

Validation d'un modèle CFD multiphasique couplant transfert de masse interphase et hydrodynamique

Commisariat 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	8
2.2.1	Présentation générale	8
2.2.2	Équation de Cahn-Hilliard généralisée	9
2.2.3	Couplage avec les équations de Navier-Stokes incompressible	10
2.3	Paysage thermodynamique analytique	10
2.3.1	Introduction d'un pseudo-grand potentiel	10
2.3.2	Application pour un cas diphasique ternaire	11

Remerciements

CHAPITRE 1

Introduction et contexte

Ce premier chapitre présente l'équipe d'accueil ainsi que le contexte général de l'étude. Une présentation du parc électro-nucléaire français est faite. Une mise en contexte sur les accidents graves et la rétention du corium en cuve est ensuite présentée. Pour conclure un historique des travaux en lien avec le stage ainsi que l'objectif du stage sont exposés.

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 tels que les sciences 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) rattaché à l'Institut de REcherche sur les Systèmes Nucléaires pour la production d'Énergie bas carbone (IRESNE) 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 - Evolutionary 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 [1].

Les REP sont des réacteurs de la famille des réacteurs à eau légère, de l'eau ordinaire (H_2O) 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 éviter tout risque d'assèchement, le schéma de principe de fonctionnement est présenté par la figure 1.1.

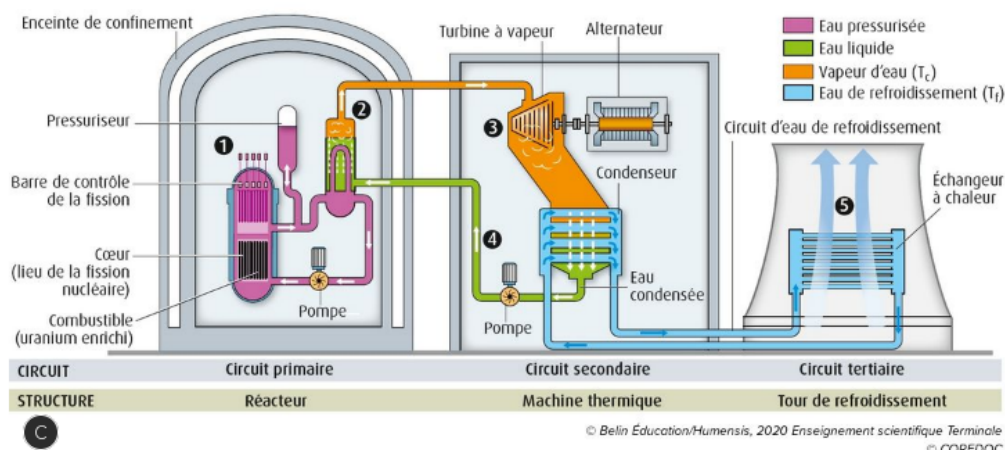


FIGURE 1.1 – Schéma de principe d'une centrale nucléaire de type REP, d'après [2]

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 dernier se matérialise par la mise en place de lignes de défense successives indépendantes. Les REP comptent trois barrières de confinement :

1. La gaine combustible, constituée de zircaloy (alliage de zirconium) qui piège les produits radioactifs et notamment les gaz de fission dans les pastilles de combustibles.
2. La cuve et l'ensemble du circuit primaire
3. Le bâtiment réacteur placé sous atmosphère dépressurisée, dernière barrière de confinement avant la contamination hors-site.

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 pour former un bain liquide issu du cœur fondu : le corium.

	CONSEQUENCES À L'EXTÉRIEUR DU SITE	CONSEQUENCES 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 intégrale 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 fixés par le guide AIEA*	Contamination grave / effets aigus sur la santé d'un travailleur	Accident évité de peu / perte des 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 [3]

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 ce qui entraîne une augmentation rapide de puissance thermique produite. L'accident de Tchernobyl en 1986, survenu sur un réacteur d'une technologie différente de celle des REP, est un exemple d'accident de criticité.

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 provoqué la perte d'alimentation électrique de la centrale, neutralisant ainsi l'ensemble des pompes.

