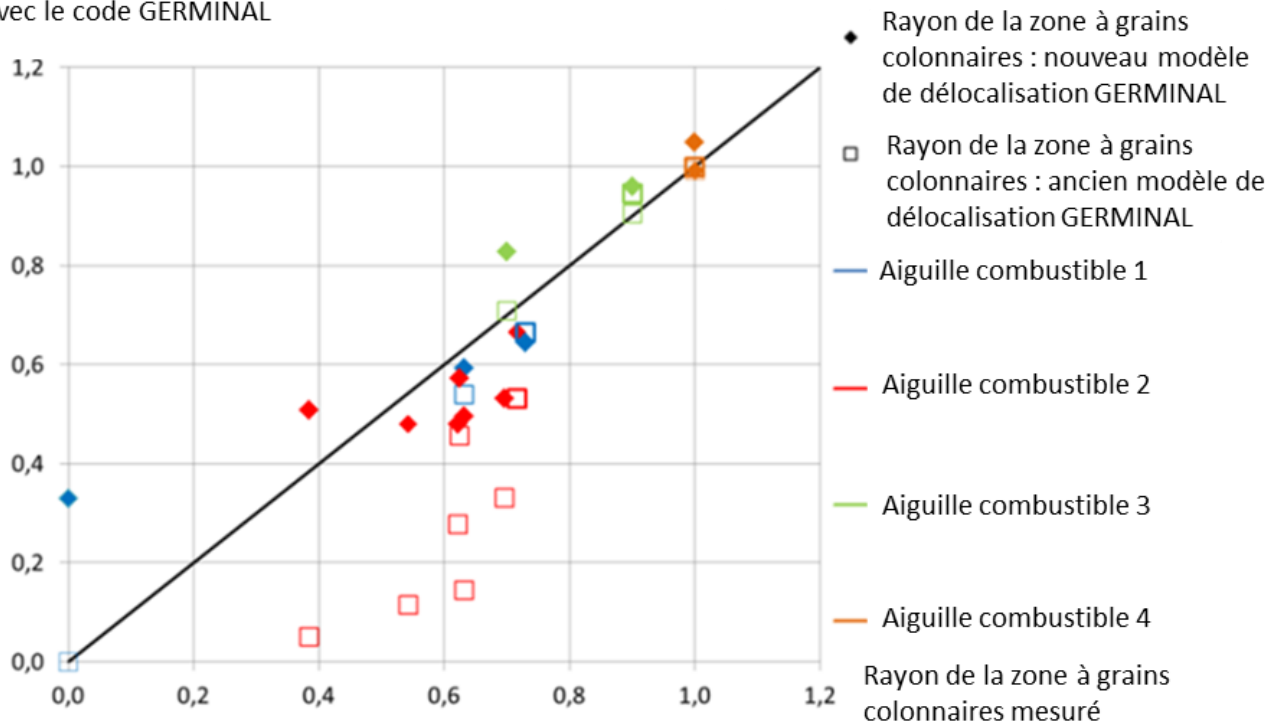
Malgré ces limitations, le nouveau modèle de délocalisation proposé permet d'obtenir des améliorations significatives avec une formulation physique où chaque paramètre peut être ajusté avec un calcul réalisé en amont.

Rayon du trou central obtenu avec le code GERMINAL



(a) Rayon du trou central

Rayon de la zone à grains colonnaires obtenu avec le code GERMINAL



(b) Rayon de la zone à grains colonnaires

Figure III-8 : Comparaison du rayon de la zone à grains colonnaires et du rayon du trou central entre GERMINAL, GERMINAL avec le nouveau modèle de délocalisation et les mesures expérimentales

BILAN DU CHAPITRE III

Dans ce chapitre, un nouveau modèle de délocalisation a été proposé pour prendre en compte de façon détaillée la fragmentation du combustible et le transfert de masse dans la zone restructurée lors de la formation du trou central. Une déformation de délocalisation homogène permet le couplage avec la loi de comportement mécanique. La contribution de la fragmentation du combustible est obtenue grâce à une formulation analytique basée sur la différence de déplacement obtenue entre une pastille fragmentée et une pastille non-fragmentée soumises à un gradient de température. Les cas de pastilles pleines et annulaires ont été considérés. La contribution du transfert de masse est obtenue en considérant l'expansion volumique de la zone de restructuration induite par la migration de la porosité de remplissage. Des comparaisons ont été effectuées entre les nouveaux résultats numériques et les mesures post-irradiation des rayons du trou central et de la zone restructurée. Les nouveaux résultats obtenus sur quatre aiguilles irradiées issues de la base de validation expérimentale de GERMINAL sont vraiment encourageants. Ces résultats sont en bon accord avec les résultats expérimentaux et on peut s'attendre à des améliorations significatives par rapport au modèle empirique précédent.

Certaines limitations demeurent toutefois, en ce qui concerne le processus de délocalisation pour un niveau de puissance plus faible, lorsqu'aucun trou central n'est observé, ou après la fermeture du jeu pastille-gaine. Afin d'étendre la validité et la précision de notre modélisation, quelques pistes ont été proposées. À titre exemple, pour aller plus loin dans la description physique du phénomène de fermeture du jeu pastille-gaine, nous pouvons prendre en compte l'effet de la forme en diabolo, l'impact du gonflement gazeux ou proposer une description détaillée du processus d'évaporation-condensation autour des fissures. Ce dernier étant l'objet du chapitre suivant.

CHAPITRE IV : ANALYSE DU MECANISME DE MIGRATION DE MATIERE INDUIT PAR LES FISSURES.

Objet du chapitre :

L'objet de ce chapitre est d'améliorer la compréhension du phénomène de transport des porosités associé au volume libre des fissures présente dans le combustible après la première montée en puissance. Des pores lenticulaires migrant vers le centre ont pu être observés autour des fissures à l'aide d'examen post irradiation des échantillons. Une hypothèse a été établie par Sens et Hoffman suggérant que les fissures agissent comme une source de pores lenticulaires migrant par la suite pour contribuer à la formation du trou central. Cette proposition n'a cependant pas pu être vérifiée quantitativement par l'expérience, et la question du mécanisme de transport par les fissures reste posée. Au chapitre III nous avons proposé une hypothèse selon laquelle la vitesse de migration des porosités de fabrication (porosité fermée) était identique à la vitesse de migration des volumes libres associés aux fissures (porosité ouverte). Cette équivalence étant basée sur la fraction volumique. Afin d'avoir plus d'informations sur ce phénomène et ainsi vérifier cette hypothèse, un modèle 2D macroscopique représentant deux fragments de pastille séparés par une fissure est proposé. Dans ce modèle, on étudie l'évolution de la fraction volumique de porosité, sous l'effet d'un régime thermique caractéristique du fonctionnement nominal, dans le cas de pores de fabrication uniformément répartis ou en présence d'une fissure localisée entre les deux fragments. Une comparaison des volumes libres transférés dans les deux cas est proposée pour évaluer l'hypothèse d'iso vitesses du chapitre III.

SOMMAIRE DU CHAPITRE IV

| | |
|---|------------|
| IV.1 DESCRIPTION DU PHÉNOMÈNE DE MIGRATION AROUND DES FISSURES | 120 |
| IV.2 MODELE 2D MACROSCOPIQUE..... | 122 |
| IV.2.1 Hypothèses de calcul du modèle macroscopique 2D (r,θ)..... | 123 |
| IV.2.2 Réalisation d'un modèle 3D microscopique pour déterminer les paramètres homogénéisés αp et $\lambda eq(p)$ | 125 |
| IV.2.2.1 Détermination de la fonction homogénéisée αp permettant de représenter l'évolution du coefficient α en fonction de la fraction volumique de porosité | 126 |
| IV.2.2.2 Détermination de la conductivité thermique homogénéisée λeqp permettant de représenter l'évolution de la conductivité thermique en fonction de la fraction volumique de porosité..... | 129 |
| IV.2.3 Résolution du problème thermique et évaluation de la vitesse moyenne de migration des pores | 131 |
| IV.2.3.1 Evolution de la température du combustible au voisinage de la fissure .. | 132 |
| IV.2.3.2 Evolution de la vitesse moyenne de migration des pores dans les directions radiale et circonférentielle..... | 133 |
| IV.2.4 Résolution de l'équation d'advection à thermique fixée..... | 137 |
| IV.2.4.1 Nouvelles hypothèses du modèle 2D macroscopique..... | 137 |
| IV.2.4.2 Méthode numérique et schéma de calcul utilisés pour résoudre l'équation d'advection..... | 139 |
| IV.2.4.3 Résultat pour le cas sans fissure | 143 |
| IV.2.4.4 Résultat pour le cas avec une fissure droite | 145 |
| IV.2.5 Perspectives | 148 |
| IV.2.5.1 Couplage complet des équations Thermique-Advection sur une pastille cylindrique | 148 |
| IV.2.5.2 Equations de couplage et schéma de calcul numérique | 149 |

| | | |
|----------|-----------------------------|-----|
| IV.2.5.3 | Modèle micromécanique | 151 |
|----------|-----------------------------|-----|

IV.1 DESCRIPTION DU PHÉNOMÈNE DE MIGRATION AUTOUR DES FISSURES

Comme expliqué dans l'étude bibliographique à la section I.3.2, le gradient de température induit par le régime thermique imposé dans les RNR active le phénomène dit d'évaporation-condensation. Ce phénomène de transport permet à la porosité fermée (comme par exemple les pores de fabrication) de migrer en prenant une forme lenticulaire vers le centre du combustible et de former le trou central. Concernant les volumes libres associés aux fissures formées en début d'irradiation (qui se traduisent par de la porosité ouverte) les images micrographiques ont permis de mettre en évidence la présence de pores lenticulaires autour des fissures. Ces observations semblent indiquer que ces pores lenticulaires sont issus des fissures et contribuent au transport de la porosité et à la guérison partielle des fissures. D'après Sens [Sens 72] et Hoffman, les fissures se comportent comme des sources de pores prenant une forme lenticulaire comme les pores de fabrication durant leurs migrations. Ils suggèrent ainsi que les pores issus des fissures migrent sous le même mécanisme de transport que ceux de fabrication, à savoir l'évaporation – condensation.

Le processus qui permet la nucléation des pores dans le milieu combustible à partir des surfaces libres des fissures reste inconnu (voir étude bibliographique réalisée à la section I.3.2 du chapitre I).

Dans le nouveau modèle de délocalisation proposé au chapitre III, nous avons supposé que les pores de fabrication et ceux induits par les fissures (appelés porosité de remplissage aux chapitres II et III) migrent à la même vitesse. Cette hypothèse doit être vérifiée. Comme l'illustre la Figure IV-1, plusieurs mécanismes possibles pourraient expliquer le phénomène de guérison des fissures. En effet, nous pouvons penser qu'ils sont émis par les surfaces libres liées aux fissures, sans pour autant savoir si les pores se déplacent ensuite dans la matière ou s'ils suivent les trajets imposés par les fissures.

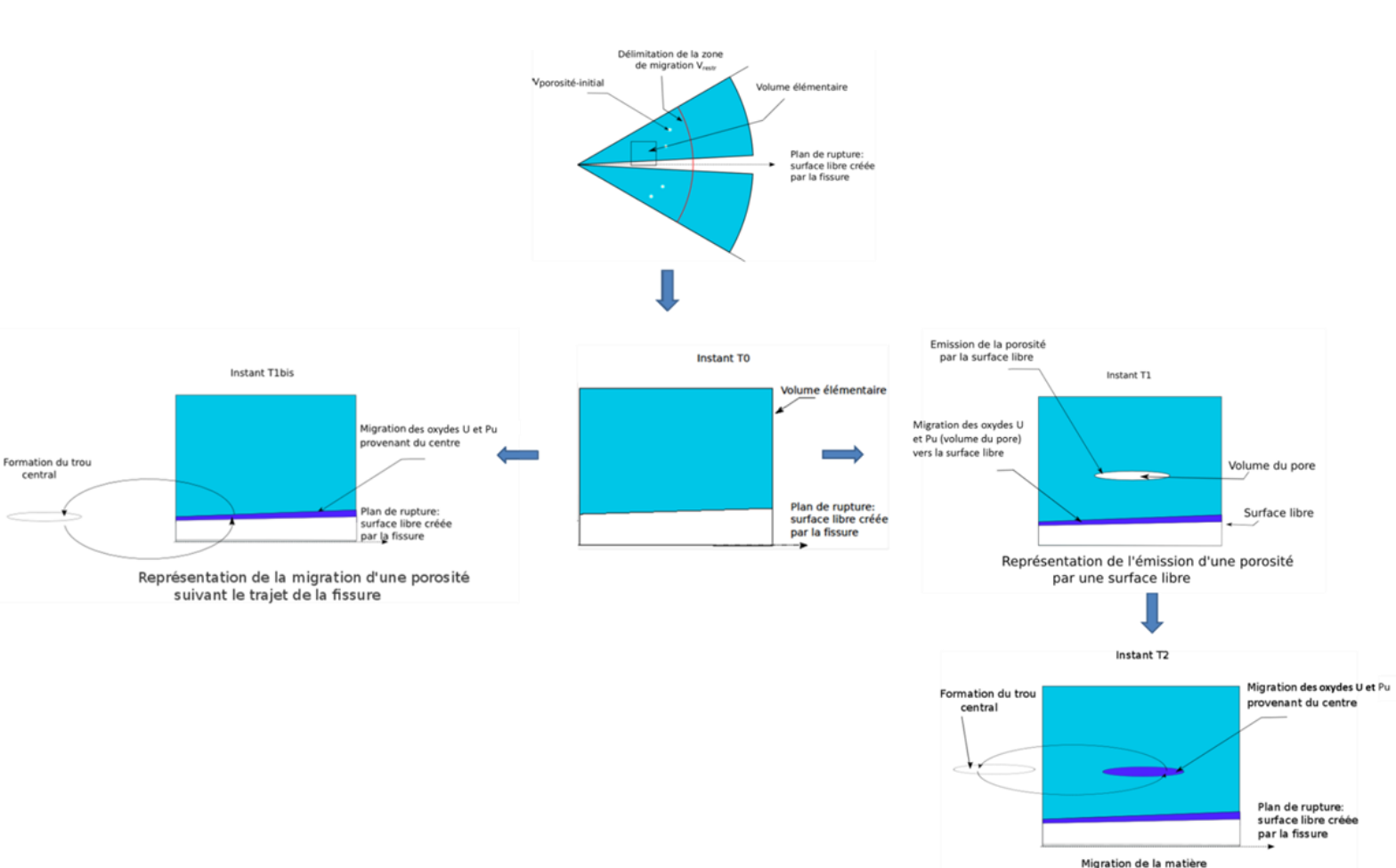


Figure IV-1 : Mécanisme de nucléation et de migration des pores possibles

L'objectif de cette étude est donc d'apporter plus d'informations sur le phénomène de guérison des fissures et si possible d'en déduire une vitesse moyenne de migration des pores issus des fissures. Pour cela, à l'aide d'un modèle macroscopique réalisé avec le logiciel Cast3m, nous allons analyser finement les transferts thermiques au voisinage des fissures et évaluer les vitesses de migrations locales associées.

IV.2 MODELE 2D MACROSCOPIQUE

L'idée principale est de considérer un matériau homogénéisé qui représente une pastille UO_2 en présence des pores créés lors du frittage et/ou des volumes libres induits par la fragmentation du combustible. Afin de mieux comprendre les transferts thermiques locaux au voisinage des fissures et leur impact sur la migration des pores nous allons utiliser l'équation de la chaleur et l'équation de transport des porosités proposé par [Sens 72].

L'équation de diffusion de la chaleur s'écrit :

$$\rho_{eq} C_{peq} \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}(\lambda_{eq} \text{grad} T) + p_V \quad (\text{IV-1})$$

où p_V est la puissance dégagée lors des réactions de fission, ρ_{eq} , C_{peq} et λ_{eq} sont respectivement la masse volumique équivalente (kg/m^3), la chaleur spécifique équivalente ($J/kg.K$) et la conductivité thermique ($W/m.K$) équivalente du matériau homogénéisé.

En utilisant l'expression du champ de vitesse établie dans le chapitre I (voir section I.3.1 équations (I-20)– (I-26)), l'équation d'advection de la porosité devient :

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\text{div}(\vec{v}_p p) \quad (\text{IV-2})$$

$$\text{avec, } \vec{v}_p = N\Omega \frac{D_{He/UO_2} \Delta H p_0 \exp\left(\frac{-\Delta H}{RT}\right)}{R^2 T^3} \alpha (\overrightarrow{\text{grad} T})_{matrice}$$

où p est la fraction de porosité moyenne, N est le nombre d'Avogadro (mol^{-1}), Ω le volume molaire des molécules de la matrice combustible transportées en phase vapeur dans la porosité (m^3), D_{He/UO_2} le coefficient de diffusion binaire le UO_2 en phase vapeur, R la constante des gaz parfait ($J/mol.K$), T la température moyenne du pore égale à celle de la matrice (K) et α un coefficient qui permet d'exprimer le gradient température au sein du pore en fonction de celui de la matrice.

IV.2.1 Hypothèses de calcul du modèle macroscopique 2D (r, θ)

Basés sur les examens expérimentaux réalisés après irradiation, les deux fragments de pastille modélisés représentent chacun 1/8 de la circonférence de la pastille combustible.

Le phénomène d'évaporation-condensation étant piloté par le gradient de température et sachant que le gradient thermique axial est négligeable devant le gradient thermique radial, notre étude est réalisée dans une géométrie 2D dans le plan (r, θ) (voir figure ci-dessous). En considérant les symétries circonférentielles des deux fragments étudiés (L_2 et L_3 de la Figure IV-2), le système étudié peut être simplifié. L'objectif étant d'obtenir une simulation réaliste du phénomène d'évaporation-condensation, nous avons choisi une pastille de dimension identique aux pastilles constituant l'aiguille combustible 1 (voir Chapitre II et III). Deux types de fissures ont été choisies pour cette étude, une fissure droite et une fissure dite perturbée (voir figure ci-dessous). Au niveau de la fissure on considère une fraction volumique de porosité égale à 1 et dans le reste du milieu combustible égale à 5%.

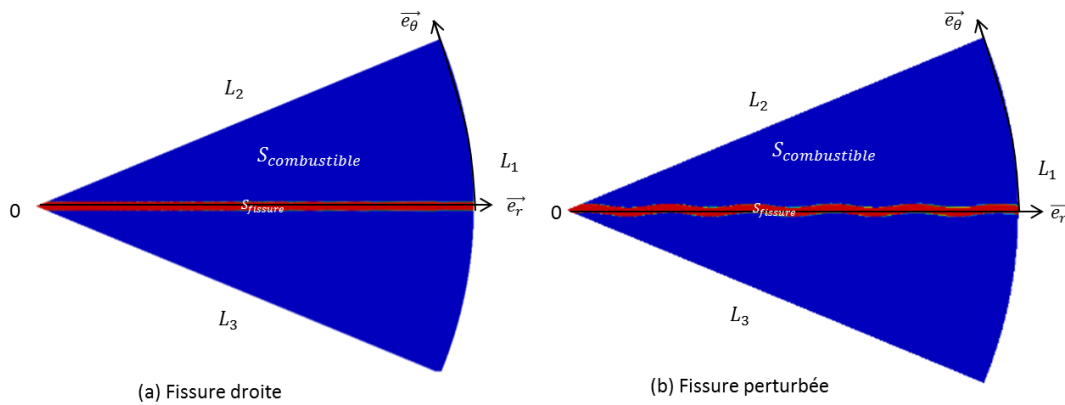


Figure IV-2 : Représentation simplifiée de deux fragments de pastille de part et d'autre d'une fissure : (a) fissure droite et (b) fissure perturbée

On considère un modèle thermique de conduction isotrope représentatif du combustible. Dans notre modèle, ρ_{eq} et c_{peq} correspondent respectivement à la valeur moyenne de la masse volumique et de la chaleur spécifique de l'UO₂ et de l'hélium. Une loi de mélange est donc utilisée pour ces deux paramètres :

$$\rho_{eq}(p) = (1 - p)\rho_{UO_2} + \rho_{He}p \quad (IV-3)$$

$$c_{peq}(p) = (1 - p)c_{p_{UO_2}} + c_{p_{He}}p \quad (IV-4)$$

Les chargements thermiques appliqués sur la pastille combustible sont les suivants :

- Nous appliquons dans le combustible $S_{combustible}$, une source de puissance volumique P_v (w/m) variant au cours du temps, de l'ordre de celle obtenue dans l'aiguille combustible 1 présentée dans le chapitre II (voir Figure II-7). Le combustible étant absent dans la fissure, la valeur de la puissance est nulle dans ce volume libre $S_{fissure}$.
- Nous appliquons une condition de température isotherme sur la surface extérieure de la pastille, correspondant aux températures atteintes dans l'aiguille combustible 1 variant au cours du temps.
- Les surfaces L_2 et L_3 sont considérées adiabatiques (condition de symétrie).

Pour prendre en compte l'effet de la fraction volumique de porosité sur la température (voir les équations (IV-1)-(IV-2)), nous devons connaître l'influence de la fraction de porosité p sur la conductivité thermique équivalente λ_{eq} et sur le coefficient α . Des calculs thermiques d'un pore inclus dans une matrice combustible 2D déjà réalisés par Sens [Sens 72], ont montré que α dépendait de la forme du pore comme l'illustre la Figure I-21 du chapitre I [Sens 72], en revanche l'influence de la fraction volumique de porosité sur le coefficient α reste méconnue. En effet, des pores sont susceptibles de se regrouper et de se rassembler, notamment à proximité des fissures et proche du trou central. Il n'est donc pas exclu que des zones à plus forte fraction volumique de porosité se créent et que la géométrie des pores change dans ces zones. Ainsi, il faudrait vérifier si le coefficient α dépend de la fraction volumique de porosité, de par son influence sur la vitesse de migration des pores (voir équation (IV-2)), afin d'obtenir une modélisation réaliste de leur comportement sur l'ensemble du combustible (voir l'étude 3D proposée à la section suivante).

IV.2.2 Réalisation d'un modèle 3D microscopique pour déterminer les paramètres homogénéisés $\alpha(p)$ et $\lambda_{eq}(p)$

Afin de connaître l'influence de la fraction volumique de porosité sur le coefficient α et sur la conductivité thermique équivalente λ_{eq} , nous avons réalisé une étude 3D avec Cast3m qui consiste à évaluer la température d'un élément de volume d'UO₂ solide contenant un pore sphérique rempli d'hélium dont on fait varier le rayon (voir Figure IV-3). En pratique les pores observés durant leurs migrations sont principalement lenticulaires, mais afin de rester sur une configuration simple isotrope nous travaillons sur des pores sphériques. La taille de l'élément de volume UO₂ est fixée à 600 μm et le rayon du pore varie de 20 μm à 300 μm , correspondant respectivement à des fractions volumiques de 0.014% et de 52%.

Pour représenter le gradient de température existant dans la pastille, nous imposons sur les surfaces externes de la matrice une température T_1 et T_2 , tel que $T_1 > T_2$ (voir Figure IV-3). Le gradient imposé est de l'ordre de 2500 K/cm. Des conditions de symétries sont imposées sur les surfaces inférieures et supérieures de la matrice (surfaces adiabatiques). Afin d'avoir une base de comparaison avec les travaux réalisés par Sens, le gradient de thermique imposé et la dimension des pores choisie sont du même ordre que ceux utilisés par Sens. Nos résultats pourront être comparés à ceux obtenus par Sens et Nichols pour évaluer l'effet 3D.

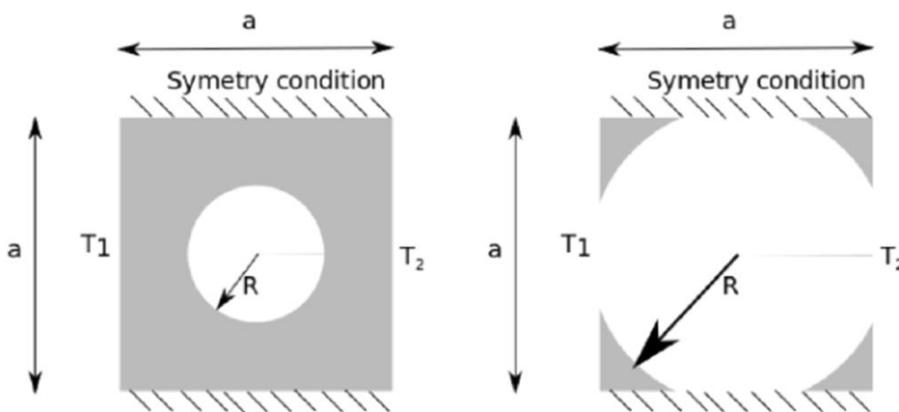


Figure IV-3 : Schéma illustrant la matrice combustible et le pore sphérique pour deux rayons donnés dans le plan (x, z)

Nous définissons un modèle de conduction thermique dans le pore et dans la matrice, en spécifiant la conductivité thermique de l'hélium dans le pore et de l'UO₂ dans la matrice. L'objectif étant d'analyser l'évolution de la température locale dans le pore, soumis à un chargement thermique constant et suffisamment élevé pour activer le processus de migration des pores.

