

Validation d'un code CFD couplant hydrodynamique et transfert de masse

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives

Laboratoire de Modélisation des Accidents Graves, LMAG

Cadarache 13115 Saint-Paul-lès-Durance

27/02/2023 - 11/08/2023

Clément Plumecocq



POLYTECH Marseille - Mécanique Énergétique

Maître de stage : Romain Le Tellier, Ingénieur-Chercheur LMAG

Encadrant : Mirantsoa-Aimé Rasolofomanana, Doctorant LMAG

Tuteur école : Marc Médale

Résumé

Abstract

Table des matières

1	Introduction et contexte	2
1.1	Présentation du CEA et du laboratoire d'accueil	2
1.2	Contexte de l'étude	2
1.2.1	Contexte industriel	2
1.2.2	Généralités sur la sûreté nucléaire	3
1.2.3	Stratégie de rétention du corium en fond de cuve (IVR)	4
1.3	Objectif du stage	6
2	Éléments théoriques sur la méthode de champ de phase	7
2.1	Présentation des principales méthodes de suivi et de capture d'interface	7
2.2	Méthode champ de phase conservative	7
2.2.1	Équation de Cahn-Hilliard généralisée	8
2.2.2	Couplage avec les équations de Navier-Stokes incompressible	10
2.2.3	Paysage thermodynamique analytique	10
A	Solution analytique pour une interface plane	13
B	Calcul du coefficient de gradient à partir de la tension de surface	15
C	Détermination des paramètres pour des simulations	17
D	Éléments de stabilité de phase	19
E	Séquence de dégradation du cœur	21

Remerciements

CHAPITRE 1

Introduction et contexte

1.1 Présentation du CEA et du laboratoire d'accueil

Le Commissariat à l'Énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA) est un organisme de recherche au service de l'État et des industriels divisé en quatre directions assurant des missions distinctes :

- Direction des Applications Militaires (DAM) : Mène des travaux sur l'ensemble du cycle de vie des armes nucléaires (conception, fabrication, entretien, démantèlement) ainsi que sur les chaufferies nucléaires des bâtiments de la marine nationale.
- Direction de Recherche Technologique (DRT) : Dont la mission principale est le transfert de technologies de pointe vers des industriels locaux.
- Direction de la Recherche Fondamentale (DRF) : Conduit des recherches dans des domaines très variés tel que la science de l'univers, la biotechnologie ou la fusion nucléaire.
- Direction des ÉnergieS (DES) : Apporte une expertise sur l'ensemble des systèmes de production d'énergie, principalement le nucléaire sur l'ensemble du cycle de vie, de la conception au démantèlement et le traitement des déchets.

Le laboratoire d'accueil est le Laboratoire de Modélisation des Accidents Graves (LMAG) du Département de Technologie Nucléaire (DTN) affilié à la Direction des ÉnergieS (DES) sur le centre de Cadarache. Les travaux du laboratoire portent sur le comportement du cœur fondu, que l'on nomme corium, en situation accidentelle. Les principaux axes de recherche du laboratoire sont : l'interaction corium-béton (ICB), l'interaction corium-sodium et le comportement du corium en fond de cuve. Ce laboratoire emploie quinze ingénieurs-chercheurs et quatre doctorants qui travaillent principalement sur la modélisation et la simulation numérique, étant ainsi complémentaire au Laboratoire d'Expérimentation des Accidents Graves (LEAG) qui exploite une plateforme expérimentale (PLINIUS) dédiée au corium prototypique. Le stage a été encadré par Mirantsoa-Aimé Rasolofomanana, doctorant et Romain Le Tellier, ingénieur-chercheur.

1.2 Contexte de l'étude

1.2.1 Contexte industriel

En France, 56 réacteurs nucléaires dispersés sur 18 sites sont actuellement en service, ce parc est uniquement composé de réacteurs à eau pressurisée (REP) et représente 70% de la production électrique française. Les puissances fournies par ces réacteurs dit de deuxième génération varient entre 900 MWe et 1450 MWe. Un réacteur de troisième génération d'une puissance de 1650 MWe (EPR - European pressurized reactor) est actuellement en construction sur le site de Flamanville, cette nouvelle génération de réacteur tient compte du retour d'expérience issu de l'exploitation des réacteurs actuels, intégrant notamment plus d'éléments de sûreté. La construction de six nouveaux EPR a été annoncée et huit autres pourraient voir le jour.

Les REP sont des réacteurs de la famille des réacteurs à eau légère, de l'eau est utilisée comme fluide caloporteur

et modérateur, de plus cette eau est pressurisée pour éviter un changement de phase liquide-gaz dans le circuit primaire et ainsi obtenir un meilleur coefficient d'échange thermique, le schéma de principe est présenté par la figure 1.1

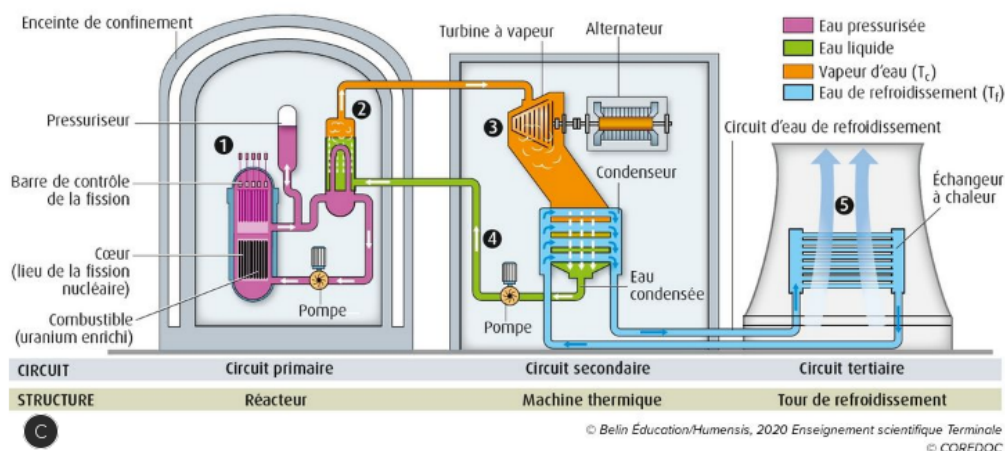


FIGURE 1.1 – Schéma de principe d'une centrale nucléaire de type REP, (d'après manuelnumerique-max.belin.education)

1.2.2 Généralités sur la sûreté nucléaire

Les questions relatives à la sûreté sont intrinsèquement liées à l'exploitation d'une centrale nucléaire tant les conséquences d'un éventuel accident peuvent être importantes. Ainsi dès le début des années 1970, le concept de défense en profondeur a été mis en place, ce concept se matérialise par la mise en place de lignes de défense successive indépendante. Les REP comptent trois barrières de confinement de la radioactivité :

1. La gaine combustible
2. La cuve et l'ensemble du circuit primaire
3. Le bâtiment réacteur placé sous atmosphère dépressurisée

Les variations par rapport au régime nominal sont classées selon l'échelle INES (International Nuclear Scale Event, figure 1.2), cette échelle permet de classer les accidents selon les conséquences engendrées, elle comporte huit échelons allant d'un simple écart (plusieurs centaines de cas par an en France) à l'accident majeur entraînant une contamination hors site. Les accidents correspondent aux paliers 4 à 7 et se différencient de l'incident du fait de la perte d'intégrité de la première barrière à la suite d'une fusion du combustible, ce matériau issu du cœur fondu est alors appelé corium.