Lors d'un accident de type APRP, l'élévation de la température dans le cœur provoque l'oxydation fortement exothermique des gaines en zircaloy. La puissance produite par cette oxydation est alors supérieure à la puissance résiduelle liée à la désintégration naturelle des radioéléments. Sans refroidissement suffisant l'augmentation de température provoque la fusion du combustible, puis des éléments de contrôle du cœur. Finalement le mélange issu de la fusion du combustible, des gaines partiellement oxydées et des structures internes du réacteur forme un bain liquide appelé corium. Le corium est un matériau fortement radioactif produisant sa propre chaleur, il est constitué d'uranium U, d'oxygène O, de zirconium Zr sous stœchiométrie ainsi que d'acier issu des structures. L'objectif est alors de maîtriser la propagation de ce liquide, pour cela deux stratégies existent : la rétention en fond de cuve avec refroidissement externe, *In-Vessel Retention*, *IVR* [4, 5]. Pour limiter les conséquences d'un accident cette stratégie vise à maintenir le corium au fond de la cuve réacteur. Pour cela un refroidissement à l'extérieur de la cuve est mis en place. Cette stratégie est étudiée depuis les années 90 et mise en œuvre sur des réacteurs de faible puissance. Une seconde stratégie, préférée pour les réacteurs de forte puissance, consiste à étaler le corium sur un radier en béton réfractaire [6]. Dans le cas de l'EPR, l'ablation du béton est limitée par un refroidissement passif mis en place sous le plancher, une fois le corium partiellement refroidi, celui-ci est finalement recouvert d'eau évitant ainsi une explosion de vapeur.

Dans la suite de ce rapport nous traiterons uniquement les cas d'accidents de type APRP et de rétention du corium en cuve *IVR*.

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

Le comportement du corium en fond de cuve est alors régi par deux principaux phénomènes [7] : la thermo-chimie détermine 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 pauvres en oxygène notées métal. Le second phénomène concerne la thermohydraulique du bain, avec un écoulement turbulent soumis à des rouleaux de convection (instabilité de Rayleigh-Bénard) dans la phase oxyde. 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 [8], 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). On distingue également l'apparition d'une croûte réfractaire issu de l'ablation de la cuve.

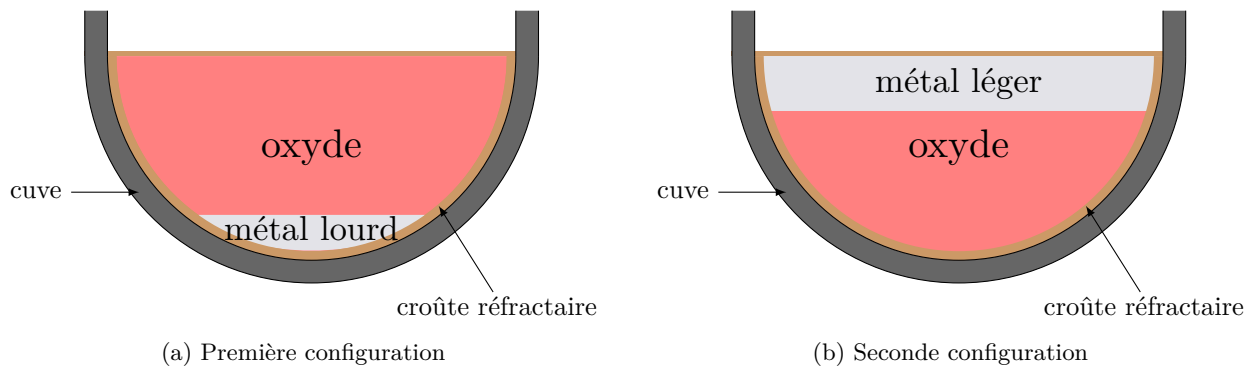


FIGURE 1.3 – Présentation des différents régimes de stratification possibles

L'objectif de la rétention en cuve est alors de maintenir ce bain jusqu'à sa solidification, le refroidissement est assuré par de l'eau dans le puits de 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 [9], diminuant ainsi la surface de contact et aggravant le "*focusing effect*", c'est pourquoi une modélisation en régime transitoire est désormais privilégiée. 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 :

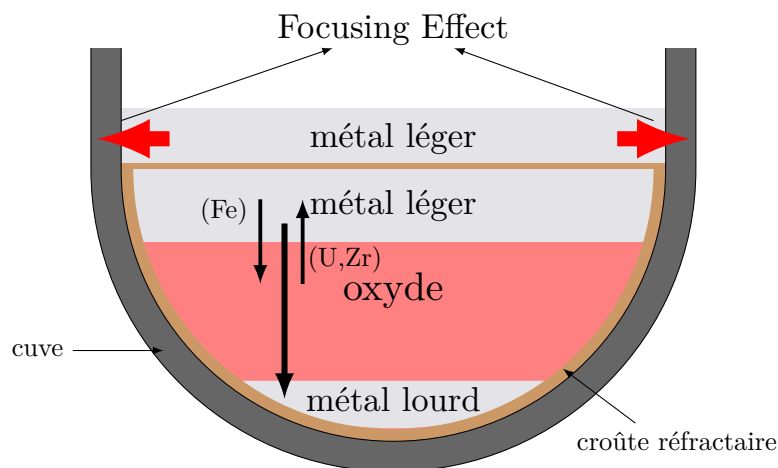


FIGURE 1.4 – Schéma du comportement du corium en fond de cuve en régime transitoire