L'équation de la chaleur est donc résolue en régime stationnaire dans cette étude :

$$\text{div}(\lambda(x, y, z)\text{grad}T) = 0 \quad (\text{IV-5})$$

Concernant les conductivités thermiques de l'UO₂ et de l'hélium, nous reprenons les mêmes valeurs que celles données par Sens. La conductivité thermique dans la matrice UO₂ λ_{UO_2} est évaluée à 2 W/m.K et est supposée indépendante de la température. Quant à la conductivité thermique de l'hélium dans le pore λ_{He} , elle est évaluée à 0.4 W/m.K. La présence des gaz produits par les réactions de fission dans le pore n'est pas prise en compte dans notre modèle.

IV.2.2.1 Détermination de la fonction homogénéisée $\alpha(p)$ permettant de représenter l'évolution du coefficient α en fonction de la fraction volumique de porosité

En faisant varier le rayon du pore, on a pu déterminer une valeur de α pour différentes valeurs de fraction volumique de porosité. Comme l'illustrent les valeurs du Tableau IV-1 et l'allure des deux courbes de la Figure IV-4, pour des faibles et fortes fractions volumiques de pores, le coefficient α tend vers 1. Ce qui est logique, le pore étant trop petit, son impact sur la thermique est négligeable et lorsque celui-ci est trop grand, les extrémités du pore se rapprochent des bords de l'élément de volume où l'on impose les températures. Notons que le coefficient α atteint sa valeur maximale de 1.341 pour un rayon de pore de 100 μm correspondant à une fraction de porosité p d'environ 0.02.

| R (m) | p | $\alpha(p)$ |
|--------|----------|-------------|
| 20e-6 | 0.000140 | 1.1663 |
| 30e-6 | 0.000472 | 1.1958 |
| 40e-6 | 0.001191 | 1.2868 |
| 50e-6 | 0.002294 | 1.3117 |
| 60e-6 | 0.003777 | 1.3214 |
| 70e-6 | 0.006472 | 1.3338 |
| 80e-6 | 0.00966 | 1.3379 |
| 90e-6 | 0.013759 | 1.3398 |
| 100e-6 | 0.019138 | 1.3411 |
| 125e-6 | 0,03787 | 1,3393 |

(a) $p < 0.05$

| R (m) | p | $\alpha(p)$ |
|--------|---------|-------------|
| 150e-6 | 0.06459 | 1.3181 |
| 175e-6 | 0,10393 | 1.2928 |
| 200e-6 | 0.15427 | 1.2593 |
| 225e-6 | 0.206 | 1.2234 |
| 250e-6 | 0.3021 | 1.1494 |
| 300e-6 | 0.520 | 1.00 |

(b) $p > 0.05$

Tableau IV-1 : Valeurs du coefficient α en fonction de la fraction volumique de porosité obtenues avec la simulation 3D (x, y, z) : cas (a) $p < 5\%$ et cas (b) $p > 5\%$

Pour une fraction de porosité comprise entre 0.2% et à 5%, on remarque que la valeur du coefficient α reste quasi constante et qu'en dessous de 0.2%, α tend rapidement vers 1 (voir Figure IV-4). On peut ainsi considérer que le coefficient α reste constant et égal à sa valeur maximale d'environ 1.34 pour les nœuds du maillage où la fraction volumique de porosité est comprise entre 0.2 % et 5%. En dessous d'une fraction volumique de porosité de 0.2% on fera l'hypothèse que la pastille est totalement dense et par conséquent que la vitesse de migration est nulle. Le coefficient α n'a donc plus de sens physique pour des fractions volumiques inférieures à 0.2%.

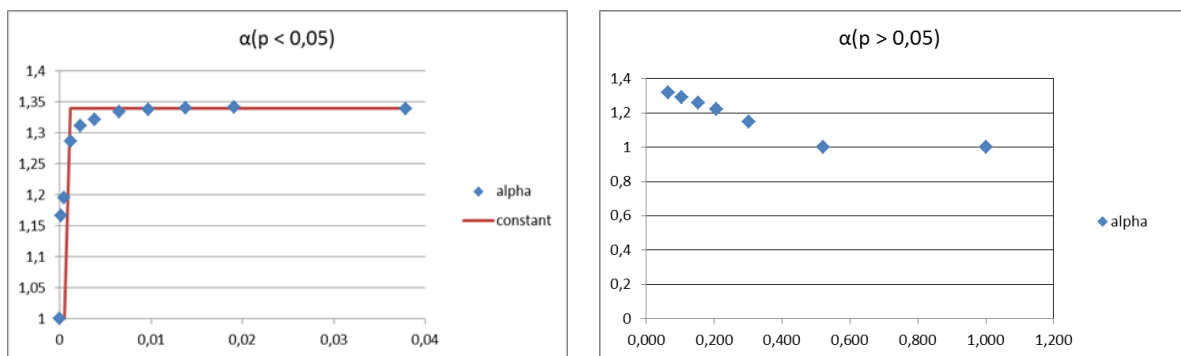


Figure IV-4 : Evolution du coefficient α en fonction de la fraction volumique de porosité, dans le cas où elle est inférieure à la porosité de fabrication et dans le cas où elle est supérieure.

Sur la Figure IV-5, l'évolution de la température le long de la ligne centrale du pore dans la direction du gradient de température est tracée. Les deux courbes illustrent l'impact de la taille du pore sur l'évolution de la température.

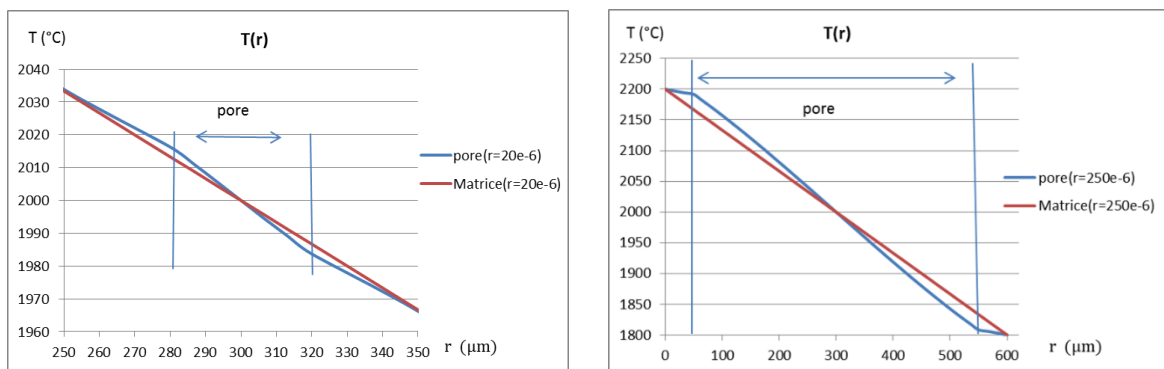


Figure IV-5 : Mise en évidence de l'impact du pore sur l'évolution de la température

Ce qui nous intéresse principalement dans cette étude, ce sont les valeurs du coefficient α dans les zones où il y a une fraction volumique locale de porosité élevée, notamment à proximité de la fissure et du trou central. A partir des résultats numériques, l'expression de la fonction homogène $\alpha(p)$ a pu être ainsi établie :

$$\begin{aligned} \alpha(p) &= \alpha_{max} & \text{si } 0.002 \leq p \leq 0.05 \\ \alpha(p) &= a_1 p + b_1 & \text{si } 0.05 < p \leq 0.50 \\ \alpha(p) &= \alpha_{min} & \text{si } 0.50 < p \leq 1 \end{aligned} \tag{IV-6}$$

où $\alpha_{max} = 1.34$, $a_1 = -0.7042$, $b_1 = 1.366$ et $\alpha_{min} = 1$.

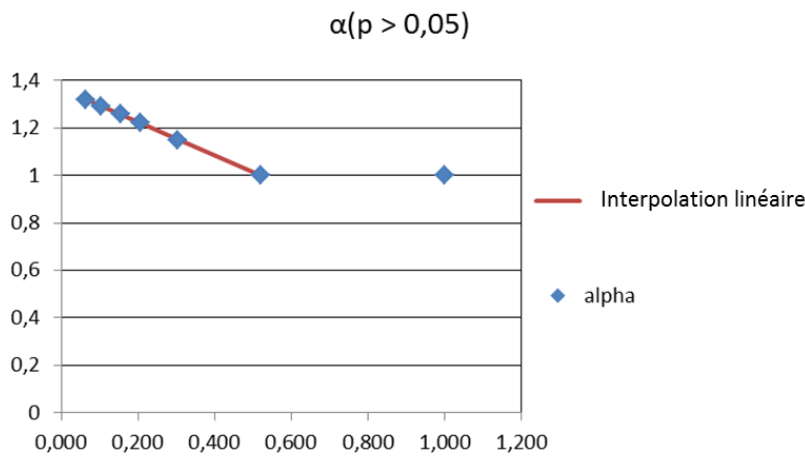


Figure IV-6 : Interpolation polynomial de degrés 1 pour décrire la fonction $\alpha(p)$ dans le cas où $p > 5\%$

Contrairement à Sens qui trouve une valeur du coefficient α de 1.5 pour un pore de rayon 100 μm (taille de la matrice combustible inconnue), nous trouvons une valeur de α ne dépassant pas 1.35, quelle que soit la taille de pore sphérique choisie. Cet écart peut provenir des hypothèses géométriques retenues entre nos deux modèles, en effet, notre modèle est 3D tandis que le modèle proposé par Sens est en 2D. Pour mieux comprendre cet écart entre nos résultats respectifs, le même travail a été réalisé avec une simulation 2D plan qui traduit une forme cylindrique de la porosité. Comme l'illustrent les résultats obtenus du Tableau IV-2, nous obtenons des valeurs du coefficient α pouvant atteindre voir dépasser 1.5 pour certaines fractions volumiques de porosité. Les valeurs obtenues par la simulation 2D sont supérieures à celles obtenues par la simulation 3D pour une même fraction volumique de porosité donnée, comme l'illustre la Figure IV-7. En effet, en 2D, le cercle peut être assimilé à un cylindre offrant une résistance thermique plus élevée que la sphère de par sa surface plus grande sur

chaque plan (x,y) du cube. Notons que la valeur maximale du coefficient α est obtenue pour une fraction volumique de porosité d'environ 2% dans les deux simulations.

| R (m) | p | $\alpha(p)$ |
|--------|----------|-------------|
| 50e-6 | 0.02176 | 1.6342 |
| 100e-6 | 0.08721 | 1.5711 |
| 150e-6 | 0.19629 | 1.4615 |
| 200e-6 | 0.34901 | 1.3188 |
| 250e-6 | 0.545360 | 1.1494 |
| 300e-6 | 0.7854 | 1.000 |

Tableau IV-2 : Valeurs du coefficient α en fonction de la fraction volumique de porosité obtenues avec la simulation 2D

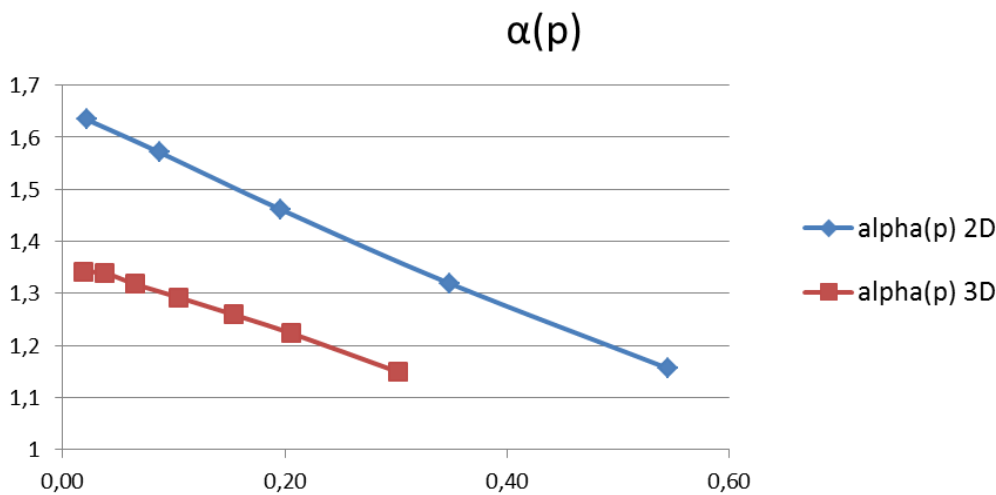


Figure IV-7 : Comparaison des résultats de $\alpha(p)$ obtenues avec la simulation 2D et 3D

IV.2.2.2 Détermination de la conductivité thermique homogénéisée $\lambda_{eq}(p)$ permettant de représenter l'évolution de la conductivité thermique en fonction de la fraction volumique de porosité

Pour déterminer la conductivité thermique $\lambda_{eq}(p)$, la formule établie par Maxwell-Eucken en 3D [Eucken 40] a été utilisée (voir équation (IV-7)). Cette formule permet d'évaluer, dans un milieu poreux biphasique 3D quasi-isotrope, la conductivité thermique équivalente du milieu poreux.

$$\lambda_{eq}(p) = \lambda_m \left(1 - \frac{3(\lambda_m - \lambda_p)p}{(\lambda_p(1-p) + \lambda_m(2+p))} \right) \quad (IV-7)$$

où λ_m et λ_p sont respectivement la conductivité thermique de la matrice (l'UO₂) et des pores (l'hélium), et p la fraction volumique de porosité.

La formule d'homogénéisation proposée par Maxwell-Eucken, n'est plus valable dans le cas anisotrope, typiquement si les inclusions ont une forme lenticulaire, un calcul numérique deviendrait nécessaire (voir équation (IV-8)) :

$$\lambda_{eq}^{num}(p)_{ij} = \frac{\langle \vec{Q} \rangle_j \cdot \vec{x}_i}{grad T \cdot \vec{x}_j} \quad (IV-8)$$

$$\text{tel que : } \langle \vec{Q} \rangle_j = \frac{1}{S_j} \int_{S_j} \overrightarrow{flux} ds$$

où $\lambda_{eq}^{num}(p)_{ij}$ est la matrice de conductivité thermique anisotrope, $\langle \vec{Q} \rangle$ correspond au flux thermique moyen évalué grâce au modèle thermique réalisé sur Cast3m et S_j la surface de la face du flux sortant dans la direction j du cube et \vec{x}_i la normale extérieure à la surface dans la direction i .

La formule de Maxwell – Eucken a pu être testée sur l'élément de volume présenté sur la Figure IV-3 pour différentes valeurs de fraction volumique de porosité. Comme l'illustrent les résultats de la Figure IV-8, les valeurs obtenues numériquement avec Cast3m avec la formule donnée par l'équation (IV-8) dans le cas isotrope sont très proches de celles données par la formule Maxwell – Eucken (IV-7). La valeur de la conductivité thermique équivalente augmente lorsque la fraction volumique de porosité diminue. La conductivité thermique de l'UO₂ étant plus grande que celle de l'hélium, lorsque le volume gazeux d'hélium se voit diminuer, la conductivité thermique équivalente augmente et tend vers la valeur de la conductivité de l'UO₂.

| R (m) | p | $\lambda_{eq}(p)$ | $\lambda_{eq}^{num}(p)$ |
|--------|----------|-------------------|-------------------------|
| 50e-6 | 0.002294 | 1.9950 | 1.9952 |
| 100e-6 | 0.019138 | 1.9585 | 1.9590 |
| 150e-6 | 0.06459 | 1.8623 | 1.8633 |
| 200e-6 | 0.15427 | 1.6813 | 1.6825 |
| 250e-6 | 0.3021 | 1.4062 | 1.4053 |
| 300e-6 | 0.520 | 1.0459 | 1.0387 |

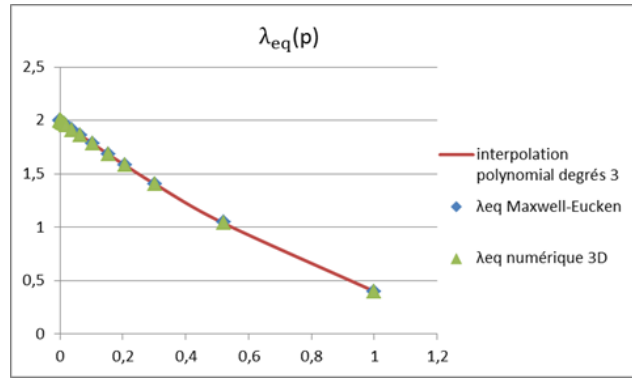


Figure IV-8: Comparaison des valeurs de conductivité thermique équivalente obtenues numériquement sur Cast3m λ_{eq}^{num} et avec la formule de Maxwell- Eucken λ_{eq}

Pour simplifier notre étude, nous avons considérés que les pores présents dans le combustible UO2 sont sphériques (voir section IV.2.1). Ainsi, la formule proposée par Maxwell-Eucken en 3D peut être utilisée pour la suite (voir les sections suivantes).

IV.2.3 Résolution du problème thermique et évaluation de la vitesse moyenne de migration des pores

Dans un premier temps, seul le problème thermique est résolu afin d’analyser l’influence de la fissure sur la température de la pastille. L’étude thermique est réalisée sur les deux types de fissures présentés sur la Figure IV-2. En ce qui concerne le chargement thermique, nous avons choisi d’appliquer le régime de puissance maximale obtenu dans l’aiguille combustible 1 (voir Chapitre II) à la fin de la première montée en puissance. À partir des équations (IV-1) et (IV-7) et des hypothèses du modèle 2D macroscopique données dans la section IV.2.1, le modèle thermique a pu être résolu grâce à la méthode des éléments finis sur Cast3m en régime stationnaire, en considérant les deux types de fissure. Pour cette étude thermique, un maillage radial représenté par des éléments quadratiques QUA4 a été choisi. Une étude de sensibilité a permis de valider ce choix d’éléments et de déterminer le raffinement du maillage permettant d’obtenir des résultats thermiques qui convergent.

IV.2.3.1 Evolution de la température du combustible au voisinage de la fissure

Fissure perturbée

Pour illustrer l'impact de la fissure perturbée sur la température locale du combustible à proximité de la fissure et dans celle-ci, nous avons tracé l'évolution de la température dans les zones a et b en fonction de l'azimut entre les points PR1B et PR2B sur la Figure IV-9. Cette dernière montre que le champ de température n'est pas identique lorsque l'on passe de part et d'autre de la fissure (voir Figure IV-10). Selon la courbure de la fissure, la température maximale n'est pas située du même côté. En effet, la température maximale est atteinte au bord droit de la fissure dans le cas a et au bord gauche dans le cas b. Notons que la différence de température peut atteindre quatre degrés d'un bord à l'autre.

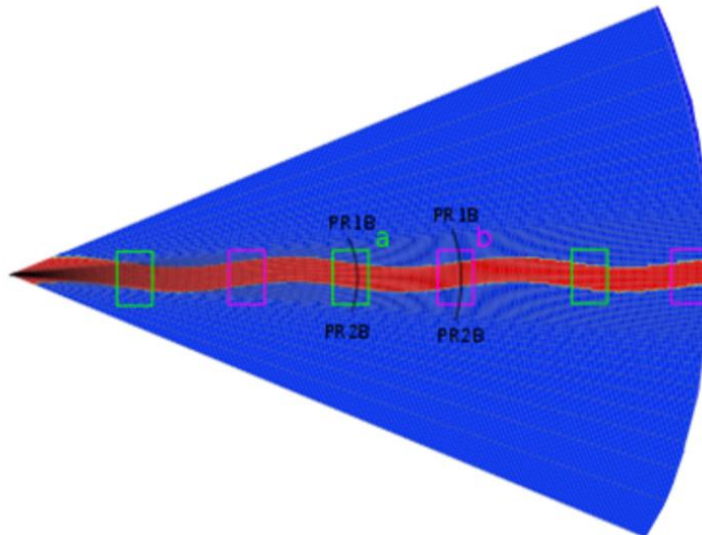


Figure IV-9 : Zone d'analyse de la variation azimutale locale de la température

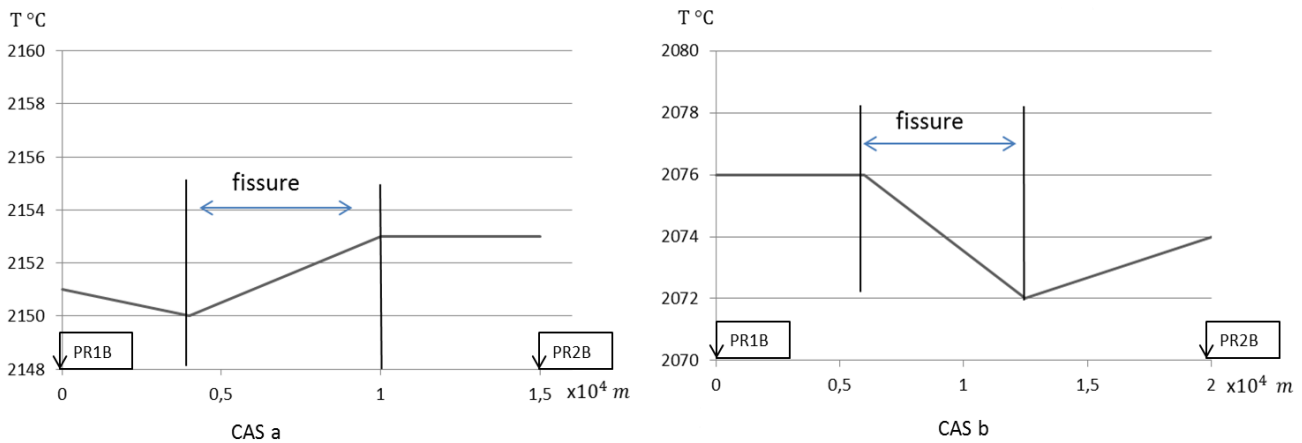


Figure IV-10 : Évolution de la température en fonction de l'azimut dans les cas a et b

Fissure droite

Concernant la fissure droite, l'évolution de la température à travers la fissure est plus faible que pour le cas d'une fissure perturbée, le minimum est atteint au milieu de la fissure avec une différence de température d'environ un degré comme l'illustre la Figure IV-11. Les températures sont identiques de part et d'autre de la fissure, contrairement aux cas vus précédemment où en fonction de la direction de la fissure (cas a ou b), un bord est plus chaud que l'autre.

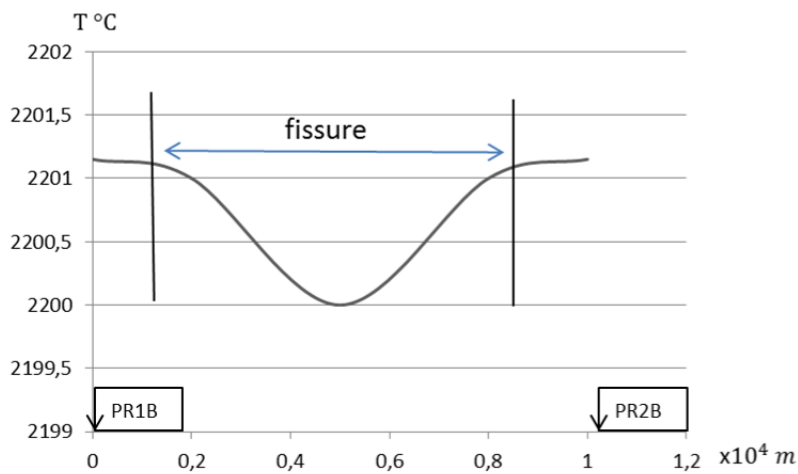


Figure IV-11: Évolution de la température en fonction de l'azimut dans le cas d'une fissure droite

IV.2.3.2 Evolution de la vitesse moyenne de migration des pores dans les directions radiale et circonférentielle

Sans la présence de fissures dans la pastille combustible, il a été montré dans la littérature que la composante circonférentielle du champ de vitesse de migration des pores est nulle. En revanche avec une fissure, les résultats thermiques ont montré que la température dépend de l'angle θ (voir Figure IV-10 et Figure IV-11), menant ainsi à un gradient de température circonférentiel non nul. Dépendant au premier ordre de la température et du gradient de température, la composante circonférentielle du champ de vitesse de migration est par conséquent non nulle, notamment à proximité de la fissure.

Grâce à la résolution du modèle thermique présenté à la section précédente et aux opérateurs présents dans Cast3m, le champ de vitesse donnée par les équations (IV-2) et (IV-6) a pu être évalué sur l'ensemble de la pastille combustible dans un repère cylindrique (r, θ) .

Comme l'illustre la Figure IV-12 et les évolutions données par le graphe (b) de la Figure IV-13, le profil de la composante radiale du champ de vitesse de migration des pores est parabolique et ne dépend pas de l'angle θ (en dehors de la fissure). On remarque toutefois que la vitesse de migration des pores est plus faible dans la fissure droite ou perturbée que dans le milieu combustible, pour un même rayon donné (voir le graphe (b) de la Figure IV-13). Cela est dû au coefficient α qui est plus faible dans la fissure que dans le combustible (voir équation (IV-6)). Tout comme Sens [Sens 72], la valeur de la vitesse radiale est nulle au centre, puis atteint son maximum, pour redevenir nul (voir les évolutions données par les graphes (a) et (b) de la Figure IV-13). En effet, le processus de migration est activé uniquement dans une zone où la température est supérieure à 1800°C et lorsque le gradient de température n'est pas négligeable, formant ainsi la zone de restructuration. En périphérie, les températures sont trop faibles pour activer le processus de migration, par conséquent les composantes radiale et circumférentielle du champ de vitesse de migration sont nulles en dehors de la zone restructurée (voir Figure IV-13 et Figure IV-15). Notons que la forme de la fissure n'a que peu d'effet sur la composante radiale du champ de vitesse de migration des pores.