	CONSÉQUENCES À L'EXTÉRIEUR DU SITE	CONSÉQUENCES À L'INTÉRIEUR DU SITE	DÉGRADATION DE LA DÉFENSE EN PROFONDEUR
7 ACCIDENT MAJEUR	Rejet majeur : effets considérables sur la santé et l'environnement		
6 ACCIDENT GRAVE	Rejet important susceptible d'exiger l'application intégrée des contre-mesures prévues		
5 ACCIDENT	Rejet limité susceptible d'exiger l'application partielle des contre-mesures prévues	Endommagement grave du cœur du réacteur / des barrières radiologiques	
4 ACCIDENT	Rejet mineur : exposition du public de l'ordre des limites prescrites	Endommagement important du cœur du réacteur / des barrières radiologiques / exposition mortelle d'un travailleur	
3 INCIDENT GRAVE	Très faible rejet : exposition du public représentant au moins un pourcentage des limites fixées par le guide AIEA*	Contamination grave / effets aigus sur la santé d'un travailleur	Accident évité de peu / perte de barrières
2 INCIDENT		Contamination importante / surexposition d'un travailleur	Incident assorti de défaillances importantes des dispositions de sécurité
1 ANOMALIE			Anomalie sortant du régime de fonctionnement autorisé
0 ÉCART		Aucune importance du point de vue de la sûreté	
ÉVÉNEMENT HORS ÉCHELLE	Aucune importance du point de vue de la sûreté		

FIGURE 1.2 – Echelle de classification des écarts au régime nominal INES (d'après ASN)

Les accidents possibles dans les REP sont séparés en deux grandes catégories, les accidents de criticité et les Accidents de Perte de Réfrigérant Primaire (APRP). Les accidents de criticité sont dus à une accélération brutale de la réaction en chaîne, le cœur est alors en régime sur-critique entraînant une augmentation rapide de puissance thermique produite, l'accident de Tchernobyl en 1986 est un exemple.

Les Accidents de Perte de Réfrigérant Primaire (APRP) résultent quant à eux d'une fuite dans le circuit primaire ou d'un arrêt de la circulation du fluide caloporteur privant le cœur du refroidissement nécessaire à son fonctionnement, un cas d'accident de ce type est Fukushima Daiichi en 2011 où le tsunami a détruit l'alimentation électrique de la centrale, neutralisant ainsi l'ensemble des pompes. Dans la suite de ce rapport nous traiterons uniquement de cette seconde catégorie d'accident.

Lors d'un accident de type APRP, l'élévation de la température dans la cuve provoque l'oxydation fortement exothermique des gaines en zircaloy, cette augmentation de température provoque la fusion du combustible, puis des éléments de contrôle du cœur. Finalement un bain de corium se forme au fond de la cuve. Le corium est un matériau fortement radioactif produisant sa propre chaleur, l'objectif est alors de maîtriser sa propagation, pour cela deux stratégies existent : la rétention en fond de cuve avec refroidissement externe (explicité plus bas) et l'étalement sur un radier en béton, cette seconde stratégie est préférée pour les réacteurs de forte puissance. L'objectif est d'étalement le corium sur un radier en béton réfractaire, ce béton est alors progressivement ablaté, pour limiter cette ablation un refroidissement passif est mis en place via le plancher puis une fois le corium partiellement refroidit, celui-ci est recouvert d'eau évitant ainsi une explosion de vapeur.

1.2.3 Stratégie de rétention du corium en fond de cuve (IVR)

Une fois le cœur fondu celui-ci se relocalise au fond de la cuve du réacteur. Pour limiter les conséquences d'un accident une stratégie vise à maintenir ce corium dans le fond de cette cuve, c'est la stratégie d'In-Vessel Retention (IVR). Pour cela on cherche à refroidir la cuve par l'extérieur. Cette stratégie est étudiée depuis les années 90 et mise en œuvre sur des réacteurs de faible puissance.

Le comportement du corium en fond de cuve est alors régi par deux principaux phénomènes : La thermohydraulique du bain, avec un écoulement turbulent soumis à des rouleaux de convection (instabilité de Rayleigh-Bénard) dans la phase oxyde, d'autre part la thermochimie régit quant à elle le comportement des phases et leurs équilibres, en effet la présence d'une lacune de miscibilité pour la phase liquide du système {U, O, Zr, Acier} entraîne une stratification de l'écoulement. En effet on distingue alors plusieurs phases dans l'écoulement, une phase oxyde riche en oxygène et une ou plusieurs phases pauvre en oxygène notées métal.

Les premières études du comportement du bain de corium ont été réalisées pour des bains stationnaires. Il a été montré qu'en régime stationnaire la stratification comprend une phase oxyde et une phase métal, cependant en fonction de l'accident la couche de métal peut être lourde (i.e plus que l'oxyde, on retrouve alors la configuration 1.3a) ou légère (configuration 1.3b). Les différents cas sont obtenus via des différences de conditions initiales (fraction massique d'acier, degré d'oxydation du zirconium, le rapport molaire entre l'uranium et le zirconium dans la phase oxyde et la température du bain).

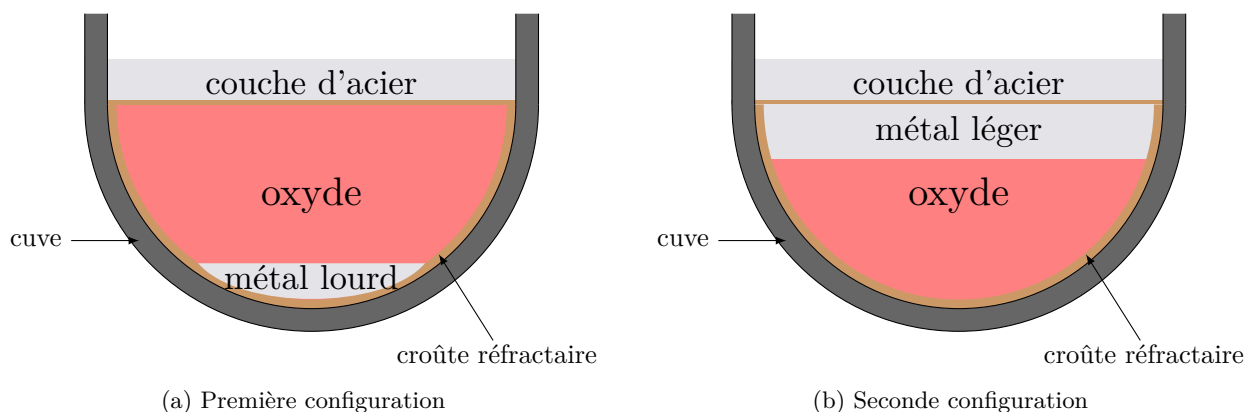


FIGURE 1.3 – Présentation des différents régimes de stratification possibles

L'objectif de la rétention en cuve est alors de maintenir ce bain jusqu'à sa solidification, le refroidissement est assuré par convection sur la paroi de la cuve et par rayonnement sur la face supérieure de la couche d'acier. Cependant la couche supérieure d'acier étant très conductrice et ayant un contact direct avec la cuve sur une surface très faible (la couche d'acier est haute de quelques dizaines de centimètres), la densité de flux transmise est très importante. Cet effet est appelé "*focusing effect*" et représente la principale menace pour l'intégrité

de la cuve. Des études plus récentes ont montré que l'épaisseur de la couche d'acier pouvait être plus fine en régime transitoire qu'en régime stationnaire, diminuant ainsi la surface de contact et aggravant le "*focusing effect*", c'est pourquoi une modélisation du régime transitoire est désormais préférée. Lors du transitoire des phénomènes d'inversion de phase sont observés, une partie du métal de la phase légère s'alourdit sous l'effet d'un transfert de masse et des gouttes tombent, puis sous l'effet d'un même transfert de masse la phase lourde remonte. On observe alors trois couches : une couche d'oxyde, une de métal léger localiser au dessus de la couche d'oxyde et une couche de métal lourd en fond de cuve ainsi, croûte réfractaire située entre les phases liquides et la cuve est également présente. Finalement on se retrouve dans la situation suivante :