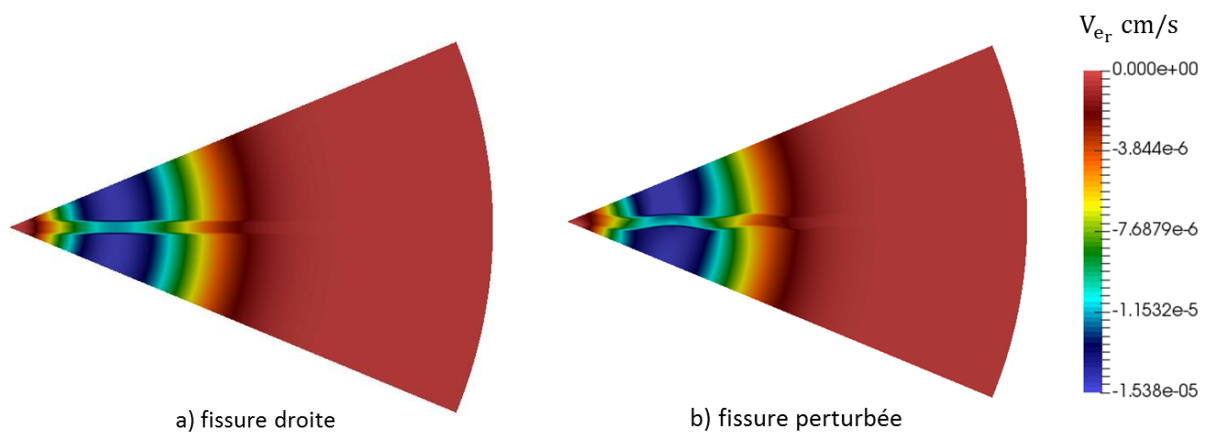
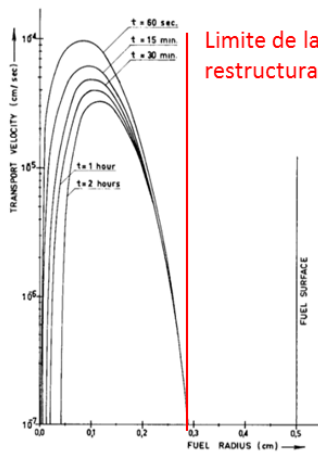
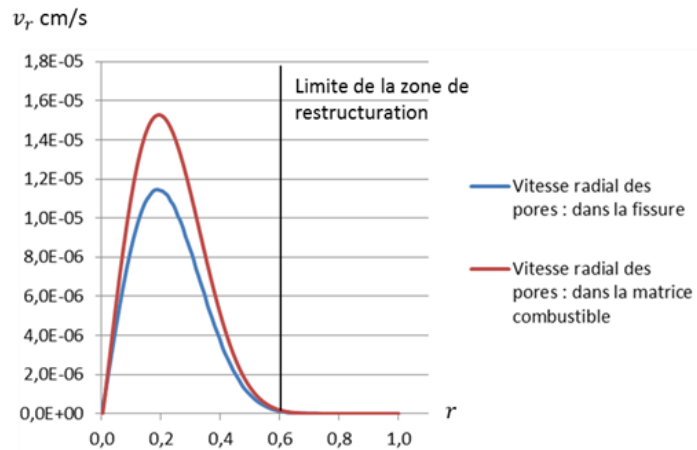


Figure IV-12 : Évolution radiale et circumférentielle de la composante radiale du champ de vitesse des pores dans la pastille combustible : a) fissure droite, b) fissure perturbée



(a) Modèle proposé par Sens



(b) Modèle réalisé

Figure IV-13 : Évolution radiale de la composante radiale du champ de vitesse des pores : (a) lenticulaire obtenue par Sens [Sens 72] (b) dans la fissure droite et en dehors de la fissure droite avec notre modèle

Les évolutions données par les Figure IV-14 et Figure IV-15, de la composante circonférentielle du champ de vitesse de migration des pores, montrent que la fissure (droite ou perturbée) va se densifier dû à une migration des pores vers le milieu combustible. À l'image de ce que nous avons observé lors de l'analyse thermique, pour la fissure droite, la migration des pores se fera à la même vitesse de part et d'autre de la fissure (voir les Figure IV-11 et Figure IV-15). Quant à la fissure perturbée, Il semblerait que la migration des pores aura tendance à redresser la fissure. En effet, selon la courbure de la fissure (voir cas a et cas b de la Figure IV-9 et Figure IV-10), le sens de migration des pores est différent (voir Figure IV-15) : dans le cas a les pores auront tendance à migrer vers le bas et dans le cas b vers le haut.

À titre de comparaison, la valeur maximale de la composante radiale est dix fois plus élevée que la valeur maximale de la composante circonférentielle, notamment dans la zone bleue représentée dans la Figure IV-12. En revanche lorsque l'on s'éloigne de cette zone, l'écart entre les deux composantes se réduit et devient presque nul.

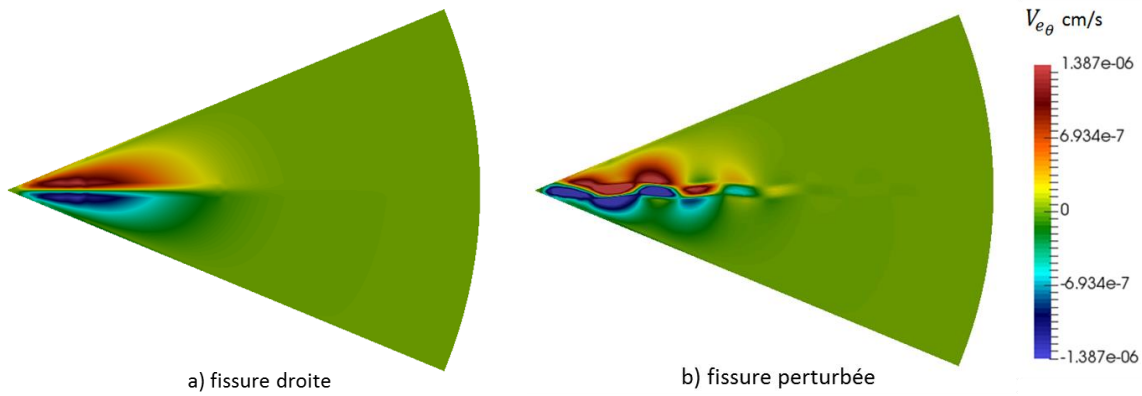


Figure IV-14 : Évolution radiale et circumferentielle de la composante circumferentielle du champ de vitesse de migration des pores dans la pastille combustible a) fissure droite, b) fissure perturbée

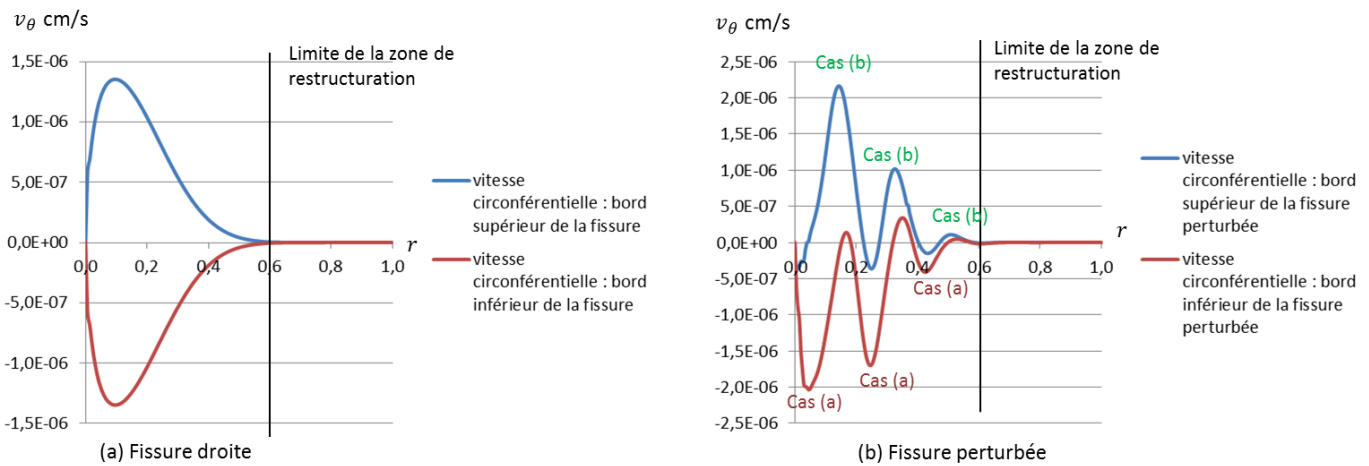


Figure IV-15: Évolution radiale de la composante circumferentielle du champ de vitesse de migration des pores aux bords de la fissure : (a) fissure droite et (b) fissure perturbée

En évaluant la vitesse moyenne d'émission des pores issus de la fissure droite et perturbée dans la direction circumferentielle « $v_{\theta}^{fiss}(r)$ » (voir équation (IV-9)) , nous avons constaté qu'elle était environ identique, comme l'illustre la figure ci-dessous.

$$v_{\theta}^{fiss}(r) = \frac{v_{\theta}^{sup}(r) - v_{\theta}^{inf}(r)}{2} \tag{IV-9}$$

où $v_{\theta}^{sup}(r)$ et $v_{\theta}^{inf}(r)$ correspondent respectivement à la vitesse moyenne de migration circumferentielle des pores aux bords supérieures et inférieures de la fissure droite et perturbée (voir Figure IV-15).

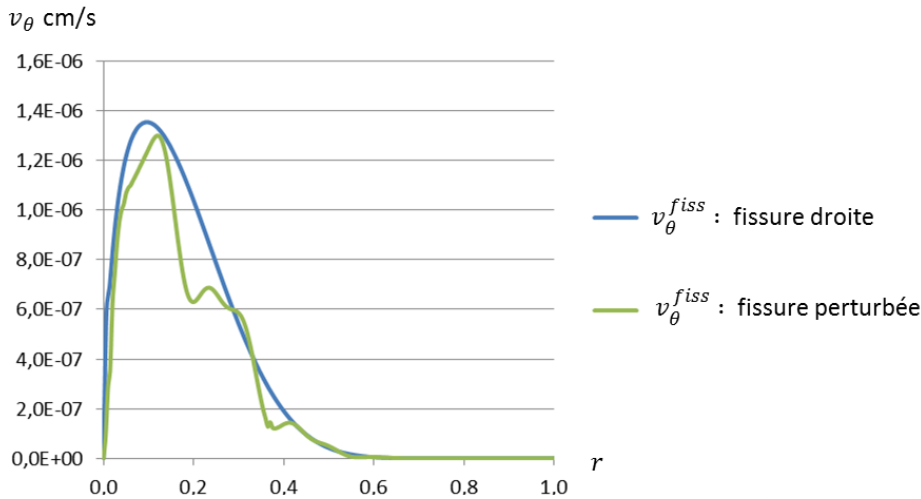


Figure IV-16 : Comparaison de $v_{\theta}^{tot}(r)$ entre la fissure droite et perturbée

De plus, la vitesse moyenne radiale de migration des pores est également similaire pour les deux cas de fissures. Par conséquent, on peut supposer que l'apport en porosité par les fissures droite et perturbée contribuant à la formation du trou central sera identique au cours du temps. Dans la suite de notre étude, nous nous sommes donc intéressé uniquement à la fissure droite.

IV.2.4 Résolution de l'équation d'advection à thermique fixée

La composante circonférentielle du champ de vitesse permet d'expliquer qualitativement un processus de nucléation des pores issus de la fissure vers le milieu combustible, permettant une guérison de la fissure par densification. Mais ces informations restent insuffisantes pour caractériser de façon précise le processus de guérison des fissures.

L'objectif de cette section est de proposer une première étude quantitative simplifiée, permettant avant tout d'intégrer l'équation d'advection pour une distribution de température fixée et d'évaluer une vitesse moyenne de migration des pores issus des fissures.

IV.2.4.1 Nouvelles hypothèses du modèle 2D macroscopique

Pour cette étude, nous travaillons sur une géométrie de pastille rectangulaire, dans un repère cartésien (x, y) . Le maillage est constitué d'éléments quadratiques QUA4 de même taille. Une étude de sensibilité a été réalisée afin de déterminer le type d'élément et le raffinement de

maillage permettant d'obtenir des résultats qui convergent pour une durée de calcul optimale. Afin de déterminer la vitesse moyenne de migration des pores issus des fissures, une étude comparative entre une pastille avec fissure et sans a été réalisé. Deux configurations sont considérées (voir Figure IV-17) :

- Une pastille sans fissure composée d'une répartition homogène de pores sphériques. Cette configuration a pour but de reprendre les hypothèses 1D du modèle de migration de GERMINAL (voir Chapitre III). La fraction volumique de porosité initiale choisie est de 5%.
- Une pastille avec une fissure droite, ne comportant aucuns pores dans le milieu combustible. L'objectif étant de comparer les volumes libres moyens transférés contribuant à la formation du trou central dans les deux configurations. Pour que la comparaison soit possible, le volume libre total présent dans la pastille est identique dans les deux configurations, et le régime thermique imposé est le même. Les chargements thermiques, sont appliqués de manière à retrouver les mêmes températures dans le combustible que pour la pastille cylindrique (voir condition de l'étude thermique proposée à la section IV.2.3).

Les conditions limites proposées dans la section IV.2.1 ont quelque peu été modifiées par la nouvelle géométrie utilisée (voir Figure IV-17) :

- Sur les surfaces L_2 et L_3 , nous appliquons une condition de symétrie verticale (surfaces adiabatiques).
- Sur la surface L_5 , nous appliquons une condition de symétrie horizontale (surface adiabatique).

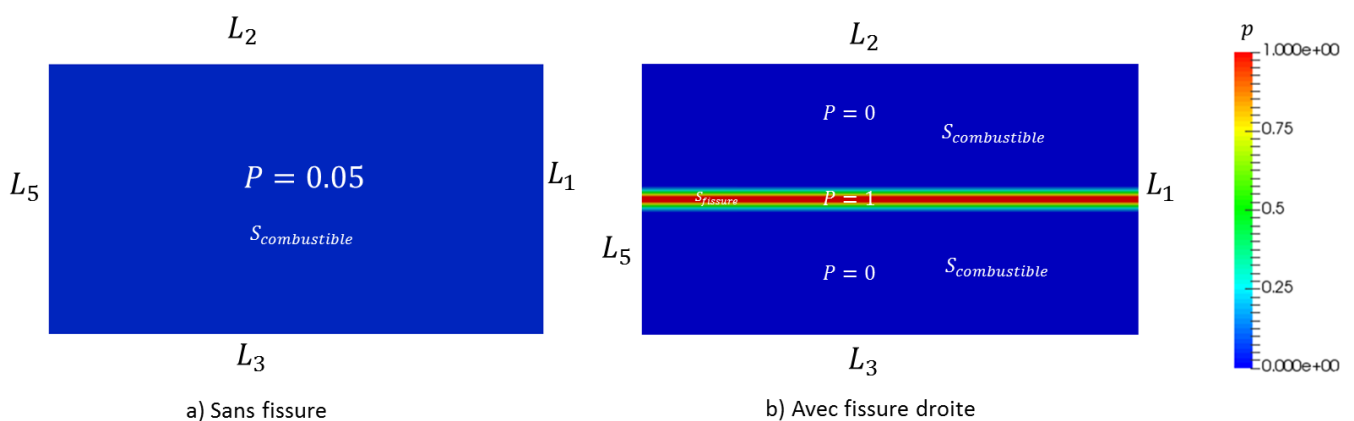


Figure IV-17 : Pastille rectangulaire avec et sans fissure

L'équation de la chaleur est résolue une fois uniquement, en régime stationnaire et la température obtenue en sortie est considérée constante.

Pour simplifier, nous considérons que la vitesse de migration dans chaque milieu (fissure et combustible) est constante et égale à sa valeur initiale, qui est évaluée juste après résolution du problème thermique. Notons que la géométrie rectangulaire de la pastille ne change pas la distribution du champ de vitesse de migration des pores comme l'illustre la Figure IV-18. Quant aux valeurs, elles sont quasiment identiques sur les deux géométries de pastille (voir Figure IV-12, Figure IV-14 et Figure IV-18).

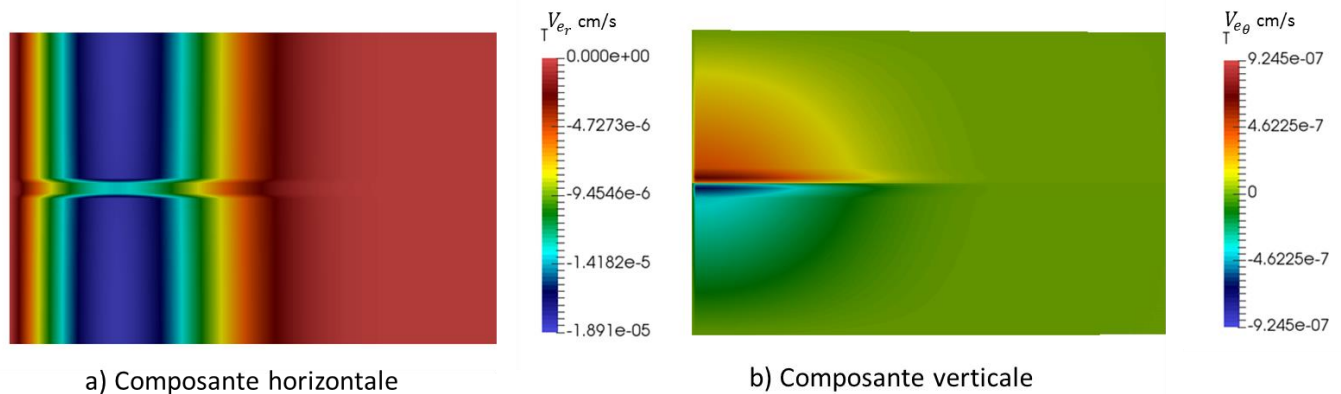


Figure IV-18 : Évolution de la composante horizontale et verticale du champ de vitesse de migration des pores dans la pastille combustible rectangulaire : a) composante horizontale, b) composante verticale

L'évolution de la fraction volumique de porosité au cours du temps est déterminée grâce à la résolution de l'équation d'advection. La méthode de résolution est présentée dans la section ci-dessous.

IV.2.4.2 Méthode numérique et schéma de calcul utilisés pour résoudre l'équation d'advection

La résolution en temps de l'équation d'advection est réalisée grâce aux formules d'Euler. Le temps est discrétisé suivant l'approximation établie ci-dessous :

$$(x, y, t) = (x, y, i\Delta t) \quad \text{pour } i \geq 0 \quad (\text{IV-10})$$

où Δt correspond à l'incrément temporel et i au pas de temps. L'approximation temporelle suivante est donc supposée : $p^i(x, y) \approx p(x, y, t)$.

La dérivée temporelle est remplacée en utilisant les formules de Taylor et en utilisant un schéma d'Euler explicite grâce à la discrétisation définie au-dessus :

$$\frac{(p^{i+1}-p^i)}{\Delta t} = \text{div}(\vec{v}_p^i p^i) \quad (\text{IV-11})$$

La discrétisation spatiale est donnée par le maillage éléments finis 2D dans un repère cartésien (x, y) (voir équation ci-dessous). Chaque point de l'espace est donc représenté par des nœuds dont le nombre dépend du raffinement de maillage choisi.

$$(x_j, y_k, t_i) = (j\Delta x, k\Delta y, i\Delta t) \quad \text{pour } i \geq 0, j \in \{1, \dots, N_x\} \text{ et } k \in \{1, \dots, N_y\} \quad (\text{IV-12})$$

tel que :
$$\begin{cases} \Delta x = \frac{1}{N_x} \\ \Delta y = \frac{1}{N_y} \end{cases}$$

où N_x et N_y correspondent respectivement aux nombre de nœud sur l'axe y et sur l'axe x.

L'approximation spatiale suivante est donc faite : $p_{j,k}^i \approx p(x, y, t)$. Le schéma explicite proposé est stable si le pas de temps respecte la condition suivante :

$$\Delta t \leq \frac{\min(\Delta x, \Delta y)}{\max(|\vec{v}_p|)} \quad (\text{IV-13})$$

où $\min(\Delta x, \Delta y)$ est l'incrément spatial le plus petit du maillage et $\max(|\vec{v}_p|)$ la valeur maximale du champ de vitesse de migration des pores. Concernant le calcul de la divergence $\text{div}(\vec{v}_p p)$, en développant son expression (voir équation (IV-14)), on peut faire apparaître les dérivées partielles qui peuvent être directement calculées sur Cast3m par l'approche élément finis grâce au calcul du gradient :

$$\text{div}(\vec{v}_p p) = p \left(\frac{\partial v_{p_x}}{\partial x} + \frac{\partial v_{p_y}}{\partial y} \right) + v_{p_x} \frac{\partial p}{\partial x} + v_{p_y} \frac{\partial p}{\partial y} \quad (\text{IV-14})$$

$$\text{tel que, } \begin{cases} \frac{\partial (v_{p_x} p)}{\partial x} = \overrightarrow{\text{grad}}(v_{p_x}, p) \cdot \vec{e}_x \\ \frac{\partial (v_{p_y} p)}{\partial y} = \overrightarrow{\text{grad}}(v_{p_y}, p) \cdot \vec{e}_y \end{cases}$$

La fraction volumique de porosité p et le champ de vitesse v sont des champs par point, les valeurs sont donc données sur chaque nœud du maillage éléments finis. Le calcul du gradient dans Cast3m permet d'obtenir la valeur des dérivées partielles de p ou v au point de Gauss (voir équation ci-dessus). Pour réaliser le produit des champs par point (p, v) avec les champs par élément $\left(\frac{\partial(v_{x_i}, p)}{\partial x_i}\right)$, une interpolation numérique est réalisée permettant d'évaluer les dérivées partielles $\left(\frac{\partial(v_{x_i}, p)}{\partial x_i}\right)$ aux nœuds. Le terme $div(\vec{v}_p p)$ peut donc être évalué sur chaque nœud du maillage éléments finis, à chaque pas de temps, en mettant à jour la valeur de la fraction volumique de porosité calculé au pas de temps précédent.

Toutefois, la résolution de cette équation peut aboutir à des résultats qui ne sont pas physiques. En effet, l'équation d'advection ne permet pas d'empêcher la fraction volumique de porosité de dépasser 1 sur un nœud, ou d'être négative. Afin d'éviter ces problèmes d'ordre physique, des conditions appropriées sont rajoutées. Ces conditions peuvent différer en fonction du problème résolu (cas sans fissure ou avec).

Cas avec fissure droite :

-Dans la fissure

$$\left\{ \begin{array}{l} (1) \quad Si \ p_{j,k}^i \geq 1 \text{ et } div(\vec{v}_p^i p^i)_{j,k} < 0 \\ (2) \quad Si \ p_{j,k}^i \leq p_{min} \text{ et } div(\vec{v}_p^i p^i)_{j,k} > 0 \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} div(\vec{v}_p^i p^i)_{j,k} = 0 \\ (\vec{v}_p^i)_{j,k} = 0 \end{array} \right. \quad (IV-15)$$

où p_{min} correspond à la fraction volumique de porosité minimale atteinte dans le combustible, que nous avons fixé à 0.2% (voir équation (IV-6)), $(\vec{v}_p^i)_{j,k}$ est le champ de vitesse associé aux nœuds des éléments s'appuyant sur les nœuds où l'un des critères (1) ou (2) (équation (IV-15)) est atteint.

-Dans le combustible

$$\left\{ \begin{array}{l} (3) \text{ Si } p_{j,k}^i \geq 1 \text{ et } \operatorname{div}(\vec{v}_p^i p^i)_{j,k} < 0 \\ (4) \text{ Si } p_{j,k}^i \leq 0 \text{ et } \operatorname{div}(\vec{v}_p^i p^i)_{j,k} > 0 \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \operatorname{div}(\vec{v}_p^i p^i)_{j,k} = 0 \\ (\vec{v}_p^i)_{j,k} = 0 \end{array} \right. \quad (\text{IV-16})$$

Cas sans fissure :

La fraction volumique de porosité initiale étant différente de zéro, on considère de nouveau que la porosité minimale possible dans le combustible est de 0.2%. Nous appliquons ainsi les conditions suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} (3) \quad \text{Si } p_{j,k}^i \geq 1 \text{ et } \operatorname{div}(\vec{v}_p^i p^i)_{j,k} < 0 \\ (5) \text{ Si } p_{j,k}^i \leq p_{min} \text{ et } \operatorname{div}(\vec{v}_p^i p^i)_{j,k} > 0 \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \operatorname{div}(\vec{v}_p^i p^i)_{j,k} = 0 \\ (\vec{v}_p^i)_{j,k} = 0 \end{array} \right. \quad (\text{IV-17})$$

Un effort de modélisation devra être fourni afin de modifier l'équation d'advection pour qu'on ne puisse jamais obtenir une porosité supérieure à 1 et inférieure à 0.

En résolvant le schéma de calcul présenté sur la Figure IV-19, et en utilisant la méthode numérique présentée ci-dessus, la fraction volumique de porosité peut être évaluée en chaque nœud et au cours du temps.

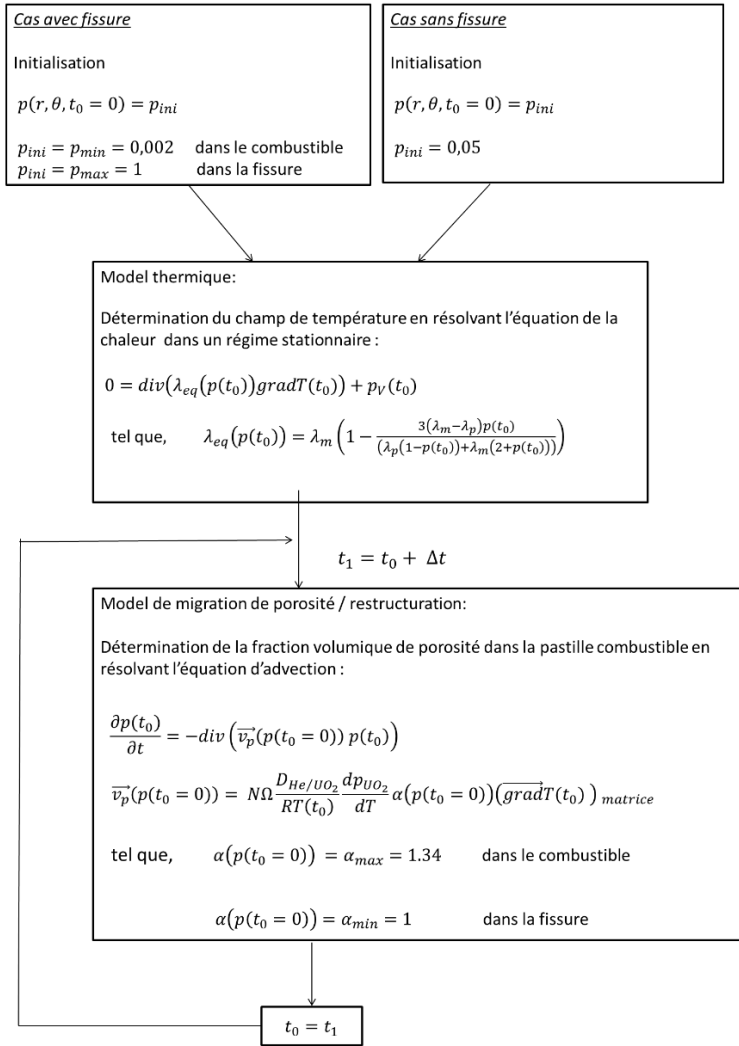


Figure IV-19 : Schéma de calcul du couplage simplifié des équations de la thermique et de transport

IV.2.4.3 Résultat pour le cas sans fissure

Dans le cas sans fissure, la composante verticale de la vitesse est nulle, ce qui simplifie le calcul éléments finis de la divergence $\text{div}(\vec{v}_p p)$ comme suit :

$$\text{div}(\vec{v}_p p) = p \left(\frac{\partial v_{p_x}}{\partial x} \right) + v_{p_x} \frac{\partial p}{\partial x} \tag{IV-18}$$

$$\text{tel que, } \begin{cases} (3) & \text{Si } p_{j,k}^i \geq 1 \text{ et } \text{div}(\vec{v}_p^i p^i)_{j,k} < 0 \\ (5) & \text{Si } p_{j,k}^i \leq p_{min} \text{ et } \text{div}(\vec{v}_p^i p^i)_{j,k} > 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \text{div}(\vec{v}_p^i p^i)_{j,k} = 0 \\ (\vec{v}_p^i)_{j,k}^E \end{cases}$$

En résolvant l'équation (IV-18), nous avons obtenu les résultats illustrés sur la figure suivante :

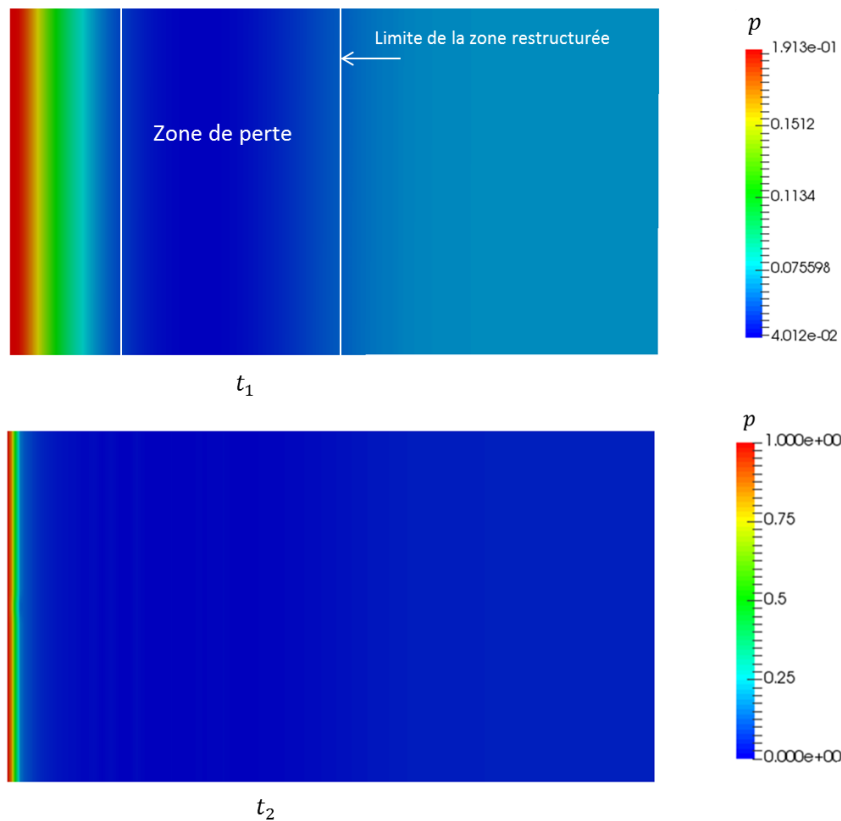


Figure IV-20 : Évolution de la fraction volumique de porosité au cours du temps dans le cas sans fissure

L'instant t_1 met en évidence l'évolution de la fraction de porosité pilotée par le gradient de température horizontale dans le combustible. Nous remarquons que la fraction volumique de porosité augmente proche du centre du combustible. Les zones qui émettent des pores, perdent quant à eux en porosité (voir « zone de perte » $p < 5\%$ à l'instant t_1 de la figure ci-dessous). Cette figure permet aussi de mettre en évidence la zone de restructuration, en effet, à partir d'un certain rayon la fraction volumique de porosité n'évolue pas ($p = 5\%$).

L'instant t_2 illustre « la formation du trou central ». Les nœuds appartenant aux éléments de la première colonne du maillage atteignent une fraction volumique de porosité de 1. Au-delà de cet instant, le trou ne s'agrandit plus. Les nœuds se trouvant à proximité du trou atteignent une fraction volumique de porosité qui se rapproche de 1 sans jamais l'atteindre. À partir de l'instant t_2 , le schéma de calcul devient instable et la conservation de fraction volumique de porosité dans le combustible n'est plus respectée.

Nous avons pu toutefois quantifier le volume total de pores qui a migré vers le centre jusqu'à l'instant t_2 . Ce résultat est illustré sur le graphe de la figure ci-dessous. Au total, un volume

libre d'environ $1.74e - 11 \text{ m}^3$ a migré vers le centre, ce qui correspond à 0.72% du volume total du combustible.

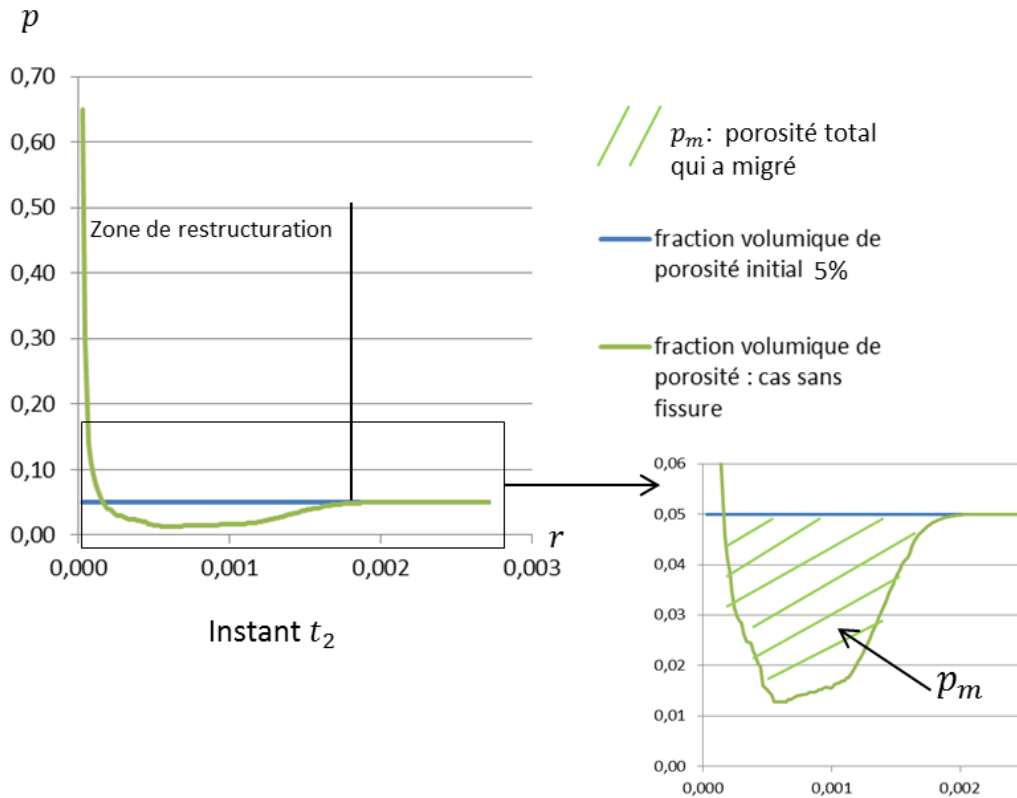


Figure IV-21 : Évolution de la fraction volumique de porosité sur chaque colonne du maillage combustible dans le cas sans fissure

IV.2.4.4 Résultat pour le cas avec une fissure droite

Comme l'illustrent les images de la Figure IV-22, l'évolution de la fraction volumique de porosité dans la fissure et autour de celle-ci a pu être suivie à travers le temps. Trois instants ont été choisis pour illustrer le mouvement des pores menant à la guérison partielle de la fissure :

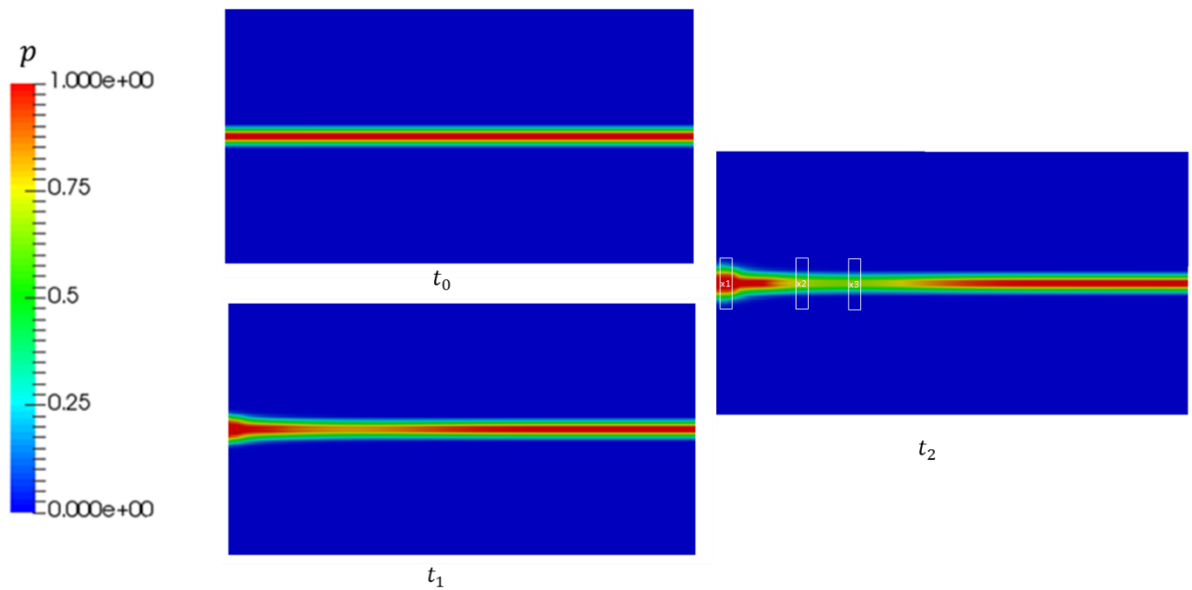


Figure IV-22 : Évolution de la fraction volumique de porosité au cours du temps dans le combustible de géométrie carré sans fissure

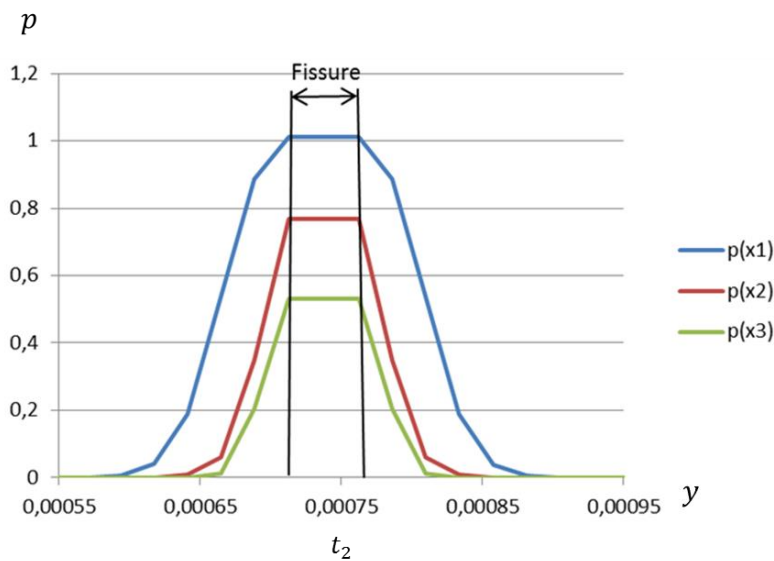


Figure IV-23 : Évolution de la fraction volumique de porosité le long de l'axe vertical sur trois zones données à l'instant t_2 : x_1 – centre de la pastille, x_2 – zone de densification moyenne de la fissure, x_3 – zone de densification maximale de la fissure

L'instant t_0 , correspond à l'état initial, la fraction volumique de porosité est nulle dans le combustible et vaut 1 dans la fissure.

À l'instant t_1 , nous pouvons constater que la fraction volumique de porosité a diminué dans la fissure au niveau de la zone de restructuration. À l'instant t_2 , les pores continuent de migrer vers le combustible puis vers le centre pour former un début de « trou », menant ainsi à une densification partielle de la fissure. En effet, les pores issus de la fissure ont migré à travers le combustible puis vers le centre, ce qui explique l'augmentation de la fraction volumique de

porosité au centre du combustible, autour de la fissure. Pour illustrer nos propos, nous avons évalué la fraction volumique de porosité en fonction de l'axe vertical sur trois zones de la pastille combustible à l'instant t_2 :

- x1 : zone centrale
- x2 : zone où la fissure a commencé à densifier
- x3 : zone où la fissure a densifié à moitié

Ces trois zones étant illustrées sur la Figure IV-22 à l'instant t_2 . Les évolutions données par la Figure IV-23, permettent en effet de conclure que les pores dans la fissure migrent vers le combustible, tout en restant à proximité de la fissure, puis vers le centre de la pastille. Ce qui explique que la fraction volumique de porosité est supérieure dans la zone située au centre de la pastille, que cela soit dans la fissure ou à proximité.

Comme dans le cas sans fissure, à partir de l'instant t_2 le calcul devient instable. Malgré une densification continue de la fissure, la fraction volumique n'augmente pas suffisamment au centre, par conséquent la conservation de la fraction volumique de porosité dans la pastille n'est plus vérifiée. Nous avons également pu quantifier le volume total de pores qui a migré vers le centre jusqu'à l'instant t_2 pour le cas avec fissure. Ce résultat est illustré sur le graphe de la figure ci-dessous. Au total, un volume libre d'environ $1.02e - 11 m^3$ a migré vers le centre, ce qui correspond à 0.42% du volume total du combustible.

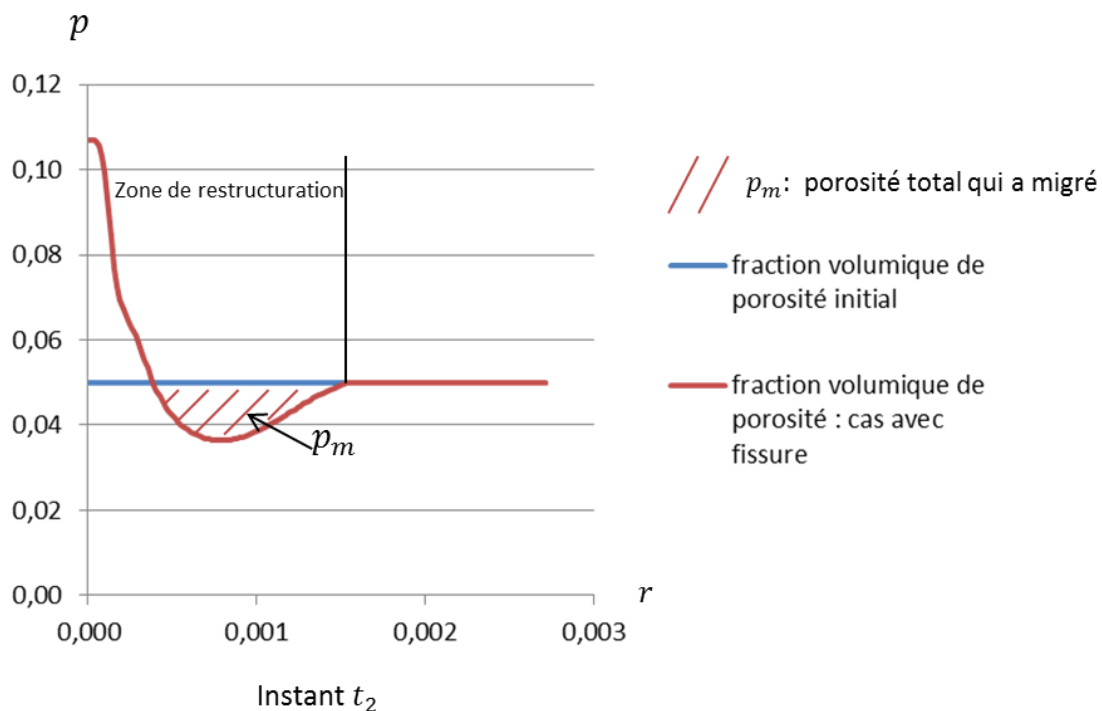


Figure IV-24 : Évolution horizontale de la fraction volumique de porosité sur chaque colonne du maillage combustible dans le cas avec fissure

Pour une même durée de temps, le volume total de pore migrant vers le centre dans le cas avec fissure est comparable au cas sans fissure en étant toutefois inférieur ($1.02e - 11$ et $1.74e - 11$). Ces résultats restent toutefois qualitatifs et nécessitent d'être améliorés avant de pouvoir en déduire une loi de vitesse spécifique pour les porosités issues des fissures.

Le modèle simplifié proposé à la section IV.2.4.1 a donc permis de représenter le phénomène de guérison des fissures, bien que la résolution actuelle ne permette pas d'observer une densification totale de la fissure dans la zone de restructuration et d'obtenir une taille de trou conséquente. Elle a permis toutefois d'identifier le comportement des pores dans la fissure. En effet, les résultats de la simulation numérique (voir Figure IV-22) ont montré que les pores présents dans la fissure, migrent d'abord dans le milieu combustible avant de rejoindre le centre de la pastille. De plus, nos travaux ont permis de montrer que la vitesse moyenne de migration de ces pores « permettant de caractériser le temps de formation de trou », était du même ordre que ceux de fabrication.

IV.2.5 Perspectives

IV.2.5.1 Couplage complet des équations Thermique-Advection sur une pastille cylindrique

Une fois que les problèmes de stabilité rencontrés seront résolus, l'objectif sera de résoudre le couplage complet des équations de la thermique et de transport décrit par les équations successives (IV-19) et (IV-20) dans le cas d'une fissure droite et perturbée. La résolution de ce couplage permettra d'avoir encore plus de précision sur le phénomène de guérison des fissures induit par une migration des pores issus de celle-ci. Nous pourrons ainsi déduire une vitesse moyenne de migration des pores issus des fissures et l'implémenter dans le code GERMINAL afin d'améliorer l'actuel modèle de restructuration. Ainsi, deux équations d'advections devront être résolues, une permettant de décrire le mouvement des pores de fabrication et l'autre des pores issus des fissures.

IV.2.5.2 Equations de couplage et schéma de calcul numérique

En utilisant les hypothèses du modèle 2D macroscopique (voir section IV.2.1) et les résultats des modèles décrits dans les sections précédentes (IV.2.2 et IV.2.3), le problème couplé à résoudre est le suivant :

Couplage équations de la chaleur – advection :

Equation de la chaleur :

$$\rho_{eq}(p)C_{p_{eq}}(p)\frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}(\lambda_{eq}(p)\text{grad}T) + p_V \quad (\text{IV-19})$$

$$\lambda_{eq}(p) = \lambda_m \left(1 - \frac{3(\lambda_m - \lambda_p)p}{(\lambda_p(1-p) + \lambda_m(2+p))} \right)$$

tel que, $\rho_{eq}(p) = (1-p)\rho_{UO_2} + \rho_{He}p$

$$C_{p_{eq}}(p) = (1-p)C_{p_{UO_2}} + C_{p_{He}}p$$

Equation d'advection :

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\text{div}(\vec{v}_p(p)p)$$

$$\vec{v}_p = N\Omega \frac{D_{He/UO_2}}{RT(\lambda_{eq}(p))} \frac{dp_{UO_2}}{dT} \alpha(p) \left(\overrightarrow{\text{grad}T}(\lambda_{eq}(p)) \right)_{matrice} \quad (\text{IV-20})$$

$$\alpha(p) = \alpha_{max} \quad \text{si} \quad 0.002 \leq p \leq 0.05$$

tel que, $\alpha(p) = a_1p + b_1 \quad \text{si} \quad 0.05 < p \leq 0.50$

$$\alpha(p) = \alpha_{min} \quad \text{si} \quad 0.50 < p \leq 1$$

Comme l'illustre le schéma de calcul de la Figure IV-25, tout d'abord le modèle thermique est résolu en déterminant les paramètres nécessaires à la résolution du modèle, à savoir λ_{eq} , ρ_{eq} et C_{eq} . Ces trois paramètres dépendent de la fraction volumique de porosité de la pastille combustible qui est tout d'abord initialisée. Lorsque l'équation de la chaleur est résolue, la vitesse moyenne de migration des pores peut être déterminée et l'équation d'advection résolue.

L'évolution de la fraction volumique de porosité peut être ainsi déterminée à chaque pas de temps, et le chemin des pores autour de la fissure connus.