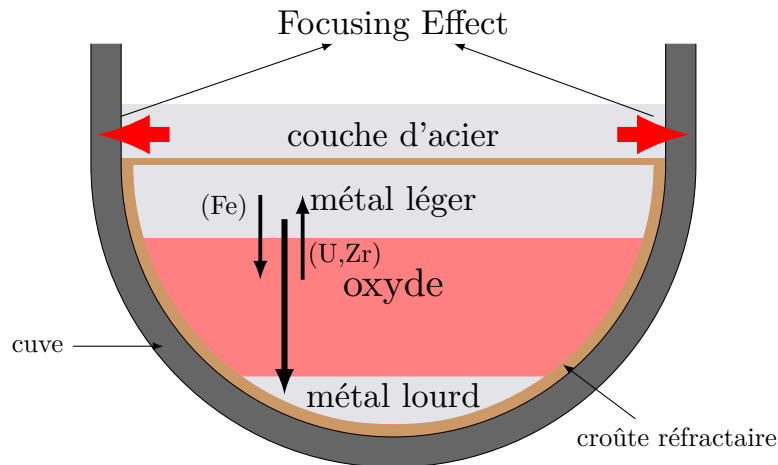


FIGURE 1.4 – Schéma du comportement du corium en fond de cuve en régime transitoire

La couche de métal lourd se forme à partir d'un transfert de masse à l'interface des phases oxyde et métal léger créant des gouttes d'acier lourd se relocalisant en fond de cuve. L'essai expérimental MASCA RCW, au cours duquel 45kg de corium ont été mis en contact avec 4kg d'acier de telle sorte que le régime stationnaire soit caractérisé par la présence d'une phase métallique lourde (configuration de la figure 1.3a), cependant la remontée de la phase lourde vers la phase légère n'a jamais été observée, l'essai ayant été arrêté au bout de 20 minutes le régime stationnaire n'a pas été atteint. Le résultat de cet essai est présenté en figure 1.5, on y observe la présence des gouttes de métal et les différentes phase (la largeur des lingots est d'environ 7cm).



FIGURE 1.5 – Résultat MASCA-RCW 100, d'après [1]

1.3 Objectif du stage

L'objectif du stage est de réaliser une validation qualitative d'un modèle CFD (*Computational Fluid Dynamic*) implémenté dans TrioCFD, code Open-Source du CEA, par M.A Rasolofomanana lors de sa thèse [2]. Ce modèle est une généralisation de la méthode champ de phase pour un système multicomposant. Cette implémentation fait suite aux thèses de Clément Cardon [3] et de Vaishnvi Tiwari [4] sur la modélisation par la méthode de champ de phase pour un système multicomposant. L'expérience reproduite est présentée dans [5], on y trouve une goutte qui sous l'effet d'un transfert de masse va subir une inversion de densité. Cette validation nécessite une paramétrisation cohérente du système pour obtenir des simulations consistante vis-a-vis d'un système binaire et du comportement thermodynamique. Le développement de ce type de code CFD a pour but de permettre la vérification et l'amélioration des lois de fermetures présente dans des codes intégraux, comme par exemple PROCOR développé au laboratoire.

CHAPITRE 2

Éléments théoriques sur la méthode de champ de phase

2.1 Présentation des principales méthodes de suivi et de capture d'interface

Le traitement numérique efficace des interfaces représente un enjeu majeur de la simulation numérique tant les applications faisant intervenir des interfaces sont importantes. On différencie les méthodes de suivi et de capture d'interface de part leurs philosophies différentes. En effet les méthodes de suivi d'interface placent des marqueurs sur l'interface, l'objectif est alors de suivre ces marqueurs au cours du temps, l'interface est alors suivie explicitement. Les méthodes de capture d'interface quant à elle suivent implicitement l'interface au travers de l'évolution d'une fonction couleur. De nombreuses méthodes existent, on présente ici les principales :

- **Volume of fluid (VOF)** : Cette méthode utilise un maillage fixe découpé en cellule représentant des volumes. On associe alors à chacune de ces cellules une fraction volumique de fluide, cette proportion est alors résolue au cours du temps et la position de l'interface peut être reconstruite. Cette reconstruction a pour désavantage de ne fournir que peu d'informations viables sur l'interface. Cette méthode reste donc peu précise et est également difficile à mettre en œuvre en trois dimensions.
- **Méthode Level-Set (LS)** : Cette méthode repose sur la résolution implicite de l'interface au travers de la résolution d'une fonction auxiliaire dite fonction ligne de niveau, généralement la distance signée à l'interface. Cette fonction se doit d'admettre une valeur nulle à l'interface, ainsi au travers de la résolution d'une équation d'advection sur cette fonction ligne de niveau, l'interface est résolue. Cette méthode convient pour les problèmes à fort changement topologique mais présente le désavantage d'être non-conservative.
- **Arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE)** : La méthode repose sur une double description lagrangienne (maillage mobile) et eulérienne (maillage fixe), à chaque itération temporelle, le maillage autour de l'interface est reconstruit pour s'adapter à la forme de l'interface, ainsi chaque maille contient uniquement un fluide. L'ensemble de ces propriétés rend la méthode très précise mais difficile à mettre en œuvre en trois dimensions.
- **Front-Tracking (FT)** : La méthode utilise des marqueurs sans masse positionnés sur l'interface transportés suivant une description lagrangienne sur un maillage fixe. Cette méthode nécessite l'implémentation d'un algorithme pour les cas de coalescence et rupture d'interface et possède comme désavantage de ne pas conserver la masse.

2.2 Méthode champ de phase conservative

Les méthodes de suivi d'interface présentées précédemment décrivent toute l'interface comme une discontinuité, cependant il existe un second paradigme traitant l'interface comme une zone de transition continue, on parle alors d'interface diffuse. Dans ce second cas l'interface correspond donc à une zone d'épaisseur connue et maîtrisée où cohabitent les deux phases, les gradients à l'interface étant finis le traitement numérique de est alors facilité. Ce concept d'interface diffuse date du XIX^{ème} siècle et est introduit par Van Der Waals. L'intérêt

de la communauté scientifique pour cette méthode apparaît dans les années 1950 avec la description de l'énergie libre par Ginzburg et Landau et son utilisation par Cahn et Hilliard en 1958 [6] pour obtenir une description thermodynamique de l'interface.

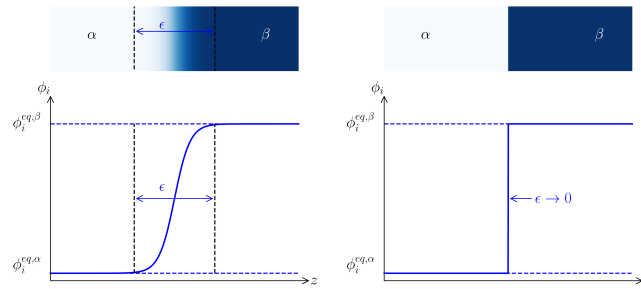


FIGURE 2.1 – Comparaison entre une interface raide et une interface diffuse

Dans la suite de ce travail nous traiterons des méthodes champ de phase, introduisant une variable champ de phase noté ϕ , l'interface est alors résolu au travers d'une fonction champ de phase basé sur cette variable ϕ .

2.2.

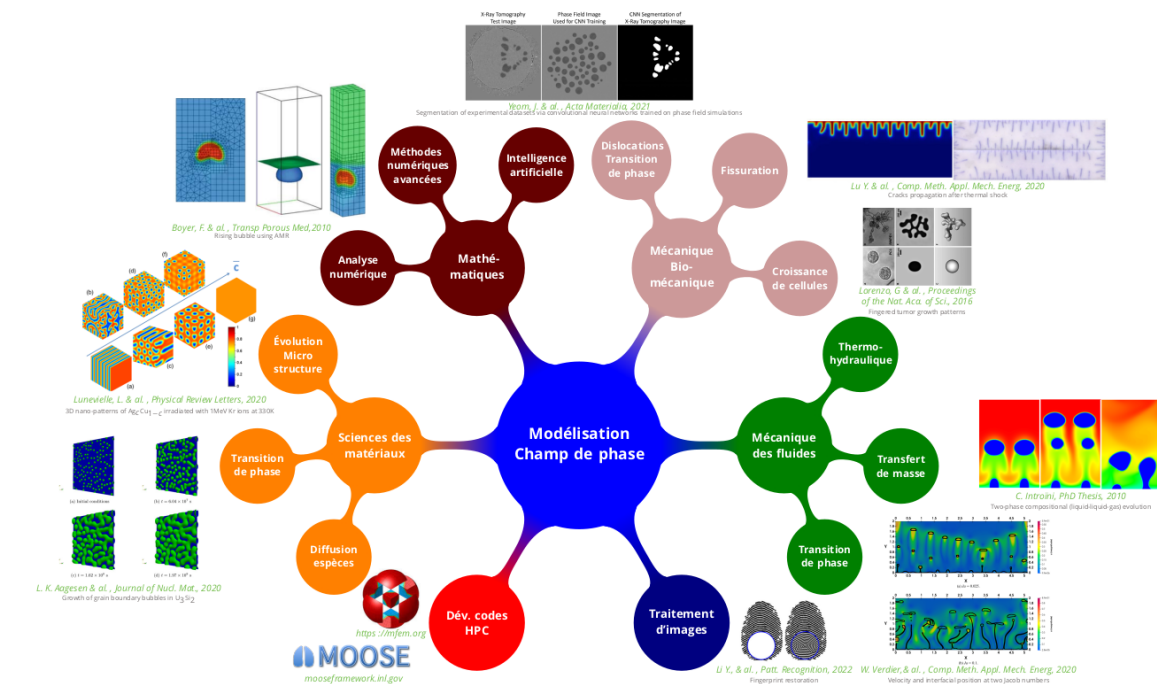


FIGURE 2.2 – Domaine d'application de la méthode champ de phase, tirée de [7]

2.2.1 Équation de Cahn-Hilliard généralisée

Comme expliqué précédemment la méthode de champ de phase repose sur le suivi d'une variable de phase (ou paramètre d'ordre) noté ϕ_i pour le composant i , dans le cas de paramètres conservés (concentration, fraction massique,...) ces paramètres sont contraints tel que :

$$\sum_i \phi_i = 1 \Rightarrow \phi_n = 1 - \sum_{i=1}^{n-1} \phi_i \quad (2.1)$$

Ainsi pour un mélange à n composants, seules $n - 1$ variables sont indépendantes nécessite un suivi. Dans certains cas le système peut également être décrit avec des variables non conservées telles que des indicatrices de phases ou des grandeurs liées à des réactions chimiques, cela peut être le cas pour le dioxyde de zirconium ZrO_2 présent dans le corium selon les conditions initiales. Le comportement de ces variables est alors régi par des équations de réaction-diffusion dites d'Allen-Cahn, dans notre étude ce type d'équation ne sera pas résolue

car l'ensemble des paramètres d'ordre sont conservés. Dans le cadre de variables conservées les équations de Cahn-Hilliard pour n composants, avec $i \in \{1, \dots, n-1\}$ s'écrivent sous la forme :

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \phi_i = \nabla \cdot \left(\sum_{j=1}^{n-1} \mathcal{M}_{ij} \nabla \left(\frac{\delta \mathbb{F}}{\delta \phi_j} \right) \right) \quad (2.2)$$

avec : \mathcal{M}_{ik} la mobilité (paramètre cinétique), ϕ le paramètre d'ordre, \mathbf{u} la vitesse et \mathbb{F} une fonctionnelle de Ginzburg-Landau généralisée [3] définit tel que :

$$\mathbb{F}[\phi_1, \dots, \phi_n] = \int_V \lambda \tilde{f}_0(\phi, \mathbf{x}, t) + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \frac{1}{2} \kappa_{ij} \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j dV \quad (2.3)$$

Où le premier terme représente la densité d'énergie liée aux valeurs locales de composition, traduisant l'équilibre des phases ainsi que leurs existences ou coexistence. Pour deux phases α et β , on rappelle les conditions données par l'équilibre thermodynamique :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \phi_i} \Big|_{\phi_i^{\alpha,eq}} = \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \phi_i} \Big|_{\phi_i^{\beta,eq}} = \tilde{\mu}_i^{eq} \end{array} \right. \quad (2.4a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{f}_0^{\alpha,eq} - \sum_{i=1}^{n-1} \tilde{\mu}_i^{eq} \phi_i^{\alpha,eq} = \tilde{f}_0^{\beta,eq} - \sum_{i=1}^{n-1} \tilde{\mu}_i^{eq} \phi_i^{\beta,eq} \end{array} \right. \quad (2.4b)$$

$\tilde{\mu}_i^{eq}$ représente un potentiel de diffusion de l'élément i à l'équilibre.

Le second terme représente la contribution des interfaces, le coefficient κ , dit coefficient de gradient, tient compte du coût énergétique engendré par l'interface, par la suite ce paramètre pourra être relié à la tension de surface. Finalement la dérivé variationnelle de cette fonctionnelle d'énergie libre peut être définit comme un potentiel de diffusion $\tilde{\mu}$:

$$\frac{\delta \mathbb{F}}{\delta \phi_j} = \lambda \frac{\partial \tilde{f}_0}{\partial \phi_j} - \sum_{k=1}^{n-1} \kappa_{jk} \Delta \phi_k = \tilde{\mu}_j \quad (2.5)$$

avec λ un paramètre d'upsampling numérique ajouté pour augmenter l'épaisseur de l'interface, dans le cas où $\lambda = 1$ l'interface est d'épaisseur "réelle" soit de l'ordre de l'angström, les capacités de calcul ne permettant pas de pouvoir faire des calculs avec des maillages contenant de si petits éléments.

Le potentiel de diffusion peut être relié au potentiel chimique classique tel que :

$$\tilde{\mu}_i = \frac{1}{V_m} (\mu_i - \mu_n) \quad (2.6)$$

Avec $\tilde{\mu}_i$ (en J.m^{-3}) représente le potentiel de diffusion de l'élément i , et V_m le volume molaire supposé constant dans tout le système.

Dans le cas où $\bar{\kappa} = \bar{0}$ on retrouve une équation d'advection-diffusion classique, dans le cas contraire on obtient une équation d'ordre 4. Une des principale difficulté dans la mise en place de méthode champ de phase repose sur le paramétrage des simulations. Dans la suite de ce travail nous utiliserons une proposition de paramétrage introduite par [8] et présentée en annexe C pour déterminer les paramètres d'upsampling λ et de coefficient de gradient κ en fonction des paramètres physique du système, la tension de surface σ et l'épaisseur d'interface ϵ .

$$\left\{ \begin{array}{l} \kappa = \frac{\sigma \epsilon}{\xi_1 \xi_2} \end{array} \right. \quad (2.7a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda = \frac{\xi_2 \sigma}{2 \epsilon \xi_1} \end{array} \right. \quad (2.7b)$$

avec ξ_1, ξ_2 deux constantes dépendantes de la description thermodynamique adoptée.