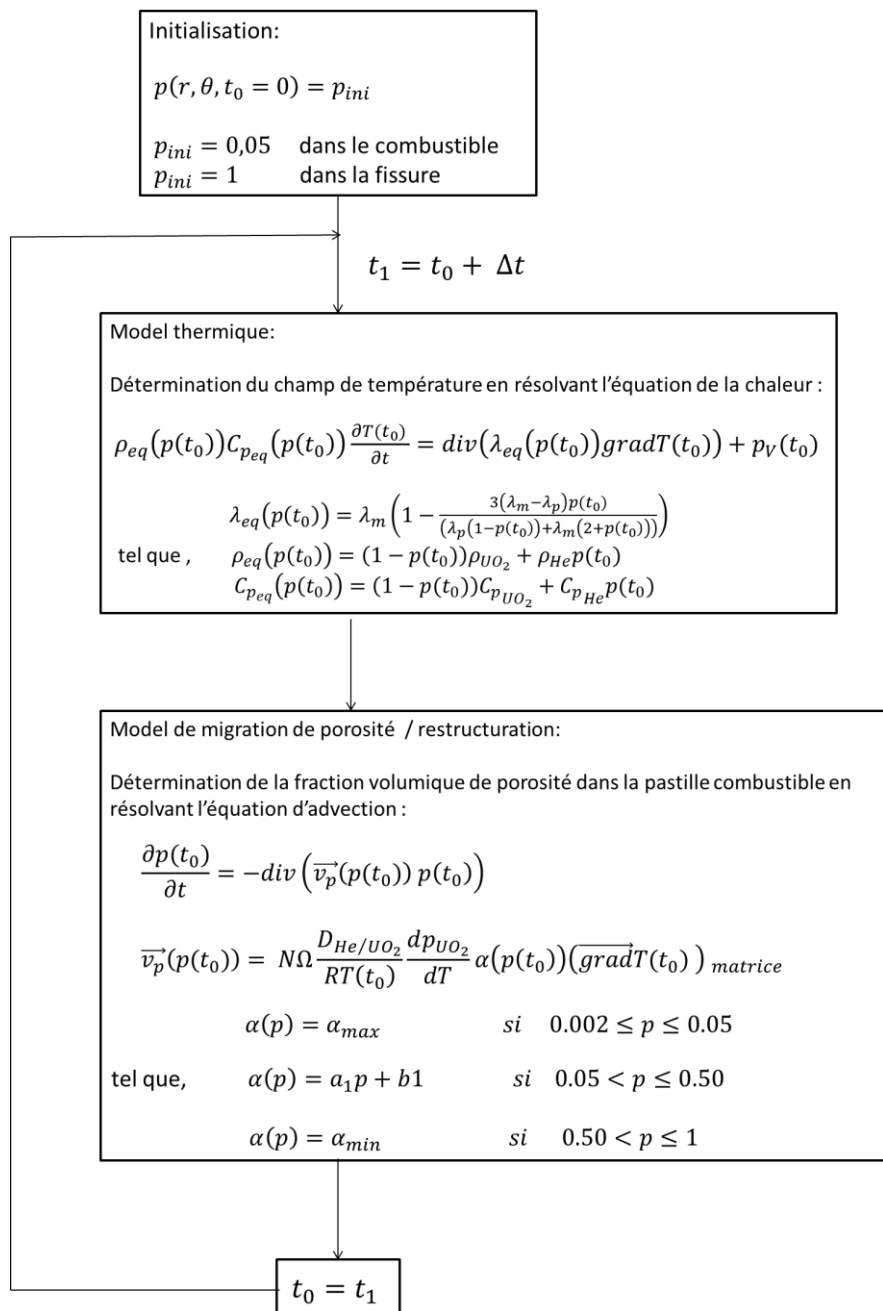


Figure IV-25 : Schéma de calcul du couplage des équations de la thermique et de transport

Par manque de temps et à cause des problèmes observés sur le modèle simplifié, le couplage complet thermique-advection n'a donc pas pu être résolu dans le cadre de cette thèse. Une autre méthode numérique et/ou un autre logiciel pourrait être susceptible d'être utilisé dans le futur.

IV.2.5.3 Modèle micromécanique

Dans notre étude, seul le transfert de matière par migration de porosité a été étudié. La migration de matière par diffusion directement au travers de la fissure n'a pas été envisagée. Afin de traiter cette migration, il est nécessaire de refaire la modélisation micro-mécanique proposée par Sens [Sens 72], pour une configuration de porosité allongée représentative du volume libre associé aux fissures (voir figure a)). L'objectif étant de savoir si le débit de porosité est comparable au cas où l'on considère uniquement des pores de fabrication initialement présente dans le combustible (voir cas b)).

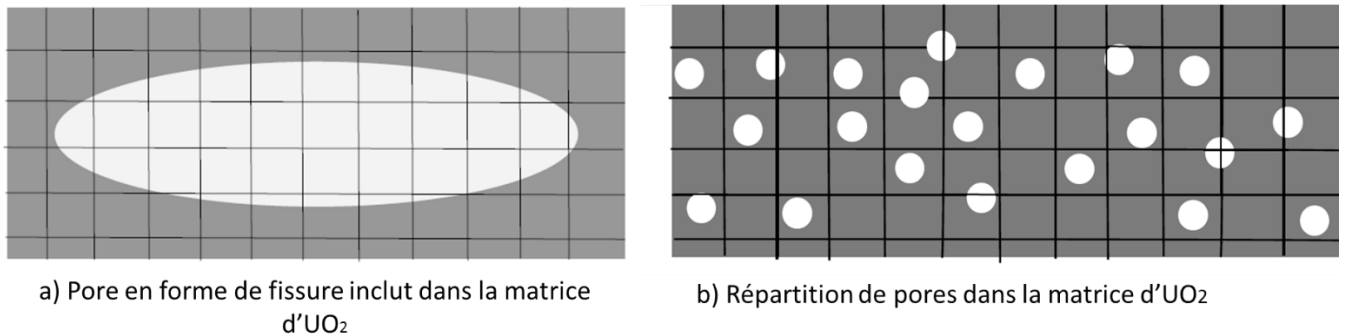


Figure IV-26: Représentation microscopique d'une matrice d'UO₂ avec une inclusion représentant « la fissure » a) et une matrice d'UO₂ contenant plusieurs pores représentant les porosités de fabrication b).

BILAN DU CHAPITRE IV

Un modèle 2D macroscopique permettant de coupler les équations de la thermique et de transport a été proposé pour essayer de comprendre comment les fissures présentes dans le combustible guérissent partiellement durant l'irradiation. Ce modèle représente deux fragments de pastille combustible de part et d'autre d'une fissure. Durant notre étude des fissures droite et perturbée ont été considérées.

Pour résoudre le couplage des équations de la thermique et de transport, des calculs d'homogénéisation ont été nécessaires pour évaluer la conductivité thermique et le coefficient α (impact du pore sur le gradient de température) en fonction de la fraction volumique de porosité dans le combustible. En ce qui concerne la conductivité thermique, la formule développée par Maxwell-Eucken a été utilisée. Concernant le coefficient α , un modèle 3D microscopique a été réalisé permettant d'évaluer l'impact de la taille d'un pore sphérique inclus dans une matrice cubique d' UO_2 , sur l'évolution du gradient de température.

Les résultats obtenus pour ce dernier diffèrent de ceux de Sens du fait des simplifications géométriques 2D réalisées par ce dernier.

Une fois les deux paramètres homogénéisés déterminés, une étude thermique a permis de mettre en évidence l'impact de la fissure (droite et perturbée) sur l'évolution de la vitesse radiale et circonférentielle de migration des pores dans le combustible. La composante circonférentielle du champ de vitesse a permis d'expliquer qualitativement un processus de nucléation des pores issus de la fissure vers le milieu combustible, permettant une guérison de la fissure par densification. Afin d'obtenir plus d'information, une première étude quantitative simplifiée sur une pastille de géométrie rectangulaire, permettant avant tout d'intégrer l'équation d'advection pour une distribution de température fixée, a été proposée. Deux configurations ont été envisagées : la première correspondant à une pastille sans fissure composée d'une répartition homogène de pores se basant ainsi sur les mêmes hypothèses 1D du modèle de migration des pores de GERMINAL (voir chapitre III). La seconde, à une pastille avec une fissure droite, ne comportant aucun pores dans le milieu combustible. Les résultats de la simulation ont montré que pour une même durée de temps, le volume total de pore migrant vers le centre est du même ordre dans les deux configurations, ce qui suggère que la vitesse moyenne de migration des pores issus des deux milieux est du même ordre également. L'hypothèse considérant que le processus d'émissions de pores issus des fissures dans le

combustible est court semble donc admissible moyennant peut être une loi de vitesse modifiée pour une population de pore issus des fissures.

Ces résultats restent toutefois approximatifs du fait des hypothèses établies dans notre modèle 2D et des problèmes numériques rencontrés.

CONCLUSION GÉNÉRALE ET PERSPECTIVES

Ce mémoire examine le comportement du jeu combustible-gaine de l'aiguille combustible nucléaire, en vue de modéliser le comportement thermique de ces aiguilles en réacteur dans des conditions nominales en lien avec la vérification d'un critère de non fusion du combustible. D'après les interprétations des programmes d'irradiation expérimentaux, l'évolution de la taille du jeu combustible gaine semble avoir, avec les propriétés thermiques du combustible, un impact du premier ordre sur l'évolution de la température. Durant cette étude nous sommes donc intéressés aux phénomènes responsables du rattrapage de jeu combustible-gaine. L'étude bibliographique réalisée a permis de décrire le contexte de l'étude, le comportement de l'aiguille combustible irradiée dans les RNR-Na et les codes de calculs actuels qui permettent de le simuler. Les aspects physiques associés à la description du phénomène de restructuration du combustible et du rattrapage du jeu pastille-gaine ont été détaillés ainsi que les modèles actuellement développés dans les codes de calculs RNR "1D½" permettant de simuler ces phénomènes. L'état de l'art met également en évidence les difficultés liées à la représentation de l'ensemble des phénomènes responsables du rattrapage du jeu de manière physique en raison des simplifications géométriques 1D utilisées par les codes de calculs RNR "1D½" et de la méconnaissance de certains mécanismes. Compte tenu de ces limites les outils de calculs actuels, dont le code GERMINAL, utilisent une modélisation empirique appelée délocalisation, basée sur une formulation ajustée sur des mesures expérimentales post-irradiation. Les temps de calcul des outils de simulation 3D ne permettent pas encore l'utilisation d'une modélisation 3D des aiguilles combustibles RNR-Na compatible avec les exigences d'études industrielles. La stratégie actuelle consiste à comprendre les phénomènes avec une approche 3D puis à transposer les mécanismes identifiés dans des modèles 1D plus prédictifs.

L'objectif de notre étude a été d'améliorer notre compréhension des phénomènes responsables du rattrapage de jeu pastille-gaine, et de proposer un modèle 1D à base physique en vue de remplacer le modèle de délocalisation empirique actuel de GERMINAL.

L'analyse des observations micrographiques réalisées sur des examens en post irradiation a permis de mettre évidence que le transfert de masse induit par la restructuration du combustible pouvait avoir un rôle important parmi les phénomènes responsables du rattrapage de jeu. Un

mécanisme a été proposé pour décrire ce phénomène et son impact sur la délocalisation des fragments de pastille. Une simulation 3D a été réalisée pour quantifier la contribution de l'ensemble des phénomènes responsables de la fermeture du jeu. Ce modèle 3D a pu être réalisé grâce un chainage entre le code de calcul RNR "1D½" GERMINAL et l'application 3D LICOS de la plateforme PLEIADES. La comparaison des rayons de la zone à grains colonnaires (sensiblement liée aux valeurs de températures, non mesurables in situ) entre la simulation 3D et les mesures expérimentales réalisées sur des pastilles annulaires et pleines ont montré que le transfert de masse et la fragmentation du combustible étaient indispensables pour obtenir un bon accord calculs-mesures.

Un nouveau modèle de délocalisation basé sur une formulation physique des deux phénomènes identifiés, a pu être proposé. La contribution de la fragmentation du combustible est obtenue grâce à une formulation analytique basée sur la différence de déplacement obtenue entre une pastille fragmentée et une pastille non-fragmentée soumises à un gradient de température. La contribution du transfert de masse est obtenue en considérant l'expansion volumique de la zone de restructuration induite par la migration de la porosité de remplissage. Ces deux contributions sont exprimées sous forme d'une déformation de délocalisation homogène implémentée dans la loi de comportement mécanique. Les comparaisons effectuées entre les nouveaux résultats numériques et les mesures post-irradiation des rayons du trou central et de la zone restructurée sont très satisfaisantes. Ces résultats sont en bon accord avec les résultats expérimentaux et on peut maintenant justifier le sens physique des paramètres, ce qui n'était pas possible avec le modèle empirique précédent.

Des travaux complémentaires ont été réalisés afin d'obtenir une compréhension détaillée du processus migration des pores issus des fissures. Ce dernier étant considéré identique aux processus d'évaporation-condensation des pores de fabrication dans notre modélisation 1D.

Afin de vérifier cette dernière hypothèse, une étude 2D macroscopique permettant de résoudre les équations de thermique et de transport a pu être réalisée sur un domaine de géométrie rectangulaire. Deux configurations ont été envisagées : la première correspondant à une pastille sans fissure composée d'une répartition homogène de pores se basant ainsi sur les mêmes hypothèses que celles utilisées dans l'approche 1D du modèle de migration des pores de GERMINAL. La seconde, représente une pastille sans pores de fabrication mais avec une fissure droite. Les résultats de la simulation ont montré que pour une durée donnée, le volume total de pore migrant vers le centre est du même ordre dans les deux configurations, ce qui suggère que la vitesse moyenne de migration des pores issus des deux milieux est comparable. L'hypothèse utilisée dans notre nouveau modèle 1D semble donc admissible en première

approximation. Ces résultats restent toutefois approximatifs du fait des hypothèses établies dans notre modèle 2D et des problèmes numériques rencontrés.

En perspective, des travaux sont proposés pour améliorer notre nouveau modèle de délocalisation, notamment dans les zones de l'aiguille combustible fonctionnant à faible puissance. En effet, nous avons constaté que les rayons de la zone à grains colonnaires et du trou central sont surestimés en bas et en haut de l'aiguille combustible, lorsque la température du combustible est plus basse en raison du profil de puissance. Afin d'étendre la validité et la précision de notre modélisation, quelques pistes ont été proposées. Pour améliorer la description physique du phénomène de fermeture du jeu pastille-gaine, nous pouvons pris en compte l'effet de la forme en diabolo qui différencie le plan médian pastille et le plan inter pastille. Cette amélioration passera par la définition d'un plan équivalent permettant d'évaluer l'échange thermique en moyenne sur la hauteur de la pastille.

Il faudrait également considérer l'impact du gonflement gazeux qui n'est pas modélisé actuellement dans GERMINAL. En effet, aux extrémités de l'aiguille, où le régime de puissance est plus faible, le relâchement gazeux est réduit et l'amplitude du gonflement peut devenir significative. Dans un dernier temps, il faudrait améliorer les lois matériaux du combustible, notamment en prenant en compte la modification de la microstructure du combustible engendrée par la migration des pores lenticulaires dans la zone de restructuration. D'autres perspectives peuvent également être proposées pour améliorer le calcul de la vitesse de migration de la porosité liée aux fissures. Les perspectives envisagées concernent dans un premier temps la modélisation macroscopique 2D proposée. Pour cette dernière, il faudrait résoudre les problèmes numériques rencontrés afin d'avoir une solution sur des temps de simulation plus longs. La solution envisageable est de réviser la condition CFL afin d'éliminer les oscillations spatiales obtenues lorsque la porosité était égale à 1 sur une fraction significative du domaine 2D. Si cette révision n'est pas suffisante, il faudra vraisemblablement reformuler l'équation d'advection et certainement le couplage avec la thermique, pour que la valeur maximale de la porosité égale à 1 dérive naturellement de l'expression mathématique et non pas d'une contrainte externe comme cela a été réalisé.

L'expression de la vitesse utilisée pour la migration des porosités issues des fissures dans notre modèle macroscopique, repose sur une analyse stationnaire de l'évaporation-condensation dans une porosité sphérique. Une justification de cette hypothèse paraît nécessaire pour pouvoir valider et compléter les résultats de l'analyse macroscopique. Cette justification passe par une description de type microscopique du transfert de masse en phase vapeur, afin d'obtenir une représentation réaliste de la forme des porosités de remplissage lors de la migration. Il faudra

alors résoudre l'équation de diffusion des atomes lourds en phase vapeur dans l'hélium, avec une réactualisation de la position des surfaces libres pour suivre l'évolution de la forme des porosités, à l'aide d'une méthode de suivi des interfaces. Cette modélisation microscopique permettra notamment d'analyser finement le mécanisme de transport, pour vérifier si la migration de porosité se fait par transfert le long des surfaces libres ou nucléation de volume libre dans le solide au voisinage de la fissure.

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [AEN 08] AEN, “Perspectives de l’énergie Nucléaire 2008 - Fr - OCDE.”
- [Assmann 77] H. Assmann and R. Manzel. “The Matrix Swelling Rate of UO₂.” *Journal of Nuclear Materials* 68, no. 3 (November 1, 1977): 360–64.
- [Franklin 94] D. G. Franklin, J. T. A. Roberts, and Li Che-Yu. “Low Temperature Swelling and Densification Properties of LWR Fuels.” *Journal of Nuclear Materials* 125, no. 1 (June 1, 1984): 96–103.
- [Bailly 96] Bailly, Henri, Denise Ménessier, and Claude Prunier. “Le combustible nucléaire des réacteurs à eau sous pression et des réacteurs à neutrons rapides: conception et comportement”. Paris: Eyrolles, 1996.
- [Bain 63] A.S. Bain “Cracking and bulk movement in irradiated uranium oxide fuel elements.” *Trans Am Nucl Soc* 1963.
- [Boldyrev 17] A. Boldyrev, S. Yu. Chernov, A. P. Dolgodvorov, V. D. Ozhin, and V. I. Yarasov “BERKUT – Best estimate code for modelling of Fast Reactor Fuel Rod Behaviour under Normal and Accidental Conditions.” *International Conference on Fast Reactors and Related Fuel Cycles: Next Generation Nuclear Systems for Sustainable Development (FR17)*, PAPER 363 (June 27, 2017).
- [CEA-DEN 14] Commissariat à l’énergie atomique (France), and Direction de l’énergie nucléaire (Gif-sur-Yvette). “Les réacteurs nucléaires à caloporteur sodium.” Paris: Ed. Le Moniteur : CEA : Groupe Imprimerie Nationale-Éditions techniques, 2014.
- [CG4IF 06] Charter of the Generation IV International Forum, November 2006, <http://www.gen4.org/GIF>.
- [Cheon 09] J.S. Cheon, C.B. Lee, B.O. Lee, J.P. Raison, T. Mizuno, F. Delage, J. Carmack, “Sodium fast reactor evaluation: Core materials.” *Journal of Nuclear Materials* 392 (2009) 324–330.
- [Clement 77] C. F. Clement. “The Movement of Lenticular Pores in UO₂ Nuclear Fuel Elements.” *Journal of Nuclear Materials* 68, no. 1 (September 1, 1977): 63–68.

- [Clement 78] C. F. Clement and M. W. Finnis. “The Movement of Lenticular Pores in Mixed Oxide (U, Pu) O₂ Nuclear Fuel Elements.” *Journal of Nuclear Materials* 75, no. 1 (July 1, 1978): 115–24.
- [De Halas 63] D. R. De Halas, and G. R. Horn. “Evolution of Uranium Dioxide Structure during Irradiation of Fuel Rods.” *Journal of Nuclear Materials* 8, no. 2 (March 1, 1963): 207–20.
- [De Halas 67] D. R. De Halas. “The Shape of Migrating Voids.” *Journal of Nuclear Materials* 23, no. 1 (July 1, 1967): 118–20.
- [England 03] A. H. England. “Complex Variable Methods in Elasticity”, Dover Publications, Mineola, New York (2003).
- [Eucken 40] Eucken, A. “Allgemeine Gesetzmäßigkeiten für das Wärmeleitvermögen verschiedener Stoffarten und Aggregatzustände.” *Forschung auf dem Gebiet des Ingenieurwesens A* 11, no. 1 (January 1, 1940): 6–20.
- [Evans 98] Lawrence C. Evans. “Partial Differential Equations, Graduate Studies in Mathematics.” Vol. 19, American Mathematical Society (1998).
- [Fiorina 18] C. Fiorina, A. Pautz and K. Mikityuk. “Creation of an OPENFOAM fuel performance class based on FRED and integration into the GEN-FOAM multi-physics code.” Proceedings of International Conference on Nuclear Engineering ICONE 2018 July 22-26, 2018, London, UK..
- [Gao 17] F. Gao, Q. Chen, L. Wang “The development of a computer code for predicting fast reactor oxide fuel element thermal and mechanical behaviour (FIBER-Oxide).” International Conference on Fast Reactors and Related Fuel Cycles: Next Generation Nuclear Systems for Sustainable Development (FR17), PAPER217 (June 29, 2017).
- [Ghosh 07] S Ghosh., S. Dobbie, J. Marsham, and P. R. Jonas. “On the importance of the diffusional uptake of water vapour for the development and radiative properties of high altitude clouds: a large eddy model sensitivity study.” *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* 133, no. 628 (2007): 1731–41.
- [Guidez 13] J. Guidez , Phénix, Le retour d’expérience, chap.VII : “L’élément combustible”, chap.XII : “ Les irradiations expérimentales et les examens en cellule“, EDP Sciences, 2013.

- [Guerin 12] Y. Guerin. “2.21 - Fuel Performance of Fast Spectrum Oxide Fuel.” In *Comprehensive Nuclear Materials*, edited by Rudy J. M. Konings, 547–78. Oxford: Elsevier, 2012.
- [G4IF 02] U.S. DOE Nuclear Energy Research Advisory Committee and the Generation IV International Forum, “Technology Roadmap Update for Generation IV Nuclear Energy Systems”, Décembre 2002.
- [Helfer 06] T.Helfer. “Etude de l'impact de la fissuration des combustibles nucléaires oxyde sur le comportement normal et incidentel des crayons combustibles.” Thèse, école Central Lyon, 2006.
- [Helfer 15] T. Helfer, S. Bejaoui, and B. Michel. “Licos, a Fuel Performance Code for Innovative Fuel Elements or Experimental Devices Design.” *Nuclear Engineering and Design* 294 (December 1, 2015): 117–36.
- [Hirschfelder 64] Hirschfelder, Joseph Oakland. “Molecular Theory of Gases and Liquids.” with the Assistance of the Staff of the Former University of Wisconsin Naval Research Laboratory: Corrected Printing with Notes Added. Wiley, 1964.
- [Hoffmann 74] H. Hoffmann. “Crack Formation, Crack Healing and Porosity Redistribution during Irradiation of UO₂ and (U, Pu) O₂.” *Journal of Nuclear Materials* 54, no. 1 (November 1, 1974): 9–23.
- [Hofmann 99] P. Hofmann “Current Knowledge on Core Degradation Phenomena, a Review.” *Journal of Nuclear Materials* 270, no. 1 (April 1, 1999): 194–211.
- [Inoue 03] M. Inoue, K.Yamamoto, T. Sekine, M. Osaka, N. Kushida, and T. Asaga. “Power-to-Melts of Uranium–Plutonium Oxide Fuel Pins at a Beginning-of-Life Condition in the Experimental Fast Reactor JOYO.” *Journal of Nuclear Materials* 323, no. 1 (November 15, 2003): 108–22.
- [Jankus 72] V. Z Jankus, and R. W. Weeks “LIFE-II - A Computer Analysis of Fast-Reactor Fuel-Element Behavior as a Function of Reactor Operating History.” *Nuclear Engineering and Design* 18, no. 1 (January 1, 1972): 83–96.
- [Karahan 09] A. Karahan. “Modelling of Thermo-Mechanical and Irradiation Behavior of Metallic and Oxide Fuels for Sodium Fast Reactors.” Thesis, Massachusetts Institute of Technology, 2009
- [Karahan 10] A. Karahan, and J. Buongiorno “Modeling of Thermo-Mechanical and Irradiation Behavior of Mixed Oxide Fuel for Sodium Fast Reactors.” *Journal of Nuclear Materials* 396, no. 2–3 (January 2010): 272–82.

- [Kawamata 77] H. Kawamata, H. Kaneko, H. Furuya, and M. Koizumi. “Migration Rate of Lenticular Voids in UO₂ under the Influence of Temperature Gradient.” *Journal of Nuclear Materials* 68, no. 1 (September 1, 1977): 48–53.
- [Kittel 93] J. Kittel, H. B. R. T Frost, J. P Mustelier, K. Q Bagley, G. C Crittenden, and J Van Dievoet. “History of Fast Reactor Fuel Development.” *Journal of Nuclear Materials* 204 (September 2, 1993): 1–13.
- [Krige 51] D. G. Krige. “A statistical approach to some mine valuations and allied problems at the Witwatersrand”, Master's thesis of the University of Witwatersrand, 1951.
- [Lainet 13] M. Lainet, V. Bouineau, T. Helfer, M. Pelletier, Recent Modelling Improvements in Fuel Performance Code GERMINAL for SFR Oxide Fuel Pins, 2013. IAEA-CN-199/241, FR13, Paris, France.
- [Lainet 17] M. Lainet, B. Michel, J.-C. Dumas, K. Samuelsson, M. Pelletier, Current Status and Progression of GERMINAL Fuel Performance Code for SFR Oxide Fuel Pins, Yekaterinburg, Russia, 2017. IAEA-CN-245/222, FR17.
- [Lainet 19] Lainet, Marc, Bruno Michel, Jean-Christophe Dumas, Michel Pelletier, and Isabelle Ramière. “GERMINAL, a Fuel Performance Code of the PLEIADES Platform to Simulate the in-Pile Behaviour of Mixed Oxide Fuel Pins for Sodium-Cooled Fast Reactors.” *Journal of Nuclear Materials* 516 (April 1, 2019): 30–53.
- [Lambert 92] J. D. B. Lambert, R. Strain, 1992. *Oxide Fuels, Materials Science and Technology*. Wiley-VCH.
- [LRNCS] “Les réacteurs nucléaires à caloporteur sodium - La technologie des RNR-Na.”
- [Maeda 12] K. Maeda. “3.16 - Ceramic Fuel–Cladding Interaction.” In *Comprehensive Nuclear Materials*, edited by Rudy J. M. Konings, 443–83. Oxford: Elsevier, 2012.
- [Marelle 17] V. Marelle. “Validation of PLEIADES/ALCYONE 2.0 fuel performance code”, Proc. of Water Reactor Fuel Performance Meeting/TopFuel Conference, Jeju Island, Korea (2017).
- [Matheron 63] G. Matheron,. “Principles of Geostatistics.” *Economic Geology* 58, no. 8 (December 1, 1963): 1246–66.