2.2.2 Couplage avec les équations de Navier-Stokes incompressible

Dans le cadre de cette étude les équations de Cahn-Hilliard sont couplées aux équations de conservation de masse et de quantité de mouvement incompressible sous l'approximation de Boussinesq, d'après [9] le système d'équations s'écrit sous la forme :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \end{cases} \quad (2.8a)$$

$$\rho^* \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla P + \eta \Delta \mathbf{u} + \sum_{i=1}^{n-1} \tilde{\mu}_i \nabla \phi_i + \rho(\phi) \mathbf{g} \quad (2.8b)$$

avec \mathbf{u} la vitesse, P la pression, $\mathbf{g} = \{0, 0, -g\}^T$, η la viscosité dynamique supposée constante, ρ^* la masse volumique du solvant

Dans un premier temps l'approximation de Boussinesq est utilisé pour calculer la densité dans le terme de flottabilité :

$$\rho(\phi) = \rho^* \left(1 + \sum_{i=1}^{n-1} \beta_i \phi_i \right) \quad (2.9)$$

Les paramètres β_i sont à déterminer en fonction du système étudié, ρ^* correspond à une masse volumique de référence, généralement celle du solvant.

2.2.3 Paysage thermodynamique analytique

L'objectif présenté dans [8] est de d'obtenir une formulation analytique du terme homogène de la fonctionnelle de Ginzburg-Landau. Dans le cas binaire, cette contribution est de la forme d'un double puits, généralement un polynôme de degré 4 :

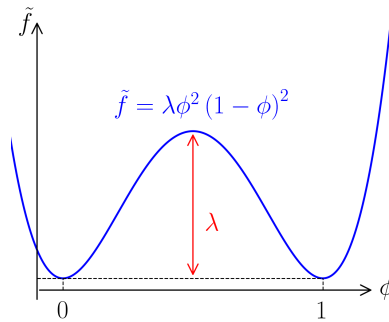


FIGURE 2.3 – Description classique du terme homogène de la description de l'énergie pour un système binaire complètement immiscible

L'objectif est de généraliser ce double puits pour un système n-aire, ainsi on introduit un pseudo grand potentiel correspondant à la hauteur énergétique nécessaire pour changer de minimum d'énergie [3].

$$\Omega^* = \Omega - \Omega^{eq} = \tilde{g}^{liq} - \sum_i \tilde{\mu}_i^{eq} \phi_i - \left(\tilde{g}^{liq,eq} - \sum_i \tilde{\mu}_i^{eq} \phi_i^{eq} \right) \quad (2.10)$$

avec \tilde{g}^{liq} l'énergie libre de Gibbs, utilisé comme grandeur d'intérêt ici puisque le système est supposé isotherme et isobare. Les bases thermodynamiques étant peu développées aux points d'intérêt (Température supérieure à 2000 °C) on cherche à définir ce potentiel grâce à une formulation analytique en double puits, [8] introduit alors la formulation :

$$\Omega^* = P^{dis} \times P^{cont} \quad (2.11)$$

Où P^{dis} , P^{cont} représente deux paraboloïdes correspondant à la phase dispersée et continue. Dans le cas ternaire, avec les éléments A et B d'intérêt, les paraboloïdes sont de la forme :

$$P^k = \left(\frac{\cos(\theta^k) (\phi_A - \phi_A^{eq,k}) + \sin(\theta^k) (\phi_B - \phi_B^{eq,k})}{a^k} \right)^2 + \left(\frac{-\sin(\theta^k) (\phi_A - \phi_A^{eq,k}) + \cos(\theta^k) (\phi_B - \phi_B^{eq,k})}{b^k} \right)^2 \quad (2.12)$$

Avec $k = \{disp, cont\}$ la phase (dispersée ou continue), a (resp. b) le demi-petit (resp. demi-grand) puits, θ^k l'angle de rotation associé au puits de la phase k .

On trace alors en exemple le cas le plus simple de paysage :

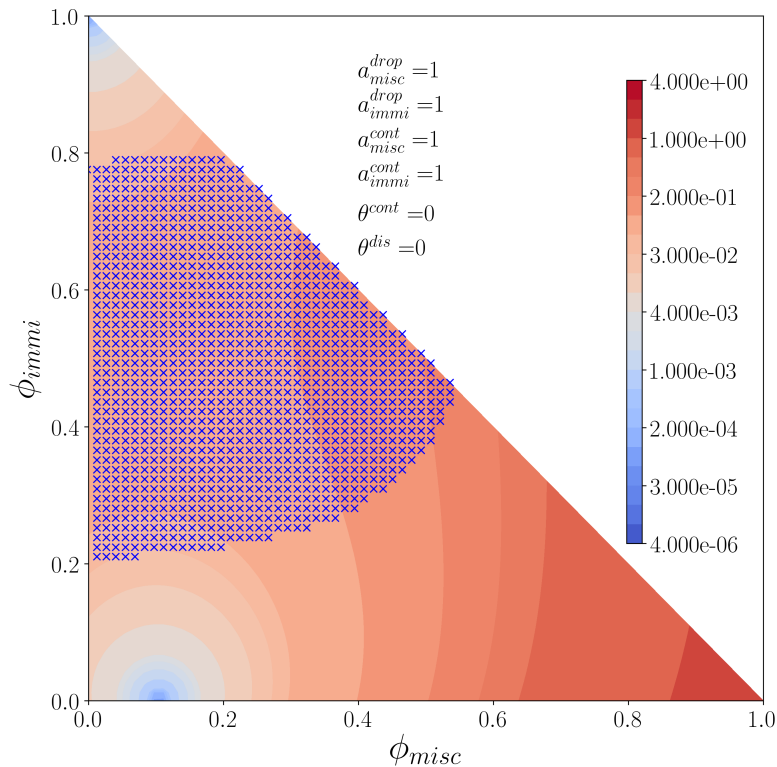


FIGURE 2.4 – Exemple de paysage thermodynamique, la zone bleu représente la zone instable

Les éléments de calculs pour la détermination de la zone instable sont présentés en annexe D, cette zone correspond à des compositions pour lesquels le système subit une séparation de phase, ainsi il est primordial que cette zone n'englobe pas les conditions initiales. Une représentation dans le plan est possible pour le cas ternaire, pour les cas comprenant un nombre plus important de paramètres d'ordre la visualisation semble plus complexe. Ainsi cette formulation possède l'avantage d'éviter un couplage entre le code CFD et un solveur d'équilibre thermodynamique (Open-Calphad par exemple) réduisant significativement le temps de développement. En effet pour les cas où le paysage est connu il est alors possible de calibrer les paramètres des paraboloïdes pour obtenir une forme analytique proche du paysage réel. Dans le cas d'un paysage inconnu, par manque d'information thermodynamique, ce paysage permet d'avoir une description cohérente pour des simulations qualitatives.

Bibliographie

- [1] Romain Le TELLIER. « Interfaces en physique des réacteurs nucléaires - Contribution à la modélisation et au développement de méthodes numériques associées en neutronique et physique du corium ». In : (2019). Publisher : Unpublished. DOI : [10.13140/RG.2.2.27006.84801](https://doi.org/10.13140/RG.2.2.27006.84801). URL : <http://rgdoi.net/10.13140/RG.2.2.27006.84801> (visité le 05/06/2023).
- [2] M.A. RASOLOFOMANANA. « Modélisation à interface diffuse et simulation numérique de la thermohydraulique d'un bain liquide diphasique avec transfert de masse interfacial ». Thèse de doct.
- [3] Clément CARDON. « Modélisation de la diffusion multi-composants dans un bain de corium diphasique oxyde-métal par une méthode d'interface diffuse ». Thèse de doctorat. Université Paris-Saclay (ComUE), 21 nov. 2016. URL : <https://www.theses.fr/2016SACLX096> (visité le 12/04/2023).
- [4] Vaishnvi TIWARI. « A consistent approach for coupling lumped-parameter and phase-field models for in-vessel corium to thermodynamic databases. » Thèse de doct. Université Paris Saclay (ComUE), 26 nov. 2019. URL : <https://theses.hal.science/tel-02489384> (visité le 06/06/2023).
- [5] Abhijit RAO et al. « Influence of unsteady mass transfer on dynamics of rising and sinking droplet in water : Experimental and CFD study ». In : *AIChE Journal* 61.1 (2015). _eprint : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/aic.14612>, p. 342-354. ISSN : 1547-5905. DOI : [10.1002/aic.14612](https://doi.org/10.1002/aic.14612). URL : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/aic.14612> (visité le 29/03/2023).
- [6] John W. CAHN et John E. HILLIARD. « Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy ». In : *The Journal of Chemical Physics* 28.2 (fév. 1958), p. 258-267. ISSN : 0021-9606, 1089-7690. DOI : [10.1063/1.1744102](https://doi.org/10.1063/1.1744102). URL : <https://pubs.aip.org/aip/jcp/article/28/2/258-267/74794> (visité le 07/06/2023).
- [7] Clément INTROÏNI et Romain LE TELLIER. *Suivi d'interfaces diffuses par une méthode de champ de phase, Séminaire Méthodes d'Interfaces, organisé par le réseau de numériciens de Cadarache/IREsNE*.
- [8] *Numerical Simulation of the Dynamics of a Multicomponent Droplet in Water using the Phase-Field Model of TrioCFD Code*. URL : <https://fr.overleaf.com/project/63fc85bf75cafd151f3ae56b> (visité le 04/05/2023).
- [9] Junseok KIM. « Phase-Field Models for Multi-Component Fluid Flows ». In : *Communications in Computational Physics* 12.3 (sept. 2012). Publisher : Cambridge University Press, p. 613-661. ISSN : 1815-2406, 1991-7120. DOI : [10.4208/cicp.301110.040811a](https://doi.org/10.4208/cicp.301110.040811a). URL : <https://www.cambridge.org/core/journals/communications-in-computational-physics/article/phasefield-models-for-multicomponent-fluid-flows/0672FBD318BBE2621A51AE0F2C9C2FE3> (visité le 04/05/2023).
- [10] Peder AURSAND et al. « The spinodal of single- and multi-component fluids and its role in the development of modern equations of state ». In : *Fluid Phase Equilibria* 436 (25 mar. 2017), p. 98-112. ISSN : 0378-3812. DOI : [10.1016/j.fluid.2016.12.018](https://doi.org/10.1016/j.fluid.2016.12.018). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378381216306227> (visité le 17/04/2023).
- [11] Nikolay Ivanov KOLEV. *Multiphase Flow Dynamics 5 : Nuclear Thermal Hydraulics*. Cham : Springer International Publishing, 2015. ISBN : 978-3-319-15155-7 978-3-319-15156-4. DOI : [10.1007/978-3-319-15156-4](https://doi.org/10.1007/978-3-319-15156-4). URL : <https://link.springer.com/10.1007/978-3-319-15156-4> (visité le 12/04/2023).

ANNEXE A

Solution analytique pour une interface plane

La solution analytique stationnaire permet de donner des conditions initiales cohérentes, ainsi on s'intéresse au cas binaire "classique" (avec un seul paramètre d'ordre noté ϕ) avec des points d'équilibres placés aux extremums, le composé est choisi comme complètement miscible. La densité d'énergie est alors choisit sous une forme analytique polynomiale d'ordre 4 en double puits :

$$f(\phi) = \phi^2(1 - \phi)^2 \quad (\text{A.1})$$

On rappelle fonctionnelle de Ginzburg-Landau :

$$\mathbb{F} = \int_V \lambda f(\phi) + \frac{1}{2} \kappa |\nabla \phi|^2 dV \quad (\text{A.2})$$

Avec λ un paramètre d'upsclling présenté précédemment, κ un coefficient de gradient. La condition d'équilibre est défini tel que :

$$\kappa \frac{d^2 \phi}{dz^2} = \lambda \frac{df(\phi)}{d\phi} \quad (\text{A.3})$$

L'astuce consiste alors par multiplier l'équation par $\frac{d\phi}{dz}$ puis d'intégrer entre 0 et z , soit :

$$\kappa \frac{d^2 \phi}{dz^2} \frac{d\phi}{dz} = \lambda \frac{df(\phi)}{d\phi} \frac{d\phi}{dz} \quad (\text{A.4})$$

$$\Rightarrow \kappa \int_0^z \frac{d^2 \phi}{dz^2} \frac{d\phi}{dz} dz = \int_0^z \frac{df(\phi)}{dz} dz \quad (\text{A.5})$$

Loin de l'interface, en $z = 0$ on considère le système à l'équilibre soit $\frac{d\phi}{dz} = 0$ et on fixe une condition au limite de type Dirichlet homogène :

$$\phi(z = 0) = 0 \Rightarrow f(0) = 0 \quad (\text{A.6})$$

Finalement le résultat de l'intégration précédente nous donne :

$$\frac{\kappa d\phi}{2 dz} = \lambda f(\phi) \quad (\text{A.7})$$

En remplaçant $f(\phi)$ par sa formulation analytique A.1 :

$$\frac{d\phi}{\phi(1 - \phi)} = \sqrt{\frac{2\lambda}{\kappa}} dz \quad (\text{A.8})$$

En utilisant une décomposition en élément simple on obtient :

$$\frac{d\phi}{\phi} + \frac{d\phi}{1 - \phi} = \sqrt{\frac{2\lambda}{\kappa}} dz \quad (\text{A.9})$$

Par simplification on pose $\gamma = \sqrt{\frac{2\lambda}{\kappa}}$

$$\ln(\phi) + \ln(1 - \phi) = \gamma z$$

$$\frac{\phi}{1 - \phi} = e^{\gamma z}$$

$$\phi = \frac{1}{1 + e^{-\gamma z}}$$

On rappelle que :

$$\tanh x = \frac{1 - e^{-2x}}{1 + e^{-2x}} \quad (\text{A.10})$$

Soit,

$$\frac{1}{2}(1 + \tanh x) = \frac{1}{1 - e^{-2x}} \quad (\text{A.11})$$

Par identification on retrouve dans notre cas $x = \gamma/2$ soit :

$$\phi(z) = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \tanh \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{2\lambda}{\kappa}} z + C \right) \right\} \quad (\text{A.12})$$

La constante C peut être déterminé à partir d'une valeur moyenne du paramètre d'ordre, cette résolution ne sera pas explicité ici.