- [MATPRO 01] SCDAP/RELAP5/MOD3.3 Code Manual - MATPRO-A Library of Materials Properties for Light-Water-Reactor Accident Analysis, NUREG/CR-6150, Vol.4, Rev.2, 2001.
- [Matthews 80] R. Matthews, Jand M. H. Wood. "A Simple Operational Gas Release and Swelling Model: II. Grain Boundary Gas." *Journal of Nuclear Materials* 91, no. 2 (July 1, 1980): 241–56.
- [Matthews 87] J. R. Matthews, R. F. Cameron, P. E. Coleman, and R. Thetford "The Application of the TRAFIC Code to Fast Reactor Fuel Transients." *Science and Technology of Fast Reactor Safety*. Vol. 2, 1987.
- [Michel 13] B. Michel, C. Nonon, J. Sercombe, F. Michel, and V. Marelle, 'Simulation of Pellet-Cladding Interaction with the PLEIADES Fuel Performance Software Environment', *Nuclear Technology*, vol. 182, no. 2, pp. 124–137, May 2013.
- [Michel 17] B. Michel, M. Temmar, M. Lainet, I. Ramière, M. Pelletier, JC. Dumas. 3D simulation in the PLEIADES software environment for sodium fast reactor fuel pin behavior under irradiation, *Fast Reactor FR17 Yekaterinburg Russie*, june 26-29,2017.
- [Muskhelishvili 63] N. I. Muskhelishvili "Some basic problems of the mathematical theory of elasticity", 4ème edition, P. Noordhoff, Groningen-The Netherlands (1963).
- [Neufeld 72] Philip D Neufeld, A. R. Janzen, and R. A. Aziz. "Empirical Equations to Calculate 16 of the Transport Collision Integrals $\Omega(l, s)^*$ for the Lennard-Jones (12–6) Potential." *The Journal of Chemical Physics* 57, no. 3 (August 1, 1972): 1100–1102.
- [Nichols 67] F. A. Nichols, "Theory of Columnar Grain Growth and Central Void Formation in Oxide Fuel Rods." *Journal of Nuclear Materials* 22, no. 2 (May 1, 1967): 214–22.
- [Nichols 68] F. A. Nichols. "Pore Migration in Ceramic Fuel Elements." *Journal of Nuclear Materials* 27, no. 2 (August 1, 1968): 137–46.
- [Nichols 69 J] F. A. Nichols. "Movement of Pores in Solids." *JOM* 21, no. 1 (January 1, 1969): 19–27.
- [Nichols 69 A] F. A. Nichols. "Kinetics of Diffusional Motion of Pores in Solids: A Review." *Journal of Nuclear Materials* 30, no. 1 (April 1, 1969): 143–65.

- [Novascone 18] S. Novascone, P. Medvedev, John W. Peterson, Y. Zhang, and J. Hales. “Modeling Porosity Migration in LWR and Fast Reactor MOX Fuel Using the Finite Element Method.” *Journal of Nuclear Materials* 508 (September 1, 2018): 226–36.
- [Olander 76] Olander, D.R. Fundamental aspects of nuclear reactor fuel elements: solutions to problems. United States. 1976.
- [Oldfield 69] Oldfield, William, and Alan J. Markworth. “The Theory of Bubble Migration Applied to Irradiated Materials.” *Materials Science and Engineering* 4, no. 6 (September 1, 1969): 353–66.
- [Ozawa 06] T. Ozawa, and T. Abe. “Development and Verifications of Fast Reactor Fuel Design Code CEPTAR.” *Nuclear Technology* 156, no. 1 (October 2006): 39–55.
- [Pelletier 07] M. Pelletier, “Quel combustible pour les RNR-Na ? ”, Clefs CEA, n°55, p. 32 – 37, été 2007.
- [Pelletier 08] M. Pelletier. “Comportement En Réacteur de L’aiguille Combustible Oxyde Mixte Des RNR. ”2008.
- [Pelletier 09] M. Pelletier, « Le réacteur Phénix – Bilan de 35 ans de fonctionnement », Chap. : « Les performances du combustible », Revue Générale Nucléaire, 2009, n°1.
- [Perthame 04] B.Perthame. “Equations de transport non linéaires et systèmes hyperboliques.”*UPMC-cours.(2003-2004)* : https://www.ljll.math.upmc.fr/perthame/cours_hyp.pdf
- [Pham Thi 14] “Caractérisation et modélisation du comportement thermodynamique du combustible RNR-Na sous irradiation.” Thèse, Aix-Marseille Université, 2014.
- [Poeppel 71] R.B. Poeppel, An Advanced Gas Release and Swelling Subroutine, Proc. ANS Topical Meeting on Fast Reactor Fuel Element Technology, New Orleans, April, 1971, to be published.
- [Reid 87] Robert C. Reid, J. M. Prausnitz, and Bruce E Poling. “The Properties of Gases and Liquids.” New York: McGraw-Hill, 1987.

- [Roberts 71] J. T. A. Roberts and B. J. Wrona. “Nature of Brittle-to-Ductile Transition in UO₂-20 Wt% PuO₂ Nuclear Fuel.” *Journal of Nuclear Materials* 41, no. 1 (October 1, 1971): 23–38.
- [Roberts 73] J. T. A. Roberts, and B. J. Wrona “Crack Healing in UO₂.” *Journal of the American Ceramic Society* 56, no. 6 (June 1, 1973): 297–99.
- [Rodriguez 04] G. Rodriguez. “Le Caloporteur Sodium.” *Le Caloporteur Sodium, Technique Ingénieur*. 2004.
- [Ronchi 74] C. Ronchi, and C. Sari. “Properties of Lenticular Pores in UO₂, (U, Pu) O₂ and PuO₂.” *Journal of Nuclear Materials* 50, no. 1 (February 1, 1974): 91–97.
- [Sens 72] P. F. Sens. “The Kinetics of Pore Movement in UO₂ Fuel Rods.” *Journal of Nuclear Materials* 43, no. 3 (June 1, 1972): 293–307.
- [Sercombe 13] J. Sercombe, R. Masson, and T. Helfer. “Stress Concentration during Pellet Cladding Interaction: Comparison of Closed-Form Solutions with 2D(r,θ) Finite Element Simulations.” *Nuclear Engineering and Design* 260 (July 2013): 175–87.
- [Speight 64] Speight, M. V. “The Migration of Gas Bubbles in Material Subject to a Temperature Gradient.” *Journal of Nuclear Materials* 13, no. 2 (January 1, 1964): 207–9.
- [Temmar 19] M. Temmar, B. Michel, I. Ramière and N. Favrie. “Multi-physics modelling of the pellet-to-cladding gap closure phenomenon for SFR fuel performance codes.” *Journal of Nuclear Materials*. Submitted (July 09, 2019).
- [Veprev 18] D. P. Veprev, A.V. Boldyrev, S.Yu. Chernov, and N. A. Mosunova. “Development and Validation of the BERKUT Fuel Rod Module of the EUCLID/V1 Integrated Computer Code.” *Annals of Nuclear Energy* 113 (March 2018): 237–45.
- [Verpeaux 88] P. Verpeaux, T. Charras and A. Millard, “CASTEM 2000 : une approche moderne du calcul des structures”, *Calcul des structures et intelligence artificielle*, Editions Pluralis, France, 1988. <http://www-cast3m.cea.fr/>

- [Veshchunov 11] M. S. Veshchunov. “New Models for UO₂ Fuel Structure Evolution under Irradiation in Fast Reactors.” *Journal of Nuclear Materials* 415, no. 1 (August 1, 2011): 96–103.
- [Veshchunov 15] M. S. Veshchunov, A.V. Boldyrev, A.V. Kuznetsov, V. D. Ozrin, M. S. Seryi, V. E. Shestak, V. I. Tarasov, et al. “Development of the Advanced Mechanistic Fuel Performance and Safety Code Using the Multi-Scale Approach.” *Nuclear Engineering and Design* 295 (Decembre 2015): 116-126.
- [Welland 12] M. J. Welland. “3.21 - Matter Transport in Fast Reactor Fuels.” In *Comprehensive Nuclear Materials*, edited by Rudy J. M. Konings, 629–76. Oxford: Elsevier, 2012.

ANNEXES

| | |
|---|-----|
| Annexe A : Etude préliminaire sur la convergence du calcul 3D..... | 168 |
| Annexe B : Résolution du problème thermoélastique non linéaire | 172 |
| Annexe C : Loi matériau | 176 |
| Annexe D : Conditions limites sur les points localisés dans le trou | 181 |
| Annexe E : Détermination de l'expression du tenseur de déformation thermique pour une pastille annulaire et pleine | 182 |
| Annexe F : Méthode de Muskhelishvili | 185 |
| Annexe G : Expression du tenseur de contrainte et des constantes d'intégrations pour une pastille pleine et annulaire dans le cas d'une pastille fragmentée | 191 |
| Annexe H : Les étapes de calcul pour estimer Δur | 193 |

Annexe A : Etude préliminaire sur la convergence du calcul 3D

Lors de l'exécution du calcul nous avons remarqué qu'il y avait des problèmes d'indéterminations détectées sur certains nœuds selon UX ou UZ.

Ces indéterminations viennent de l'existence de mouvement de type « corps rigide » avec la formulation quasi statique du problème. En effet, certaines situations conduisent à l'absence de contact avec possibilité de mouvement sans déformation selon UX ou UZ (schéma ci-dessous).

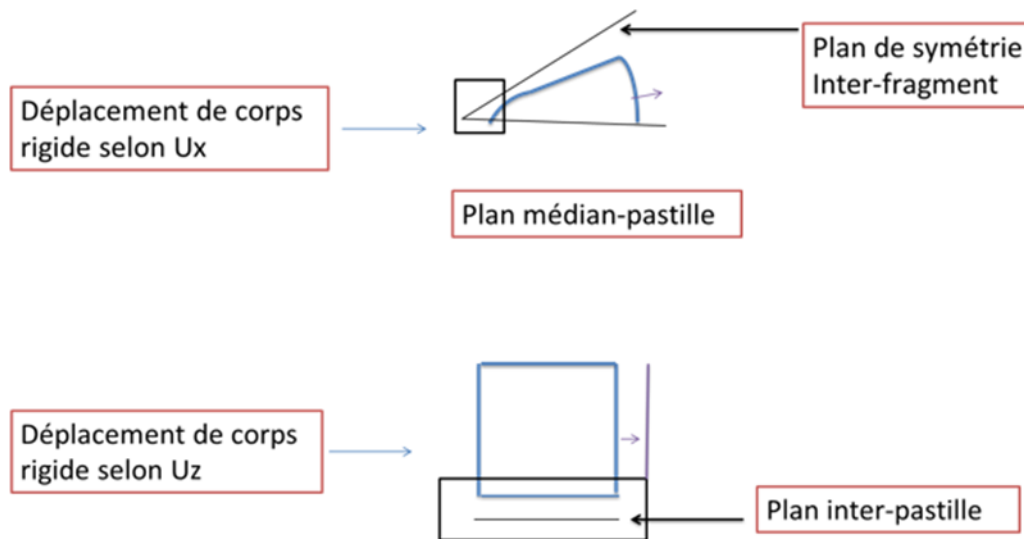


Schéma illustrant les déplacements de corps rigide selon Ux et Uz

La matrice de rigidité issue de la formulation quasi-statique devient donc singulière et la résolution du problème devient impossible. Pour lever ces indéterminations, CAST3M impose automatiquement un déplacement nul à des nœuds choisis arbitrairement, ce qui risque de fausser les résultats en créant des déformations non physiques du fait des blocages. Afin de corriger ces problèmes, nous avons rajouté une rigidité constante de rappel aux nœuds désignés ci-dessous :

- Point situé à l'intérieur au niveau du plan médian-Pastille appelé « *Pimp* ».
- Point situé l'extérieur au niveau du plan inter-pastille appelé « *Peip* ».

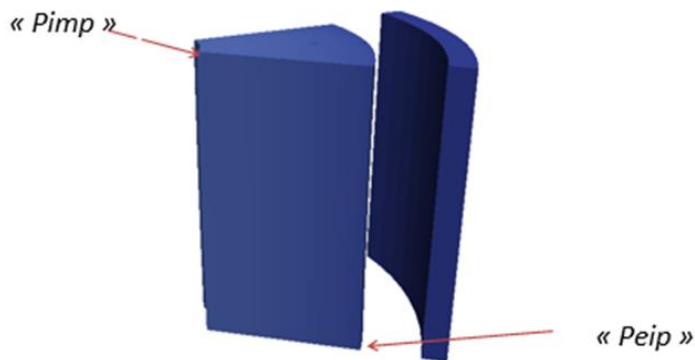


Schéma illustrant les nœuds où l'on appliquera une rigidité constante

Nous prendrons une rigidité assez faible afin d'avoir un impact négligeable de la force de rappel sur l'état mécanique du fragment.

Pour la pastille pleine, nous procédons de la même manière, sauf que nous n'appliquons pas de rigidité sur le point « *Pimp* ». En effet, pour la pastille pleine, le trou central apparaît au cours de l'irradiation. On le modélise par une perte de rigidité mécanique liée à la porosité mettant les contraintes internes à zéro. Si on applique une force de rappel en un point situé au niveau d'un élément finis avec raideur très faible ceci risque d'engendrer des déformations excessives dans la zone du trou central. Afin d'éviter cela nous choisissons de prendre le point situé à l'extérieur au plan médian pastille sur la face arrière « *Pempa* ».

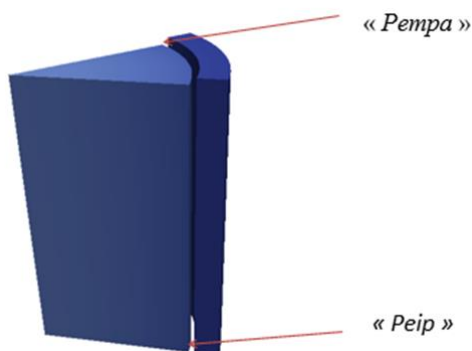


Schéma illustrant les nœuds où l'on appliquera une rigidité constante pour une pastille pleine

Pour l'implémentation, nous allons créer quatre points « *Pimp*, *Peip*, *Pimpb* et *Peipb* ». « *Pimpb* » et « *Peipb* » sont des points respectivement situés au même endroit que « *Pimp* et *Peip* », sauf qu'ils n'appartiennent pas au maillage. Nous allons ensuite appliquer une raideur

« k » entre $(Pimp, Pimpb)$ et $(Peip, Peipb)$, qui est fixé pour le moment à $15e3$. Puis nous allons bloquer les points « $Pimpb$ et $Peipb$ », ce qui permettra d'exercer une force de rappel $F_r = K(U_{point} - U_{pointb}) = KU_{point}$ sur les points « $Pimp$ et $Peip$ » et ainsi de limiter leurs déplacements.

avec : K correspondant à la matrice de rigidité :
$$\begin{pmatrix} K & -K \\ -K & K \end{pmatrix}$$

Fr correspondant au vecteur des forces de raideurs :
$$\begin{pmatrix} F_{Point} \\ F_{Pointb} \end{pmatrix}$$

U correspondant au vecteur déplacement :
$$\begin{pmatrix} U_{Point} \\ U_{Pointb} \end{pmatrix}$$

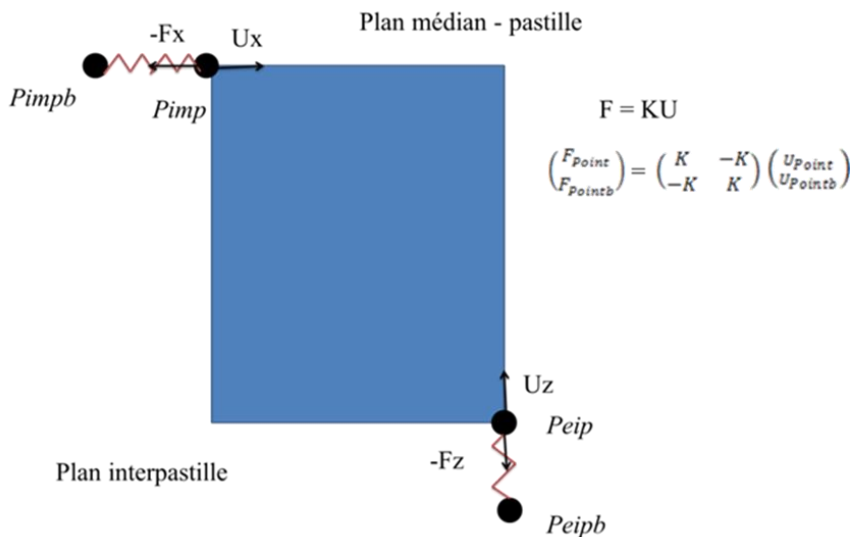


Schéma illustrant le principe de l'application des rigidités constantes

Pour fixer la valeur de « k » nous réalisons une étude de sensibilité. Nous allons donc diminuer la valeur de « k » jusqu'à convergence des résultats, tout en faisant attention que celle-ci ne soit pas trop faible pour éviter de rencontrer les problèmes de convergence vus précédemment. Le tableau ci-dessous présente les tailles de jeu obtenues pour différentes valeurs de rigidité à un instant t donné.

À $t = 2.0e6$ s

| Coefficient d'échange « k » (N/M) | taille du jeu « T_{jeu} » (Micromètre) |
|--------------------------------------|---|
| $k = 15 e3$ | $T_{jeu} = 0,68$ |
| $k = 15 e2$ | $T_{jeu} = 0,60$ |
| $k = 15 e1$ | $T_{jeu} = 0,60$ |
| $k = 75$ | $T_{jeu} = 0,60$ |

Tableau illustrant la variation de la taille du jeu en fonction de k

Les résultats du tableau, montrent que la rigidité à des répercussions non négligeables sur la taille du jeu. Nous remarquons que la taille du jeu est identique pour « $k = 75, 15e1$ et $15e2$ N/M » tandis que pour $k = 15e3$ N/M la taille du jeu est plus élevée. En dessous de 75 N/m, la rigidité devient trop faible, nous rencontrons alors les mêmes problèmes de convergence que, lorsque nous n'appliquons pas la rigidité. Nous choisissons donc de prendre une valeur de « k » égale à 75 N/m.

Annexe B : Résolution du problème thermoélastique non linéaire

On considère l'espace des déplacements cinématiquement admissibles (C.A.), l'ensemble des fonctions vérifiant les conditions cinématiques imposées sur la frontière du domaine Ω où les conditions en déplacement sont imposées, à savoir sur $\partial\Omega_u$. On définit l'espace des champs statiquement admissibles (S.A), l'ensemble des fonctions vérifiant l'équation d'équilibre et les conditions limites sur $\partial\Omega_{\vec{T}}$.

D'après le principe des travaux virtuel, nous pouvons écrire l'équation d'équilibre sur sa forme variationnelle:

$$\forall v^* \in C.A, \int_{\Omega} \bar{\sigma} : \bar{\varepsilon}^*(\vec{v}^*) dV = \int_{\Omega} \vec{f} \cdot \vec{v}^* dV + \int_{\partial\Omega_{\vec{T}}} \vec{T}_S \cdot \vec{v}^* dS \quad (B-1)$$

avec $C.A$ est l'espace fini, correspondant à l'ensemble des fonctions \vec{v}^* qui correspond aux champs nodaux vérifiant les conditions aux limites cinématiques. La résolution numérique de l'équation (B-1) pour chaque instant de l'irradiation est réalisée à partir d'une écriture incrémentale du principe des travaux virtuels. En supposant connues les variables d'état en tout point de la structure et le déplacement \vec{u} à l'instant t , nous recherchons leurs valeurs à l'instant $t + \Delta t$, avec Δt l'incrément en temps.

L'équation (B-1) devient donc :

$$\forall v^* \in C.A, \int_{\Omega} \bar{\sigma}_{t+\Delta t} : \bar{\varepsilon}^*(\vec{v}^*) dV = \int_{\Omega} \vec{f}_{t+\Delta t} \cdot \vec{v}^* dV + \int_{\partial\Omega_{\vec{T}}} \vec{T}_{S_{t+\Delta t}} \cdot \vec{v}^* dS \quad (B-2)$$

En utilisant la loi de comportement mécanique, nous pouvons exprimer les contraintes $\sigma_{t+\Delta t}$ en fonction de l'incrément de déformation :

$$\bar{\sigma}_{t+\Delta t} = \bar{\sigma}_t + \underline{\underline{E}} : \Delta \bar{\varepsilon}^{to}(\Delta \vec{u}) \quad (B-3)$$

L'incrément de déplacement recherché vérifie alors :

$$\forall v^* \in C.A, \int_{\Omega} \bar{\sigma}_{t+\Delta t}(\Delta \bar{\varepsilon}^{t_0}) : \bar{\varepsilon}^*(\vec{v}^*) dV = \int_{\Omega} \vec{f}_{t+\Delta t} \cdot \vec{v}^* dV + \int_{\partial \Omega_T} \vec{T}_{s_{t+\Delta t}} \cdot \vec{v}^* dS \quad (B-4)$$

Lorsque les lois de comportement mécanique des matériaux sont non linéaires, la recherche de l'incrément de déplacement $\Delta \vec{u}$ se fait de manière itérative à partir de deux étapes élémentaires:

- Une estimation à variables d'état fixées de l'incrément du champ de déplacement Δu tel que le champ de déplacement $\vec{u}_{t+\Delta t} = \vec{u}_t + \Delta \vec{u}$ vérifie l'équilibre (équation (B-4)).
- On déduit de l'incrément du champ de déplacement Δu , une estimation de l'évolution des variables d'état et des contraintes à partir de l'incrément du champ de déformation $\Delta \varepsilon^{t_0}$: c'est l'intégration locale (équation (B-3)).

À l'issue de la seconde étape, la nouvelle estimation des travaux intérieurs perturbe l'équilibre. Une nouvelle résolution de celui-ci conduit à une nouvelle estimation du champ de déplacement. Les étapes de résolutions globale et locale sont alors répétées jusqu'à convergence de l'équilibre mécanique.

La résolution globale de l'équilibre ne peut être réalisée que de manière approchée, on discrétise donc le problème spatial grâce à la méthode des éléments finis puis à l'aide de la méthode de Newton – Raphson présentée ci-dessous, on résout le problème thermoélastique non linéaire.

Méthode de Newton – Raphson :

Après discrétisation du problème à l'aide la méthode élément finis, on écrit l'équation II-5 en fonctions des champs nodaux $\vec{F}i(\Delta \vec{U})$ et $\vec{F}e$:

$$\forall v^* \in A^*, \quad \vec{F}i(\Delta \vec{U}) = \int_{\Omega} \bar{\sigma}_{t+\Delta t} : \bar{\varepsilon}^{t_0}(\vec{v}^*) dV \quad (B-5)$$

$$\vec{F}e \cdot \vec{V}^h = \int_{\Omega} \vec{f}_{t+\Delta t} \cdot \vec{v}^h dV + \int_{\partial \Omega_T} \vec{T}_{s_{t+\Delta t}} \cdot \vec{v}^h dS$$

avec A^* l'espace fini des fonctions \vec{v}^* qui correspond aux champs nodaux vérifiant les conditions aux limites cinématiques, $\vec{F}i(\Delta\vec{U})$ et $\vec{F}e$ sont appelés respectivement les forces nodales intérieures et extérieures. Le principe des travaux virtuels est alors équivalent à l'égalité des forces nodales intérieures et extérieures :

$$\vec{F}i(\Delta\vec{U}) = \vec{F}e \quad (\text{B-6})$$

$$\vec{R}(\Delta\vec{U}) = \vec{0} \quad \text{avec} \quad \vec{R}(\Delta\vec{U}) = \vec{F}i(\Delta\vec{U}) - \vec{F}e \quad (\text{B-7})$$

Le but étant d'annuler le résidu avec la méthode de Newton – Raphson . Cette méthode propose de rechercher de manière itérative la solution à l'équation (équation (B-7)). Une estimation $\Delta\vec{U}^{n+1}$ de cette solution est construite à partir de l'estimation $\Delta\vec{U}^n$ à l'étape précédente. La relation de récurrence entre $\Delta\vec{U}^{n+1}$ et $\Delta\vec{U}^n$ s'obtient en écrivant le développement limité à l'ordre 1 du résidu $\vec{R}(\Delta\vec{U}^{n+1})$ en supposant que les estimations $\Delta\vec{U}^{n+1}$ et $\Delta\vec{U}^n$ sont proches :

$$\vec{R}(\Delta\vec{U}^{n+1}) \approx \vec{R}(\Delta\vec{U}^n) + \frac{\partial \vec{R}}{\partial (\Delta\vec{U})} \Big|_{\Delta\vec{U}^n} \cdot (\Delta\vec{U}^{n+1} - \Delta\vec{U}^n) \quad (\text{B-8})$$

En supposant que cette approximation est solution de l'équation (B-7) et que $\frac{\partial \vec{R}}{\partial (\Delta\vec{U})} \Big|_{\Delta\vec{U}^n}$ est inversible nous obtenons la relation de récurrence suivante :

$$\Delta\vec{U}^{n+1} = \Delta\vec{U}^n - \left(\frac{\partial \vec{R}}{\partial (\Delta\vec{U})} \Big|_{\Delta\vec{U}^n} \right)^{-1} \cdot \vec{R}(\Delta\vec{U}^n) \quad (\text{B-9})$$

Nous sommes donc amenés à résoudre le problème (équation (B-7)) par une succession de problèmes linéaires.