ANNEXE B

Calcul du coefficient de gradient à partir de la tension de surface

Cette deuxième annexe présente la méthode de calcul des coefficients de gradient à partir de la tension de surface qui est une donnée physique du système. Physiquement la tension interfaciale σ représente l'excès d'énergie libre par unité de surface associé à la présence d'une interface entre deux phases distinctes, on peut ainsi la écrire :

$$\sigma = \frac{\mathbb{F} - \mathbb{F}^{hom}}{S} \quad (B.1)$$

Où S représente la surface de l'interface, \mathbb{F} l'énergie libre du système et \mathbb{F}^{hom} l'énergie libre homogène du système, c'est-à-dire l'énergie libre du système dénuée d'interface. Dans un premier temps on rappelle la forme des fonctionnelles de Ginzburg-Landau associées à ses deux systèmes :

$$\begin{aligned} \mathbb{F} &= \int_V \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \frac{\kappa_{ij}}{2} \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j + f(\phi_1, \dots, \phi_{n-1}) - \sum_1^{n-1} \tilde{\mu}_i^{eq} \phi_i dV \\ \mathbb{F}^{hom} &= \int_V f^{\alpha, eq} - \sum_1^{n-1} \tilde{\mu}_i^{eq} \phi_i^{\alpha, eq} dV \end{aligned}$$

Ainsi en combinant les deux équations précédentes :

$$\sigma = \int_V \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \frac{\kappa_{ij}}{2} \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j + f(\phi_1, \dots, \phi_{n-1}) - f^{\alpha, eq} - \sum_1^{n-1} \tilde{\mu}_i^{eq} (\phi_i - \phi_i^{\alpha, eq}) dV \quad (B.2)$$

Dans le cas unidimensionnel suivant z l'équation précédente devient :

$$\sigma = \int_0^L \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \frac{\kappa_{ij}}{2} \frac{d\phi_i}{dz} \frac{d\phi_j}{dz} + f(\phi_1, \dots, \phi_{n-1}) - f^{\alpha, eq} - \sum_1^{n-1} \tilde{\mu}_i^{eq} (\phi_i - \phi_i^{\alpha, eq}) dz \quad (B.3)$$

La condition d'équilibre s'écrit :

$$\sum_{j=1}^{n-1} \kappa_{i,j} \frac{d^2 \phi_j}{dz^2} = \left. \frac{\partial f}{\partial \phi_i} \right|_{\phi_j \neq i} - \tilde{\mu}_i^{eq} \quad (B.4)$$

Après multiplication par $\frac{d\phi_i}{dz}$ et intégration on trouve :

$$\sigma = \int_0^L \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \kappa_{i,j} \frac{d\phi_i}{dz} \frac{d\phi_j}{dz} dz \quad (B.5)$$

On retrouve alors la relation permettant la détermination de ce coefficient dans le cas binaire en posant $n = 2$

$$\sigma = \int_0^L \kappa^{bin} \left(\frac{d\phi}{dz} \right)^2 dz \quad (B.6)$$

On cherche alors une formulation analytique du terme $\frac{d\phi}{dz}$, pour cela on rappelle l'équation du profil du paramètre d'ordre ϕ à l'équilibre :

$$\kappa^{bin} \frac{d^2\phi}{dz^2} = \lambda \left(\frac{\partial \tilde{f}}{\partial \phi} - \tilde{\mu}^{eq} \right) \quad (\text{B.7})$$

Cette équation est alors multiplié par $\frac{d\phi}{dz}$, puis intégrée de 0 à z :

$$\begin{aligned} \kappa^{bin} \frac{d\phi}{dz} \frac{d^2\phi}{dz^2} &= \lambda \frac{d\phi}{dz} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \phi} - \lambda \frac{d\phi}{dz} \tilde{\mu}^{eq} \\ \int_0^z \kappa^{bin} \frac{d\phi}{dz} \frac{d^2\phi}{dz^2} dz &= \lambda \int_0^z \frac{d\phi}{dz} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \phi} - \frac{d\phi}{dz} \tilde{\mu}^{eq} dz \\ \int_0^z \kappa^{bin} \frac{d\phi}{dz} \frac{d^2\phi}{dz^2} dz &= \lambda \left(\int_0^z \frac{\partial \tilde{f}}{\partial z} dz - \int_{\phi^{\alpha,eq}}^{\phi} \tilde{\mu}^{eq} d\phi \right) \\ \left[\frac{1}{2} \kappa^{bin} \left(\frac{d\phi}{dz} \right)^2 \right]_0^z &= \lambda \left([\tilde{f}]_0^z - [\tilde{\mu}^{eq} \phi]_{\phi^{\alpha,eq}}^{\phi} \right) \end{aligned}$$

Par hypothèse, en $z = 0$, loin de l'interface, la phase est à l'équilibre $\phi = \phi^{\alpha,eq}$ soit $\frac{d\phi}{dz} \Big|_{z=0} = 0$, finalement on trouve :

$$\frac{d\phi}{dz} = \sqrt{\frac{2\lambda}{\kappa^{bin}} \left(\tilde{f} - \tilde{\mu}^{eq} \phi - (\tilde{f}^{\alpha,eq} - \tilde{\mu}^{eq} \phi^{\alpha,eq}) \right)} = \sqrt{\frac{2\lambda \Omega^*}{\kappa^{bin}}} \quad (\text{B.8})$$

L'équation (B.6) peut alors se réécrire :

$$\sigma = \int_{\phi^{\alpha,eq}}^{\phi^{\beta,eq}} \sqrt{2\lambda \kappa^{bin} \Omega^*} d\phi \quad (\text{B.9})$$

Sauf mention contraire, dans le cadre de l'étude on considère :

$$\bar{\kappa} = \begin{pmatrix} \kappa^{bin} & 0 \\ 0 & \kappa^{bin} \end{pmatrix} \quad (\text{B.10})$$

ANNEXE C

Détermination des paramètres pour des simulations

L'objectif est de se placer dans le cas binaire, ainsi on pose $\phi_B^k = \phi_B^{eq,k}$ et $\phi_A^k = \phi^k$.

$$\Omega^* = P^{disp} \times P^{cont}$$

$$= (\phi - \phi^{eq,disp})^2 (\phi - \phi^{eq,cont})^2 \left[\left(\frac{\cos(\theta^{disp})}{a^\alpha} \right)^2 + \left(\frac{\sin(\theta^{disp})}{b^\alpha} \right)^2 \right] \left[\left(\frac{\cos(\theta^{cont})}{a^\beta} \right)^2 + \left(\frac{\sin(\theta^{cont})}{b^\beta} \right)^2 \right]$$

Par soucis de simplification on définit une constante Λ tel que :

$$\Lambda^2 = \left[\left(\frac{\cos(\theta^{disp})}{a^\alpha} \right)^2 + \left(\frac{\sin(\theta^{disp})}{b^\alpha} \right)^2 \right] \left[\left(\frac{\cos(\theta^{cont})}{a^\beta} \right)^2 + \left(\frac{\sin(\theta^{cont})}{b^\beta} \right)^2 \right] \quad (C.1)$$

On rappelle la formule reliant la tension de surface et le paramètre d'ordre dans le cas binaire :

$$\sigma = \int_0^L \kappa^{bin} \left(\frac{d\phi}{dz} \right)^2 dz \quad (C.2)$$

Ainsi on peut écrire :

$$\begin{aligned} \sigma &= \sqrt{2\kappa\lambda} \int_{\phi^{disp,eq}}^{\phi^{cont,eq}} \sqrt{\Omega^*} d\phi \\ &= \sqrt{2\kappa\lambda} \int_{\phi^{disp,eq}}^{\phi^{cont,eq}} (\phi - \phi^{eq,disp}) (\phi - \phi^{eq,cont}) \Lambda d\phi \\ &= \sqrt{2\kappa\lambda} \int_{\phi^{disp,eq}}^{\phi^{cont,eq}} \{ \phi^2 - \phi (\phi^{eq,disp} + \phi^{eq,cont}) + \phi^{eq,disp} \phi^{eq,cont} \} \Lambda d\phi \\ &= \sqrt{2\kappa\lambda} \Lambda \left[\frac{\phi^3}{3} - \frac{\phi^2}{2} (\phi^{eq,disp} + \phi^{eq,cont}) + \phi \phi^{eq,disp} \phi^{eq,cont} \right]_{\phi^{disp,eq}}^{\phi^{cont,eq}} \end{aligned} \quad (C.3)$$