Résolution du code

En définissant la matrice de rigidité et en prenant en compte les autres conditions limites du problème sachant que pour le moment nous n'avons imposé que des déplacements nuls et des tractions imposées, on détermine le système qui permettra de résoudre le problème global à chaque itération.

$$\begin{pmatrix} K & M^t \\ M & L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta \vec{U}^{n+1} - \Delta \vec{U}^n \\ \vec{\lambda}^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{F}e - \vec{F}i(\Delta \vec{U}^n) \\ \vec{d}_{t+\Delta t} - M(\vec{U}_t + \Delta \vec{U}^n) \end{pmatrix}$$

avec :

\vec{U}_t , déplacement initial ;

$\Delta \vec{U}^{n+1}$, estimation de l'incrément de déplacement en fin de pas de temps;

$\vec{\lambda}^{n+1}$, estimation des multiplicateurs de LAGRANGE en fin de pas de temps;

K matrice de rigidité ;

M, L matrices associées aux multiplicateurs de LAGRANGE ;

$\vec{F}e$ forces extérieures en $t + \Delta t$;

$\vec{F}i(\Delta \vec{U}^n)$ forces internes nodales ;

$\vec{d}_{t+\Delta t}$ déplacements imposés en $t + \Delta t$;

Le test de convergence se fait alors sur la norme du résidu $\vec{R}(\Delta \vec{U})$ défini par :

$$\vec{R}(\Delta \vec{U}) = \begin{pmatrix} \vec{F}e - \vec{F}i(\Delta \vec{U}^n) \\ \vec{d}_{t+\Delta t} - M(\vec{U}_t + \Delta \vec{U}^n) \end{pmatrix}$$

Notons toutefois que l'un des désavantages les plus importants de la méthode de NEWTON - RAPHSON est de ne converger que si l'estimation initiale de la solution est suffisamment proche de la solution recherchée.

Annexe C : Loi matériau

On rappelle la loi de comportement :

$$\underline{\underline{\dot{\bar{\sigma}}}} = \underline{\underline{E}} : (\underline{\underline{\dot{\bar{\epsilon}}}}^{tot} - \underline{\underline{\dot{\bar{\epsilon}}}}^{th} - \underline{\underline{\dot{\bar{\epsilon}}}}^{plast} - \underline{\underline{\dot{\bar{\epsilon}}}}^{fluage} - \underline{\underline{\dot{\bar{\epsilon}}}}^g) \quad (C-1)$$

$$\begin{cases} \underline{\underline{\dot{\bar{\epsilon}}}}^{fluage} = (f_{ir}(\bar{\sigma}, \dot{\phi}, T) + f_{th}(\bar{\sigma}, \dot{\phi}, T)) \cdot \frac{\partial \sigma_{eq}}{\partial \bar{\sigma}} \\ \underline{\underline{\dot{\bar{\epsilon}}}}^{gaine} = (f_{ir}(\bar{\sigma}, D, T) + f_{th}(\bar{\sigma}, D, T)) \cdot \frac{\partial \sigma_{eq}}{\partial \bar{\sigma}} \end{cases}$$

- Le tenseur du taux de déformation totale est défini ainsi :

$$\underline{\underline{\dot{\bar{\epsilon}}}}^{tot} = \frac{1}{2} \left(\overline{\overline{grad}} \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} \right) + \overline{\overline{grad}}^t \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} \right) \right) \quad (C-2)$$

avec \vec{u} le champ de déplacement.

-La contrainte thermoélastique est exprimée à l'aide de la loi de Hooke :

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\bar{\sigma}}}_{elas} &= \underline{\underline{E}} : (\underline{\underline{\bar{\epsilon}}}}^{tot} - \underline{\underline{\bar{\epsilon}}}}^{th}) \quad (C-3) \\ &= \lambda tr(\bar{\epsilon}) \bar{I} + 2\mu \bar{\epsilon} - (3\lambda + 2\mu) \alpha \Delta T(t, \vec{r}) \bar{I} \end{aligned}$$

λ et μ étant les coefficients de Lamé.

-Intéressons-nous aux déformations anélastiques désormais pour la gaine et le combustible.

- **COMBUSTIBLE**

Plasticité

Dans ce modèle la plasticité est considérée parfaite, le critère de plasticité est donc donné par :

$$f = \sigma_{eq} - \sigma_0 \leq 0 \quad (C-4)$$

où σ_0 est la limite d'élasticité

Remarque : dans ce problème la limite d'élasticité dépend de la température, qui évolue énormément au cours de l'irradiation, cette limite n'est donc pas constante au cours du temps.

La plasticité est atteinte pour $f = 0$.

La loi d'écoulement plastique du combustible est définie ainsi :

$$\bar{n} = \frac{\partial f}{\partial \bar{\sigma}} = \frac{3}{2} \frac{\bar{s}}{\sigma_{eq}} \quad (C-5)$$

où \bar{s} est le tenseur de contrainte déviatorique défini comme suit :

$$\bar{s} = \bar{\sigma} - \frac{1}{3} tr(\bar{\sigma}) \bar{I} \quad (C-6)$$

On applique le critère de Von Mises :

$$\sigma_{eq} = \sqrt{\frac{3}{2} \bar{s} : \bar{s}} \quad (C-7)$$

Viscoplasticité

La viscoplasticité est due au fluage thermique qui est provoqué notamment par la diffusion des défauts ponctuels. Cette diffusion est caractérisée par un coefficient de fluage et une dépendance linéaire à la contrainte. La vitesse de déformation équivalente associée à ce fluage est donnée par l'équation suivante :

$$\dot{\varepsilon}_{eq}^{th} = C_{diffu} * \sigma_{eq} \quad (C-8)$$

L'évolution de la déformation équivalente est linéaire par rapport à la contrainte équivalente.

Fluage d'irradiation

Un autre phénomène de fluage est à prendre en compte. Ce fluage, contrairement au fluage thermique, est prépondérant à plus basse température et dépend de la densité de fission dans le combustible. Sa vitesse de déformation équivalente est donnée par :

$$\dot{\varepsilon}_{eq}^{irr} = C_{irrad} * \sigma_{eq} \quad (C-9)$$

L'évolution de cette déformation est aussi linéaire par rapport à la contrainte équivalente.

On peut déduire des équations (C-8) et (C-9), le tenseur de déformation viscoplastique (ou fluage total) donnée par :

$$\dot{\varepsilon}_{pastille}^{fluage} = \dot{\varepsilon}_{eq\ pastille}^{fluage} \frac{3\bar{\sigma}}{2\sigma_{eq}} \quad (C-10)$$

avec $\dot{\varepsilon}_{eq\ pastille}^{fluage} = \dot{\varepsilon}_{eq}^{th} + \dot{\varepsilon}_{eq}^{irr}$

- ***GAINÉ***

Plasticité

Contrairement à la pastille, la loi de comportement plastique associée à la gaine est définie avec un écrouissage isotrope, le critère de plasticité est donc donné par :

$$f = \sigma_{eq} - KR_{p0,2} (\varepsilon_{eq}^p)^n = 0 \quad (C-11)$$

avec $R_{p0,2}$ limite conventionnelle d'élasticité du matériau à 0.2% de déformation
plastique

K, n constantes adimensionnel de la loi d'écrouissage

Loi d'écoulement plastique associée à la gaine est donnée par :

$$\bar{n} = \frac{\partial f}{\partial \bar{\sigma}} \quad (C-12)$$

L'écoulement plastique étant isotrope :

$$\bar{\dot{\epsilon}}^p = \dot{\epsilon}_{eq}^p \frac{3\bar{\sigma}}{2\sigma_{eq}} \quad (C-13)$$

Gonflement

On définit le tenseur de déformation induit par le gonflement isotrope de la manière suivante :

$$\bar{\epsilon}^g = \begin{pmatrix} \frac{g}{3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{g}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{g}{3} \end{pmatrix} \quad (C-14)$$

avec g la valeur du gonflement volumique défini comme suit :

$$g = g_0^0 * \delta * Ln \left[\frac{1 + \exp\left(\frac{D-\Delta}{\delta}\right)}{1 + \exp\left(\frac{-\Delta}{\delta}\right)} \right] \quad (C-15)$$

où δ est la dose de transition entre la période d'incubation et le régime de gonflement stationnaire : $\delta = c_1 + c_2 * \theta$

g_0^0 est la vitesse de gonflement volumique : $g_0^0 = a_2 * \exp\left[-\left(\frac{\theta - a_3}{a_4}\right)^2\right]$

θ est la température

Δ la dose d'incubation : $\Delta = b_1 * \exp\left[-\left(\frac{\theta - b_2}{b_3}\right)^2\right] + b_4$

D la dose (dpa) et a_n , b_n et c_n sont des coefficients correspondants aux paramètres du gonflement volumique d'irradiation

Fluage d'irradiation

Le fluage d'irradiation avec le gonflement sont les causes majeures de la déformation de la gaine. Ce fluage dépend indirectement du temps au travers de la dose.

$$\frac{d\varepsilon_{eq}^{irr}}{dD} = K_{irr} * \sigma_{eq} * (1.0 + 2.0 * \alpha * \sigma_{eq}) + \alpha * g_0^0 * \sigma_{eq} ; \quad (C-16)$$

Fluage thermique

Le fluage thermique se manifeste lorsque la température de la gaine est élevée et elle ne conduit qu'à des déformations négligeables de la gaine par rapport au fluage d'irradiation et le gonflement. Il peut en revanche conduire très rapidement à la rupture, dans le cas où la ductilité du matériau est très faible (moins de 1% de déformation plastique).

$$\dot{\varepsilon}_{eq}^{th} = K_{th} * \left(\frac{\sigma_{eq}}{1.e6}\right)^{nth}; \quad (C-17)$$

où nth constante supérieure à un et K_{th} une pondération de la vitesse de fluage thermique.

On peut déduire des équations (C-16) et (C-17), le tenseur de déformation viscoplastique (ou fluage total) donnée par :

$$\begin{aligned} \dot{\varepsilon}_{gaine}^{fluence} &= \dot{\varepsilon}_{eq\ gaine}^{fluence} \frac{3\bar{\sigma}}{2\sigma_{eq}} \\ \text{avec} \quad \dot{\varepsilon}_{eq\ gaine}^{fluence} &= \dot{\varepsilon}_{eq}^{th} + \frac{d\varepsilon_{eq}^{irr}}{dD} \end{aligned} \quad (C-18)$$

Annexe D : Conditions limites sur les points localisés dans le trou

Dans GERMINAL, des conditions aux limites appropriées permettent de fixer les degrés de liberté des points localisés dans le trou. Ces conditions consistent à fixer le déplacement des nœuds sommets d'éléments n'ayant plus de rigidité afin d'éviter d'une part l'indétermination des degrés de liberté en question et d'autre part le croisement des éléments. En fonction du type de pastille étudiée (pleine ou annulaire), les relations imposées aux déplacements de ces nœuds diffèrent :

Pastille pleine :

$$\frac{R_i + U_{R_i}}{R_m + U_{R_m}} = \frac{R_i}{R_m} \Leftrightarrow U_{R_i} = \frac{R_i}{R_m} U_{R_m} \quad (\text{D-1})$$

Pastille annulaire :

$$U_{R_i} = U_{R_m} \quad (\text{D-2})$$

où R_i et R_m désignent respectivement le rayon du $i^{\text{ème}}$ nœud immatériel et le rayon du nœud situé au bord du trou, et U_{R_i} et U_{R_m} correspondent respectivement au déplacement radial du $i^{\text{ème}}$ nœud immatériel et du nœud situé au bord du trou.

Annexe E : Détermination de l'expression du tenseur de déformation thermique pour une pastille annulaire et pleine

Tout d'abord déterminons l'expression analytique du champ de température dans le cas stationnaire pour une pastille annulaire et pleine. L'équation de la chaleur en régime stationnaire est donné par :

$$\text{div}(\lambda \overrightarrow{\text{grad}T}) + p_v = 0 \quad (\text{E-1})$$

En coordonnée cylindrique l'équation (E-1) devient :

Pastille pleine :

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \left(\lambda \frac{\partial T^{\text{pleine}}}{\partial r} \right) \right) = - \frac{p_l}{\pi(R_e^2)} \quad (\text{E-2})$$

tel que :

$$\begin{cases} \phi_{r=0} = -\lambda \left(\frac{\partial T^{\text{pleine}}}{\partial r} \right)_{r=0} = 0 \\ T^{\text{pleine}}(r = R_e) = T^{\text{pleine}}(R_e) \end{cases}$$

Pastille annulaire :

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \left(\lambda \frac{\partial T^{\text{an}}}{\partial r} \right) \right) = - \frac{p_l}{\pi(R_e^2 - R_i^2)} \quad (\text{E-3})$$

tel que :

$$\begin{cases} \phi_{r=R_i} = -\lambda \left(\frac{\partial T^{\text{an}}}{\partial r} \right)_{r=R_i} = 0 \\ T^{\text{an}}(r = R_e) = T^{\text{an}}(R_e) \end{cases}$$

où p_l est la puissance linéique (w/m).

À partir des équations (E-2) et (E-3) nous pouvons déduire l'expression du champ de température pour une pastille pleine et annulaire :

Pastille pleine :

$$T^{pleine}(r) = -\frac{p_l}{4\pi\lambda R_e^2} r^2 + \frac{p_l}{4\pi\lambda} + T^{pleine}(R_e) \quad (E-4)$$

Pastille annulaire :

$$T^{an}(r) = -\frac{p_l}{4\pi\lambda(R_e^2 - R_i^2)} r^2 + \frac{p_l R_i^2 \ln(r)}{2\pi\lambda(R_e^2 - R_i^2)} + \frac{p_l}{4\pi\lambda(R_e^2 - R_i^2)} (R_e^2 - 2R_i^2 \ln(R_e)) + T^{an}(R_e) \quad (E-5)$$

Les déformations thermiques sont introduites via un champ de déformation libre de contrainte $\bar{\varepsilon}^{th}(r)$ défini comme suit :

$$\begin{aligned} \bar{\varepsilon}_{pleine}^{th}(r) &= \alpha(T^{pleine}(r) - T_0)\bar{I} = \hat{\varepsilon}_{pleine}^{th}(r)\bar{I} + \tilde{\varepsilon}_{pleine}^{th}(r)\bar{I} \\ \bar{\varepsilon}_{an}^{th}(r) &= \alpha(T^{an}(r) - T_0)\bar{I} = \hat{\varepsilon}_{an}^{th}(r)\bar{I} + \tilde{\varepsilon}_{an}^{th}(r)\bar{I} \end{aligned} \quad (E-6)$$

où $(\hat{\varepsilon}_{pleine}^{th}(r), \hat{\varepsilon}_{an}^{th}(r))$ et $(\tilde{\varepsilon}_{pleine}^{th}(r), \tilde{\varepsilon}_{an}^{th}(r))$ sont respectivement la distribution non harmonique et harmonique de la déformation thermique pour une pastille pleine et annulaire.

$$\begin{aligned} \hat{\varepsilon}_{pleine}^{th}(r) &= \varepsilon_3^{pleine} r^2 \\ \tilde{\varepsilon}_{pleine}^{th}(r) &= \varepsilon_1^{pleine} \end{aligned} \quad (E-7)$$

$$\text{tel que : } \begin{cases} \varepsilon_3^{pleine} = -\frac{\alpha p_l}{4\pi\lambda R_e^2} \\ \varepsilon_1^{pleine} = -\varepsilon_3^{pleine} R_e^2 + \alpha(T^{pleine}(R_e) - T_0) \end{cases}$$

$$\hat{\varepsilon}_{an}^{th}(r) = \varepsilon_3^{an} r^2$$

$$\varepsilon_{an}^{th}(r) = \varepsilon_2^{an} \ln(r) + \varepsilon_1^{an} \quad (\text{E-8})$$

$$\text{tel que : } \begin{cases} \varepsilon_3^{an} = -\frac{\alpha p_l}{4\pi\lambda(R_e^2 - R_i^2)} \\ \varepsilon_2^{an} = -2\varepsilon_3^{an} R_i^2 \\ \varepsilon_1^{an} = -\varepsilon_3^{an}(R_e^2 - 2R_i^2 \ln(R_e)) + \alpha(T^{an}(R_e) - T_0) \end{cases}$$

Les coefficients ε_3^j (j= pleine ou an) peuvent être exprimés en fonction de la différence de température entre le centre et le rayon externe de la pastille $\Delta T(R_e)$ comme suit :

- Tout d'abord nous donnons l'expression de $\Delta T(R_e)$ pour une pastille pleine et annulaire en utilisant les formules données par les équations (E-4) et (E-5) :

$$\Delta T^{pleine}(R_e) = T^{pleine}(0) - T^{pleine}(R_e) = \frac{p_l}{4\pi\lambda} \quad (\text{E-9})$$

$$\Delta T^{an}(R_e) = T^{an}(R_i) - T^{an}(R_e) = \frac{p_l}{4\pi\lambda(R_e^2 - R_i^2)} \left(R_e^2 - R_i^2 + 2R_i^2 \ln\left(\frac{R_i}{R_e}\right) \right) \quad (\text{E-10})$$

- Par identification avec les expressions de ε_3^{pleine} et ε_3^{an} données par les équations (E-6) et (E-7), nous déduisons les expressions suivantes de ε_3^j :

$$\varepsilon_3^{pleine} = -\frac{\alpha \Delta T^{pleine}(R_e)}{R_e^2} \quad (\text{E-11})$$

$$\varepsilon_3^{an} = -\frac{\alpha \Delta T^{pleine}(R_e)}{\left(R_e^2 - R_i^2 + 2R_i^2 \ln\left(\frac{R_i}{R_e}\right) \right)} \quad (\text{E-12})$$

Annexe F : Méthode de Muskhelishvili

Nous développons ici la méthode de MUSKHELISHVILI. Nous considérons un corps S élastique isotrope soumis à des forces volumiques extérieures $\rho \vec{f}$. L'équilibre mécanique local est donc donné par l'équation suivante :

$$\text{div} \bar{\sigma} + \rho \vec{f} = 0 \quad (\text{F-1})$$

Les relations déformations-déplacements donnent :

$$\bar{\varepsilon} = \frac{1}{2} (\overline{\text{grad}}(\vec{u}) + \overline{\text{grad}}^T(\vec{u})) \quad (\text{F-2})$$

De plus, en élasticité linéaire isotrope, nous avons :

$$\bar{\sigma} = 2G\bar{\varepsilon} + \lambda \text{Tr}(\bar{\varepsilon}) \bar{I} \quad (\text{F-3})$$

En adoptant la notation d'Einstein, (F-1), (F-2) et (F-3) nous donnent l'équation de Navier :

$$(\lambda + G)u_{k,ki} + Gu_{i,kk} + \rho f_i = 0 \quad (\text{F-4})$$

Pour résoudre cette équation, un passage de l'espace réel à l'espace complexe est réalisé.

On pose :

$$\begin{cases} z = x + iy \\ \bar{z} = x - iy \end{cases} \quad (\text{F-5})$$

Les formules de dérivation deviennent :

$$\begin{cases} 2\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y} \\ 2\frac{\partial}{\partial \bar{z}} = \frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y} \end{cases} \quad (\text{F-6})$$

On associe un déplacement complexe D au champ de déplacement \vec{u} :

$$D(z, \bar{z}) = u_x(x, y) + iu_y(x, y) \quad (\text{F-7})$$

De même, à \vec{f} on associe F .

L'équation de Navier devient donc :

$$2(\lambda + G) \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \left(\frac{\partial D}{\partial z} + \frac{\partial \bar{D}}{\partial z} \right) + 4G \frac{\partial^2 D}{\partial \bar{z} \partial z} + \rho F = 0 \quad (\text{F-8})$$

En introduisant une fonction $V(z, \bar{z})$ à valeur réelle telle que $\rho F = \frac{\partial V}{\partial \bar{z}}$ et en mettant en facteur la dérivée partielle $\frac{\partial}{\partial \bar{z}}$, l'équation (F-8) devient :

$$\frac{\partial}{\partial \bar{z}} \left[2(\lambda + G) \left(\frac{\partial D}{\partial z} + \frac{\partial \bar{D}}{\partial z} \right) + 4G \frac{\partial D}{\partial z} + V \right] = 0 \quad (\text{F-9})$$

L'expression entre crochet est donc indépendante de \bar{z} et ne dépend que de z , c'est une fonction dite holomorphe. A partir de cette forme, on peut trouver une équation différentielle en séparant partie réelle et partie imaginaire. La résolution de cette équation différentielle nous fait aboutir à l'équation de MUSKHELISHVILI [England 03] :

$$2GD(z) = k\Omega(z) - z\overline{\Omega'(z)} - \overline{w(z)} + \frac{G}{2(\lambda+2G)} X \quad (\text{F-10})$$

$$\text{tel que } k = \frac{\lambda+3G}{\lambda+G} = 3 - 4\nu$$

où X est définie par $V = \frac{\partial X}{\partial z}$. Cette approche permet de décrire le champ de déplacement comme une fonction de deux potentiels $(\Omega(z), w(z))$ de variable $z = x + iy$.

Dans notre cas aucune forces extérieures n'est appliquées sur le solide, par conséquent, les deux composantes cartésiennes du champ de déplacement $u_x(x, y)$ et $u_y(x, y)$ s'expriment comme suit ([Muskhelishvili 63] et [Sercombe 13]) :

$$u_x(x, y) + iu_y(x, y) = D(z) = \frac{1}{2G} [(3 - 4\nu)\Omega(z) - z\overline{\Omega'(z)} - \overline{w(z)}] \quad (F-11)$$

Si les dérivées des potentiels $((\Omega(z), w(z)))$ complexes sont des fonctions holomorphes de la variable complexe z : $f'(z_0) = \lim_{z \rightarrow z_0} \frac{f(z) - f(z_0)}{z - z_0}$, le champ de contrainte satisfait l'équation d'équilibre. Afin de prendre en compte la déformation libre de contrainte isotrope $\bar{\varepsilon}^{th}$ (voir équations(III-7)-(III-9), un terme additionnel est introduit. Ainsi, la solution pour une pastille pleine et annulaire est définie comme suit ([Muskhelishvili 63] voir indication pp 165-170 et [England 03]) :

$$D_{pleine}(z) = \frac{1}{2G} [(3 - 4\nu)\Omega_{pleine}(z) - z\overline{\Omega_{pleine}'(z)} - \overline{w_{pleine}(z)}] \quad (F-12)$$

$$+ \widetilde{D}_{pleine}(z) + \left(\frac{1}{1-\nu} \right) \frac{1}{z} \left(\int_0^{\sqrt{z\bar{z}}} \varepsilon_3^{pleine} t^3 dt \right)$$

tel que : $\widetilde{D}_{pleine}(z) = \varepsilon_1^{pleine} z$

$$D_{an}(z) = \frac{1}{2G} [(3 - 4\nu)\Omega_{an}(z) - z\overline{\Omega_{an}'(z)} - \overline{w_{an}(z)}] + \widetilde{D}_{an}(z) \quad (F-13)$$

$$+ \frac{1}{z} \left(\left(\frac{1}{1-\nu} \right) \int_{R_i}^{\sqrt{z\bar{z}}} \varepsilon_3^{an} t^3 dt + d \right)$$

tel que : $\widetilde{D}_{an}(z) = \varepsilon_1^{an} z + \varepsilon_2^{an} (z \ln(z) - z)$

Le champ de déplacement respecte l'équation d'équilibre par construction ; $\widetilde{D}_{pleine}(z)$ et $\widetilde{D}_{an}(z)$ sont respectivement la solution obtenue en considérant uniquement la distribution harmonique de la déformation libre de contrainte isotrope $\bar{\varepsilon}^{th}$ ([Muskhelishvili 63] voir 187

indication pp 167) pour une pastille pleine et annulaire (voir équation (III-7)-(III-9)). L'autre partie de la solution est obtenue en considérant la distribution non-harmonique [England 03] (voir pp 21-31). En tenant compte des différentes hypothèses faites, les deux potentiels complexes choisis par Sercombe dans [Sercombe 13] sont :

$$\begin{cases} \Omega_{pleine}(z) = \gamma^{pleine}(G, \nu) \varepsilon_3^{pleine} z^3 + A \ln\left(\frac{z}{r_0}\right) \\ w_{pleine}(z) = \beta^{pleine}(G, \nu) \varepsilon_3^{pleine} z^3 - A \ln\left(\frac{z}{r_0}\right) \end{cases} \quad (F-14)$$

γ^{pleine} , β^{pleine} et r_0 sont les paramètres définis à l'aide des conditions limites. Pour la pastille annulaire, nous choisissons la même expression des deux potentiels que pour la pastille pleine, en revanche, r_0 est remplacé par R_i et les constantes sont différentes :

$$\begin{cases} \Omega_{an}(z) = \gamma^{an}(G, \nu) \varepsilon_3^{an} z^3 + B \ln\left(\frac{z}{R_i}\right) \\ w_{an}(z) = \beta^{an}(G, \nu) \varepsilon_3^{an} z^3 - B \ln\left(\frac{z}{R_i}\right) \end{cases} \quad (F-15)$$

γ^{an} et β^{an} sont les paramètres définis avec les conditions limites.

La composante radiale du champ de déplacement pour une pastille pleine et annulaire peut être déduite de la solution cartésienne comme suit :

$$u_x^{pleine-frag} + i u_y^{pleine-frag} = D_{pleine}(z) = \frac{1}{2G} [(3(z^2 - \bar{z}^2)z - 4\nu z^3) \gamma^{pleine}(G, \nu) \varepsilon_3^{pleine} - \beta^{pleine}(G, \nu) \varepsilon_3^{pleine} \bar{z}^3] + \varepsilon_1^{pleine} + \left(\frac{1}{1-\nu}\right) \frac{1}{z} \left(\int_0^{\sqrt{z\bar{z}}} \varepsilon_3^{pleine} t^3 dt \right) + \frac{A}{2G} \left[(3-4\nu) \ln\left(\frac{z}{r_0}\right) - \frac{z}{\bar{z}} + \ln\left(\frac{\bar{z}}{r_0}\right) \right]$$

$$u_x^{an-frag} + i u_y^{an-frag} = D_{an}(z) = \frac{1}{2G} [(3(z^2 - \bar{z}^2)z - 4\nu z^3) \gamma^{an}(G, \nu) \varepsilon_3^{an} - \beta^{pleine}(G, \nu) \varepsilon_3^{an} \bar{z}^3] + \varepsilon_1^{an} z + \varepsilon_2^{an} (z \ln(z) - z) + \frac{1}{z} \left(\left(\frac{1}{1-\nu}\right) \int_{R_i}^{\sqrt{z\bar{z}}} \varepsilon_3^{an} t^3 dt + d \right) + \frac{B}{2G} \left[(3-4\nu) \ln\left(\frac{z}{R_i}\right) - \frac{z}{\bar{z}} + \ln\left(\frac{\bar{z}}{R_i}\right) \right]$$

en utilisant les formules de Moivre :

$$z^k = r^k e^{ik\theta} = r^k (\cos(k\theta) + i \sin(k\theta))$$

$$\bar{z}^k = r^k e^{-ik\theta} = r^k (\cos(k\theta) - i \sin(k\theta))$$

Le champ de déplacement cartésien devient :

$$\begin{aligned}
u_x^{pleine-frag} + iu_y^{pleine-frag} = & \\
\frac{1}{2G} [(6(isin(2\theta) \cos(\theta) - \sin(2\theta) \sin(\theta)) - 4\nu(\cos(3\theta) + isin(3\theta)))\gamma^{pleine}(G, \nu)\varepsilon_3^{pleine} - & \\
\beta^{pleine}(G, \nu)\varepsilon_3^{pleine} (\cos(3\theta) - isin(3\theta))]r^3 + \varepsilon_1^{pleine} r(\cos(\theta) + isin(\theta)) + & \\
\left(\frac{1}{1-\nu}\right)\frac{(\cos(\theta)+isin(\theta))}{r} \left(\int_0^r \varepsilon_3^{pleine} t^3 dt\right) + \frac{A}{2G} [3 \ln(r) + 3i\theta + \ln(r) - i\theta - (\cos(2\theta) + isin(2\theta))] + & \\
(4 - 4\nu)\ln\left(\frac{1}{r_0}\right) - 4\nu \ln(r) - 4i\theta] &
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
u_x^{an-frag} + iu_y^{an-frag} = & \\
\frac{1}{2G} [(6(isin(2\theta) \cos(\theta) - \sin(2\theta) \sin(\theta)) - 4\nu(\cos(3\theta) + isin(3\theta)))\gamma^{an}(G, \nu)\varepsilon_3^{an} - & \\
\beta^{an}(G, \nu)\varepsilon_3^{an} (\cos(3\theta) - isin(3\theta))]r^3 + \varepsilon_1^{an} r(\cos(\theta) + isin(\theta)) + \varepsilon_2^{an} r(\cos(\theta)\ln(r) + isin(\theta)\ln(r) + & \\
\cos(\theta) i\theta - \sin(\theta)\theta - \cos(\theta) - isin(\theta)) + \frac{(\cos(\theta)+isin(\theta))}{r} \left(\left(\frac{1}{1-\nu}\right)\int_{R_i}^r \varepsilon_3^{an} t^3 dt + d\right) + \frac{B}{2G} [3 \ln(r) + 3i\theta + & \\
\ln(r) - i\theta - (\cos(2\theta) + isin(2\theta))] + (4 - 4\nu)\ln\left(\frac{1}{R_i}\right) - 4\nu \ln(r) - 4i\theta] &
\end{aligned}$$

en projetant le champ de déplacement cartésien dans le repère cylindrique :

$$\begin{aligned}
u_r \vec{e}_r &= u_x \cos\theta \vec{e}_x + u_y \sin\theta \vec{e}_y \\
\text{où, } u_x &= \text{Re}(D(z)) \text{ and } u_y = \text{Im}(D(z))
\end{aligned}$$

nous pouvons déduire l'expression de la composante radiale du champ de déplacement pour une pastille pleine et annulaire :

$$\begin{aligned}
u_r^{pleine-frag}(r, \theta) = \frac{1}{2G} [-4\nu(\cos(3\theta) \cos(\theta) + \sin(3\theta) \sin(\theta))\gamma^{pleine}(G, \nu)\varepsilon_3^{pleine} - & \\
\beta^{pleine}(G, \nu)\varepsilon_3^{pleine} (\cos(3\theta) \cos(\theta) - \sin(3\theta) \sin(\theta))]r^3 + \varepsilon_1^{pleine} r(\cos(\theta)^2 + \sin(\theta)^2) + & \\
\left(\frac{1}{1-\nu}\right)\frac{(\cos(\theta)^2 + \sin(\theta)^2)}{r} \left(\int_0^r \varepsilon_3^{pleine} t^3 dt\right) + \frac{A}{2G} [(4 - 4\nu)\ln\left(\frac{r}{r_0}\right)\cos(\theta) + (2 - 4\nu)\sin(\theta)\theta - & \\
(\cos(2\theta) \cos(\theta) + \sin(2\theta) \sin(\theta))] &
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
u_r^{an-frag}(r, \theta) = & \frac{1}{2G} [-4\nu(\cos(3\theta) \cos(\theta) + \sin(3\theta) \sin(\theta))\gamma^{an}(G, \nu)\varepsilon_3^{an} \\
& - \beta^{an}(G, \nu)\varepsilon_3^{an}(\cos(3\theta) \cos(\theta) - \sin(3\theta) \sin(\theta))]r^3 + \varepsilon_1^{an}r(\cos(\theta)^2 + \sin(\theta)^2) \\
& + \varepsilon_2^{an}r[(\cos(\theta)^2 + \sin(\theta)^2) \ln(r) + (\cos(\theta) \sin(\theta) - \sin(\theta) \cos(\theta)) \theta \\
& - (\cos(\theta)^2 + \sin(\theta)^2)] + \frac{(\cos(\theta)^2 + \sin(\theta)^2)}{r} \left(\left(\frac{1}{1-\nu} \right) \int_{R_i}^r \varepsilon_3^{an} t^3 dt + d \right) \\
& + \frac{B}{2G} \left[(4-4\nu) \ln\left(\frac{r}{R_i}\right) \cos(\theta) + (2-4\nu) \sin(\theta) \theta - (\cos(2\theta) \cos(\theta) + \sin(2\theta) \sin(\theta)) \right]
\end{aligned}$$

en utilisant les expressions suivantes :

$$\begin{aligned}
\cos(\theta)^2 + \sin(\theta)^2 &= 1 \\
\cos(p-q) &= \cos(p) \cos(q) + \sin(p) \sin(q) \\
\cos(p) + \cos(q) &= 2 \cos\left(\frac{p+q}{2}\right) \cos\left(\frac{p-q}{2}\right) \\
\cos(p) - \cos(q) &= -2 \sin\left(\frac{p+q}{2}\right) \sin\left(\frac{p-q}{2}\right)
\end{aligned}$$

nous pouvons finalement obtenir l'expression de la composante radiale du champ de déplacement pour une pastille pleine et annulaire :

$$\begin{aligned}
u_r^{pleine-frag}(r, \theta) = & \frac{1}{2G} [-4\nu \cos(2\theta) \gamma^{pleine}(G, \nu) \varepsilon_3^{pleine} - \beta^{pleine}(G, \nu) \varepsilon_3^{pleine} \cos(4\theta)]r^3 + \varepsilon_1^{pleine} r \\
& + \left(\frac{1}{1-\nu}\right) \frac{1}{r} \left(\int_0^r \varepsilon_3^{pleine} t^3 dt \right) + \frac{A}{2G} \left[(4-4\nu) \cos(\theta) \ln\left(\frac{r}{r_0}\right) + (2-4\nu) \theta \sin(\theta) - \cos(\theta) \right] \quad (F-16)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
u_r^{an-frag}(r, \theta) = & \frac{1}{2G} [-4\nu \cos(2\theta) \gamma^{an}(G, \nu) \varepsilon_3^{an} - \beta^{an}(G, \nu) \varepsilon_3^{an} \cos(4\theta)]r^3 + \varepsilon_1^{an} r + \varepsilon_2^{an} r [\ln(r) - 1] + \\
& \frac{1}{r} \left(\left(\frac{1}{1-\nu} \right) \int_{R_i}^r \varepsilon_3^{an} t^3 dt + d \right) + \frac{B}{2G} \left[(4-4\nu) \cos(\theta) \ln\left(\frac{r}{R_i}\right) + (2-4\nu) \theta \sin(\theta) - \cos(\theta) \right] \quad (F-17)
\end{aligned}$$

Les paramètres γ^{pleine} , γ^{an} , β^{pleine} , β^{an} ainsi que A, B, et d sont calculés dans l'Annexe G

Annexe G : Expression du tenseur de contrainte et des constantes d'intégrations pour une pastille pleine et annulaire dans le cas d'une pastille fragmentée

Pastille fragmentée

À partir de l'expression du champ de déplacement donnée dans l'Annexe F, nous pouvons déduire l'expression des composantes du tenseur de contrainte, grâce au loi mécanique suivante :

$$\bar{\sigma} = 2G \left(\frac{\nu}{1-2\nu} \text{tr}(\bar{\varepsilon}^{\text{tot}} - \bar{\varepsilon}^{\text{th}}) \bar{I} + (\bar{\varepsilon}^{\text{tot}} - \bar{\varepsilon}^{\text{th}}) \right)$$

$$\bar{\varepsilon} = \frac{1}{2} \left(\overline{\text{grad}}(\vec{u}) + \overline{\text{grad}}^T(\vec{u}) \right)$$

- Pastille pleine

$$\sigma_{r\theta}^{\text{pleine-frag}}(r, \theta) = 3\varepsilon_3^{\text{pleine}} r^2 \left[\gamma^{\text{pleine}}(G, \nu) \sin(2\theta) + \beta^{\text{pleine}}(G, \nu) \sin(4\theta) \right]$$

$$\sigma_{\theta\theta}^{\text{pleine-frag}}(r, \theta) = 3\varepsilon_3^{\text{pleine}} r^2 \left[-\frac{1}{1-\nu} \frac{2G}{4} + 4\gamma^{\text{pleine}}(G, \nu) \cos(2\theta) + \beta^{\text{pleine}}(G, \nu) \cos(4\theta) \right]$$

$$\sigma_{rr}^{\text{pleine-frag}}(r, \theta) = \varepsilon_3^{\text{pleine}} r^2 \left[-\frac{1}{1-\nu} \frac{2G}{4} - 3\beta^{\text{pleine}}(G, \nu) \cos(4\theta) \right] + \frac{4A \cos(\theta)}{r}$$

En utilisant les conditions limites, nous déduisons les expressions des constantes pour la pastille pleine fragmentée comme suit :

$$\begin{cases} \sigma_{r\theta}^{\text{pleine-frag}}(r, \pm\theta_m) = 0 \\ \sigma_{\theta\theta}^{\text{pleine-frag}}(r, \pm\theta_m) = 0 \end{cases} \rightarrow \begin{cases} \gamma^{\text{pleine}}(G, \nu) = \frac{G}{4} \frac{1}{1-\nu} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \beta^{\text{pleine}}(G, \nu) = -\frac{G}{4} \frac{1}{1-\nu} \end{cases}$$

$$\frac{1}{2\theta_m} \int_{-\theta_m}^{\theta_m} \sigma_{rr}^{pleine-frag}(R_e, \theta) d\theta = 0 \rightarrow A = \frac{\varepsilon_3^{pleine} R_e^3}{4 \sin(\frac{\pi}{8})} \left[\frac{2G}{4(1-\nu)} \frac{\pi}{8} + \frac{3\beta^{pleine}(G, \nu)}{4} \right]$$

$$\begin{cases} \frac{1}{2\theta_m} \int_{-\theta_m}^{\theta_m} u_r^{pleine-frag}(r_i, \theta) d\theta = 0 \\ r_i \ll R_e \end{cases} \rightarrow \ln(r_0) = \frac{(2-4\nu) \left(\sin(\frac{\pi}{8}) - \frac{\pi}{8} \cos(\frac{\pi}{8}) \right) - \sin(\frac{\pi}{8})}{(4-4\nu) \sin(\frac{\pi}{8})} + \ln(r_i)$$

- Pastille annulaire

$$\sigma_{r\theta}^{an-frag}(r, \theta) = 3\varepsilon_3^{an} r^2 [\gamma^{an}(G, \nu) \sin(2\theta) + \beta^{an}(G, \nu) \sin(4\theta)]$$

$$\sigma_{\theta\theta}^{an-frag}(r, \theta) = 3\varepsilon_3^{an} r^2 \left[-\frac{1}{1-\nu} \frac{2G}{4} \left(1 + \frac{R_i^4}{3r^4} \right) + 4\gamma^{an}(G, \nu) \cos(2\theta) + \beta^{an}(G, \nu) \cos(4\theta) \right] + 2G \frac{d}{r^2}$$

$$\sigma_{rr}^{an-frag}(r, \theta) = \varepsilon_3^{an} r^2 \left[-\frac{1}{1-\nu} \frac{2G}{4} \left(1 - \frac{R_i^4}{r^4} \right) - 3\beta^{an}(G, \nu) \cos(4\theta) \right] - 2G \frac{d}{r^2} + \frac{4B \cos(\theta)}{r}$$

En utilisant les conditions limites, nous déduisons les expressions des constantes pour la pastille annulaire fragmentée comme suit :

$$\begin{cases} \sigma_{r\theta}^{an-frag}(r, \pm\theta_m) = 0 \\ \frac{1}{(R_e - R_i)} \int_{R_i}^{R_e} \sigma_{\theta\theta}^{an-frag}(r, \pm\theta_m) = 0 \end{cases} \rightarrow \begin{aligned} \gamma^{an}(G, \nu) &= \frac{G}{4} \frac{1}{1-\nu} \frac{\pi}{\sqrt{2}} \frac{R_e^3}{(R_e^3 - R_i^3)} \left[\frac{1 - \frac{R_i^3}{R_e^3}}{(R_e - R_i)} - \frac{1 - \frac{R_i^4}{R_e^4}}{(R_e + R_i)} - \frac{R_i^3}{R_e^4} \right] \frac{(R_e^2 - R_i^2)}{\pi(R_e + R_i) - 3(R_e - R_i)} \\ \beta^{an}(G, \nu) &= -\frac{G}{4} \frac{\pi}{1-\nu} \frac{R_e^3}{(R_e^3 - R_i^3)} \left[\frac{1 - \frac{R_i^3}{R_e^3}}{(R_e - R_i)} - \frac{1 - \frac{R_i^4}{R_e^4}}{(R_e + R_i)} - \frac{R_i^3}{R_e^4} \right] \frac{(R_e^2 - R_i^2)}{\pi(R_e + R_i) - 3(R_e - R_i)} \end{aligned}$$

$$\begin{cases} \frac{1}{2\theta_m} \int_{-\theta_m}^{\theta_m} \sigma_{rr}^{an-frag}(R_e, \theta) d\theta = 0 \\ \frac{1}{2\theta_m} \int_{-\theta_m}^{\theta_m} \sigma_{rr}^{an-frag}(R_i, \theta) d\theta = 0 \end{cases} \rightarrow \begin{aligned} d &= \varepsilon_3^{an} \left[\frac{3\beta^{an}(G, \nu)(R_e^3 - R_i^3)}{G\pi} + \frac{(R_e^4 - R_i^4)}{4(1-\nu)R_e} \right] \frac{R_e R_i}{(R_e + R_i)} \\ B &= \frac{\varepsilon_3^{an}}{4 \sin(\frac{\pi}{8})} \left[\frac{3\beta^{an}(G, \nu)}{4} + \frac{2G\pi}{4(1-\nu)8} \right] \frac{(R_e^4 - R_i^4)}{(R_e - R_i)} \end{aligned}$$

Annexe H : Les étapes de calcul pour estimer Δu_r

Étape 1: estimation de Δu_r :

$$\begin{aligned} \Delta u_r^{pleine}(r, \theta) &= u_r^{pleine-frag}(r, \theta) - u_r^{pleine}(r) = \varepsilon_3^{pleine} \left[-\frac{1}{2G} [4\nu\gamma^{pleine}(G, \nu)\cos(2\theta) + \right. \\ &\beta^{pleine}(G, \nu)\cos(4\theta)] \left. \right] r^3 + \varepsilon_1^{pleine} r + \frac{A}{2G} \left[(4 - 4\nu)\cos(\theta)\ln\left(\frac{r}{r_0}\right) + (2 - 4\nu)\theta\sin(\theta) - \cos(\theta) \right] - \\ &\left[\left(\frac{1}{1-\nu}\right)\frac{1}{r} \left(\int_0^r (\varepsilon_1^{pleine} t) dt \right) + ar \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Delta u_r^{an}(r, \theta) &= u_r^{an-frag}(r, \theta) - u_r^{an}(r) \\ &= \varepsilon_3^{an} \left[-\frac{1}{2G} [4\nu\gamma^{an}(G, \nu)\cos(2\theta) + \beta^{an}(G, \nu)\cos(4\theta)] \right] r^3 + \varepsilon_1^{an} r + \varepsilon_2^{an} r(\ln(r) - 1) + \frac{d}{r} + \\ &\frac{B}{2G} \left[(4 - 4\nu)\cos(\theta)\ln\left(\frac{r}{R_i}\right) + (2 - 4\nu)\theta\sin(\theta) - \cos(\theta) \right] - \left[\left(\frac{1}{1-\nu}\right)\frac{1}{r} \left(\int_{R_i}^r t(\varepsilon_1^{an} + \varepsilon_2^{an}\ln(t)) dt \right) + \right. \\ &\left. \frac{b}{r} + cr \right] \end{aligned}$$

Étape 2 : estimation de la valeur maximale de Δu_r :

$$\begin{aligned} \Delta u_r^{pleine}\left(R_e, \frac{\pi}{8}\right) &= \varepsilon_3^{pleine} \left[-\frac{1}{2G} [4\nu\gamma^{pleine}(G, \nu)\frac{\sqrt{2}}{2}] \right] R_e^3 + \varepsilon_1^{pleine} R_e + \frac{A}{2G} \left[(4 - \right. \\ &4\nu)\cos\left(\frac{\pi}{8}\right)\ln\left(\frac{R_e}{r_0}\right) + (2 - 4\nu)\frac{\pi}{8}\sin\left(\frac{\pi}{8}\right) - \cos\left(\frac{\pi}{8}\right) \left. \right] - \left[\left(\frac{1}{1-\nu}\right)\frac{1}{R_e} \left(\int_0^{R_e} t(\varepsilon_1^{pleine}) dt \right) + aR_e \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Delta u_r^{an}\left(R_e, \frac{\pi}{8}\right) &= \varepsilon_3^{an} \left[-\frac{1}{2G} [4\nu\gamma^{an}(G, \nu)\frac{\sqrt{2}}{2}] \right] R_e^3 + \varepsilon_1^{an} R_e + \varepsilon_2^{an} R_e(\ln(R_e) - 1) + \frac{d}{R_e} + \frac{B}{2G} \left[(4 - \right. \\ &4\nu)\cos\left(\frac{\pi}{8}\right)\ln\left(\frac{R_e}{R_i}\right) + (2 - 4\nu)\frac{\pi}{8}\sin\left(\frac{\pi}{8}\right) - \cos\left(\frac{\pi}{8}\right) \left. \right] - \left[\left(\frac{1}{1-\nu}\right)\frac{1}{R_e} \left(\int_{R_i}^{R_e} t(\varepsilon_1^{an} + \varepsilon_2^{an}\ln(t)) dt \right) + \frac{b}{R_e} + \right. \\ &\left. cR_e \right] \end{aligned}$$

Étape 3: substitution de la valeur des constantes

Pastille pleine :

$$\Delta u_r^{pleine}\left(R_e, \frac{\pi}{8}\right) = -k_{pleine} \varepsilon_3^{pleine} R_e^3$$

$$k_{pleine} = \frac{1}{4} \left[1 + \left(\frac{1}{\tan\left(\frac{\pi}{8}\right)} - \frac{(2-4\nu)\pi}{8} \right) \left(\frac{\pi-3}{32(1-\nu)} \right) - \left[\ln\left(\frac{R_e}{r_0}\right) \frac{(\pi-3)}{8 \tan\left(\frac{\pi}{8}\right)} \right] \right]$$

Pastille annulaire :

Sachant que $\varepsilon_2^{an} = -2\varepsilon_3^{an}R_i^2$ (voir équation III.9), nous déduisons :

$$\begin{aligned} \Delta u_r^{an}\left(R_e, \frac{\pi}{8}\right) &= -\varepsilon_3^{an} \left[\frac{(1-2\nu)}{4(1-\nu)} R_e^3 + 2 \frac{R_i^4 R_e}{R_i^2 - R_e^2} \ln\left(\frac{R_e}{R_i}\right) - 4\nu\gamma^{an}(G, \nu) \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{R_e^3}{2G} \right] + \frac{d}{R_e} \\ &\quad + \frac{B}{2G} \left[(4-4\nu) \cos\left(\frac{\pi}{8}\right) \ln\left(\frac{R_e}{R_i}\right) + (2-4\nu) \frac{\pi}{8} \sin\left(\frac{\pi}{8}\right) - \cos\left(\frac{\pi}{8}\right) \right] \end{aligned}$$

En considérant la géométrie annulaire des pastilles combustible ($R_e^2 \gg R_i^2$), les simplifications suivantes peuvent être faites sur les valeurs des constantes :

$$\begin{aligned} \gamma^{an}(G, \nu) &\cong \frac{G}{4} \frac{1}{1-\nu} \frac{\pi}{\sqrt{2}} \left[\frac{2R_i}{\pi(R_e+R_i)-3(R_e-R_i)} \right] \\ \beta^{an}(G, \nu) &\cong -\frac{G}{4} \frac{\pi}{1-\nu} \left[\frac{2R_i}{\pi(R_e+R_i)-3(R_e-R_i)} \right] \\ d &\cong \frac{\varepsilon_3^{an}}{4(1-\nu)} \left[1 - \frac{6R_i}{\pi(R_e+R_i)-3(R_e-R_i)} \right] \frac{R_e^4 R_i}{(R_e+R_i)} \\ B &\cong \frac{\varepsilon_3^{an} 2G\pi}{128 \sin\left(\frac{\pi}{8}\right)} \left[1 - \frac{6R_i}{\pi(R_e+R_i)-3(R_e-R_i)} \right] \left(1 + \frac{R_i}{R_e} \right) R_e^3 \end{aligned}$$

Δu_r^{an} peut s'écrire comme suit :

$$\begin{aligned} \Delta u_r^{an}\left(R_e, \frac{\pi}{8}\right) &= -k_{an} \varepsilon_3^{an} \\ k_{an} &= E + F \\ E &= \left[\frac{1-2\nu}{4(1-\nu)} R_e^3 + \frac{2\nu}{4(1-\nu)} \left(\frac{\pi R_i R_e^3}{\pi(R_e+R_i)-3(R_e-R_i)} \right) \right] = \frac{1}{4(1-\nu)} \left[1 - 2\nu \left(1 - \frac{\pi R_i}{\pi(R_e+R_i)-3(R_e-R_i)} \right) \right] R_e^3 \\ F &= 2 \frac{R_i^4 R_e}{R_i^2 - R_e^2} \ln\left(\frac{R_e}{R_i}\right) - \left[\frac{R_i}{4(1-\nu)(R_e+R_i)} \left(1 - \frac{6R_i}{\pi(R_e+R_i)-3(R_e-R_i)} \right) R_e^3 \right] \\ &\quad + \left[\frac{\pi}{128(1-\nu)} \left(1 + \frac{R_i}{R_e} \right) \left(\frac{1}{\tan\left(\frac{\pi}{8}\right)} \left(1 - 4 \ln\left(\frac{R_e}{R_i}\right) \right) - (2-4\nu) \frac{\pi}{8} \right) \left(1 - \frac{6R_i}{\pi(R_e+R_i)-3(R_e-R_i)} \right) R_e^3 \right] \end{aligned}$$