Dans les cas où les composants ne sont pas totalement miscible/immiscible on obtient un résultat de la forme :

$$\begin{aligned} \sigma &= \sqrt{2\kappa\lambda} \Lambda \left(\frac{(\phi^{eq,cont})^3 - (\phi^{eq,disp})^3}{3} - \frac{1}{2} ((\phi^{eq,cont})^2 - (\phi^{eq,disp})^2) (\phi^{eq,disp} + \phi^{eq,cont}) \right. \\ &\quad \left. + (\phi^{eq,cont} - \phi^{eq,disp}) \phi^{eq,disp} \phi^{eq,cont} \right) \quad (C.4) \end{aligned}$$

Ainsi on pose :

$$\xi_1 = \left| \Lambda \left(\frac{(\phi^{eq,cont})^3 - (\phi^{eq,disp})^3}{3} - \frac{1}{2} \left((\phi^{eq,cont})^2 - (\phi^{eq,disp})^2 \right) (\phi^{eq,disp} + \phi^{eq,cont}) + (\phi^{eq,cont} - \phi^{eq,disp}) \phi^{eq,disp} \phi^{eq,cont} \right) \right| \quad (C.5)$$

On rappelle également la définition de l'épaisseur d'interface :

$$\epsilon = \frac{\phi^{eq,cont} - \phi^{eq,dis}}{\max \left(\frac{d\phi}{dz} \right)} \quad (C.6)$$

$$= \sqrt{\frac{\kappa}{2\lambda}} \frac{\phi^{eq,cont} - \phi^{eq,dis}}{\max \left(\sqrt{\Omega^*} \right)} \quad (C.7)$$

Cette définition peut s'observer géométriquement :

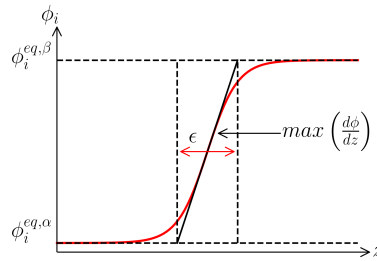


FIGURE C.1 – Définition de l'interface choisie

Ainsi on pose :

$$\xi_2 = \frac{\phi^{eq,cont} - \phi^{eq,dis}}{\max \left(\sqrt{\Omega^*} \right)} \quad (C.8)$$

$$= \frac{\phi^{eq,cont} - \phi^{eq,dis}}{\max \left((\phi - \phi^{eq,disp}) (\phi - \phi^{eq,cont}) \Lambda \right)} \quad (C.9)$$

Finalement les coefficients de gradient et facteur d'agrandissement sont obtenus tel que :

$$\kappa = \frac{\sigma \epsilon}{\xi_1 \xi_2} \quad (C.10)$$

$$\lambda = \frac{\xi_2 \sigma}{2 \epsilon \xi_1} \quad (C.11)$$

ANNEXE D

Éléments de stabilité de phase

Dans le cadre de notre étude nous nous intéressons à deux phases en coexistence, une phase dite continue et l'autre dispersée. La détermination de la stabilité des phases est essentielle pour pouvoir tracer le paysage thermodynamique. La courbe binodale correspond à la condition pour laquelle deux phases peuvent coexister, c'est-à-dire que sous la courbe binodale le système peut être composé d'une seule phase, il le sera dans la zone instable et pourra l'être dans la zone métastable. Cependant le calcul de la zone instable est beaucoup plus

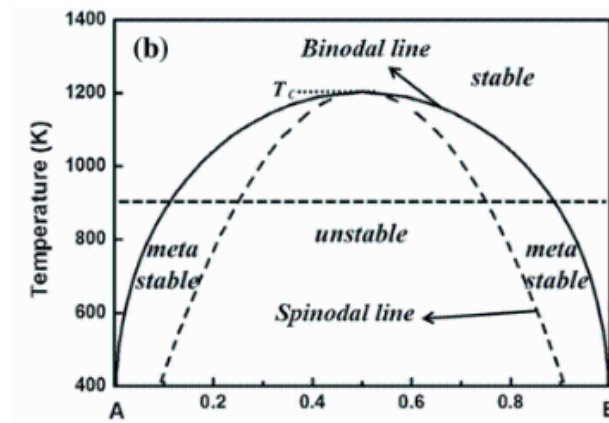


FIGURE D.1 – Exemple de diagramme de stabilité de phase pour un cas binaire, d'après

simple que celui de la zone métastable. Pour déterminer cette zone instable on calcule la matrice Hessienne définie tel que :

$$\bar{\bar{\mathbf{H}}}_{g^{liq}} = \frac{\partial^2 g^{liq}}{\partial \phi_i \partial \phi_j} \Big|_{T,P,\phi_k \neq i,j} = \frac{\partial^2 \Omega^*}{\partial \phi_i \partial \phi_j} \Big|_{T,P,\phi_k \neq i,j} \quad (\text{D.1})$$

L'égalité des matrices hessienne du pseudo-grand potentiel et de l'énergie libre de Gibbs est ici immédiate. D'après [10] les zones spinodale, instable et stable sont définies tel que :

- zone stable : $\text{eig} \left\{ \bar{\bar{\mathbf{H}}}_{g^{liq}} \right\} > 0$, deux phases coexistent
- spinodale : $\min \left(\text{eig} \left\{ \bar{\bar{\mathbf{H}}}_{g^{liq}} \right\} \right) > 0$, décomposition spinodale
- zone instable : $\text{eig} \left\{ \bar{\bar{\mathbf{H}}}_{g^{liq}} \right\} < 0$, une phase en présence

Le calcul des valeurs propres en chaque point du paysage pouvant être coûteux on rappelle que par théorème le produit des valeurs propres d'une matrice est égale au déterminant de cette matrice. Ainsi si on note λ_i les valeurs propres de $\bar{\bar{\mathbf{H}}}_{g^{liq}}$ on a :

$$\det \bar{\bar{\mathbf{H}}}_{g^{liq}} = \prod_i \lambda_i \quad (\text{D.2})$$

Pour le cas ternaire le calcul du déterminant est direct :

$$\det \bar{\bar{\mathbf{H}}}_{g^{liq}} = \frac{\partial^2 g^{liq}}{\partial \phi_i^2} \frac{\partial^2 g^{liq}}{\partial \phi_j^2} - \left(\frac{\partial^2 g^{liq}}{\partial \phi_i \partial \phi_j} \right)^2 \quad (\text{D.3})$$

Ainsi la zone instable correspond à la zone où le déterminant de la matrice hessienne est négatif.

ANNEXE E

Séquence de dégradation du cœur

D'après [11] voici le scénario de fonte du cœur :

- Entre 800 et 900 °C : L'augmentation de la pression à l'intérieur de la gaine en zirconium provoque un gonflement puis une rupture de cette dernière.
- Entre 900 et 1300 °C : Début de la réaction fortement exothermique d'oxydation de la gaine. A cet instant une forte proportion de la puissance thermique dégagée provient de cette réaction. La molécule d'eau est dissociée, l'oxygène est absorbé par la surface métallique et l'hydrogène est libéré. L'absorption de l'hydrogène dans les fissures du métal le fragilise davantage et accélère le processus de défaillance de la gaine. De plus l'apparition de fissure augmente la surface de réaction provoquant une accélération de la réaction.
- Entre 1300 et 1400 °C : Apparition d'alliages constitués des matériaux composant la gaine (principalement Zr) et de l'acier présent dans la cuve.
- Entre 1400 et 1500 °C : Fusion et rupture des structures métallique du cœur. Libération des composant en phase gazeuse du combustible.
- Entre 1500 et 1850 °C : Point de fusion du zirconium, dissolution du dioxyde d'uranium UO_2 par le zirconium en fusion, apparition de l'alliage (U,O,Zr)
- Entre 2000 et 2650 °C : Fusion du ZrO_2 , dissolution de l' UO_2 dans le ZrO_2 fondu et formation de la solution liquide $\text{UO}_2\text{-ZrO}_2$.