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. Il existe peu de données expérimentales sur le comportement du corium en cuve du fait de la difficulté de réalisation expérimentale liée aux conditions de température supérieures à 2000K. MASCA RCW [10] est une des rares expériences sur la stratification ayant mis en jeu une quantité suffisante de matière pour retranscrire la cinétique d'un accident. Cet essai utilise du corium prototypique (non radioactif) chauffé par induction. Lors de l'essai 45kg de corium ont été mis en contact avec 4kg d'acier, cette configuration permet d'obtenir un régime stationnaire caractérisé par la présence d'une phase métallique lourde (figure 1.3a). L'essai a été arrêté avant que le système n'atteigne le régime stationnaire.

Une photo de la découpe du lingot est présentée en figure 1.5. On y observe la présence de gouttes formées par des instabilités de Rayleigh-Taylor issus de la couche métallique légère. Aucune expérience similaire n'a permis d'observer le phénomène de remontée de la phase métallique lourde.



FIGURE 1.5 – Résultat MASCA-RCW, d'après [11]

1.3 Objectif du stage

Le LMAG s'intéresse à la modélisation du transfert de masse mis en jeu lors de transitoires de stratification pour mieux comprendre le comportement d'un bain de corium en fond de cuve. Pour permettre une meilleure compréhension des phénomènes le laboratoire développe deux types d'outils. Le premier est un modèle intégral implémenté dans la plateforme logicielle PROCOR [12], développée au LMAG et utilisé par les industriels pour l'étude de la propagation du corium. Simultanément des recherches sont également menées pour obtenir une modélisation à des échelles CFD (*Computational Fluid Dynamic*) plus fines. Dans ce cadre une partie du laboratoire s'intéresse à la modélisation champ de phase pour considérer le transfert de masse interfaciale mis en jeu lors de transitoires de stratification.

Ce travail a commencé avec la thèse de C. Cardon [13] sur la diffusion d'espèce dans un système multicomposant diphasique et le paramétrage associé en lien avec les bases thermodynamiques. Dans le cadre du contrat post-doctoral de R. Zanella l'étude de la faisabilité d'un modèle pseudo-binaire (U-O) couplé à l'hydrodynamique a pu être menée. L'objectif été de reproduire qualitativement l'expérience MASCA-RCW [14, 15] en utilisant un code pseudo-spectral. Finalement dans la thèse de M.A. Rasolofomanana [16] le couplage entre un système multicomposant et multiphasique et l'hydrodynamique est réalisé au travers de l'implémentation de l'équation de Cahn-Hilliard généralisée dans TrioCFD [publi triocfd] (code CFD Open-source CEA). L'objectif du stage est de participer à la validation de cette implémentation en reproduisant une expérience de la littérature [17]. Cette expérience montre l'influence du transfert de masse sur la trajectoire d'une goutte multicomposants. Cette validation sera réalisée en utilisant une description analytique de l'énergie, la cohérence du paramétrage vis-a-vis d'un système binaire sera également étudiée. Une présentation complète de l'expérience est présente en section n° section .

Question : je n'ai pas trouver de publication pour triocfd, est ce que je mets celle en cours de rédaction ?

Question 2 : Pour l'objectif, faut il rédiger au présent/passé ou futur ?

CHAPITRE 2

Éléments théoriques sur la méthode de champ de phase

Ce deuxième chapitre résume l'ensemble des notions théoriques liées à la méthode champ de phase. Le couplage avec l'hydrodynamique est présenté puis une description analytique de l'énergie ainsi que les principales hypothèses du modèle sont introduites.

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 d'interface des méthodes de capture d'interface. Les méthodes de suivi d'interface suivent des marqueurs placés sur l'interface au cours du temps, la position de l'interface est alors explicite. 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 transportée suivant une description lagrangienne sur un maillage eulérien fixe. Ainsi les équations de Navier-Stokes sont résolues sur un maillage fixe tandis que l'équation régissant la position de l'interface est résolue sur un maillage mobile. La principale difficulté réside dans le choix des opérateurs de communication entre les deux maillages. Cette méthode nécessite l'implémentation d'algorithme pour les cas de coalescence et rupture d'interface et possède comme désavantage de ne pas être conservative.

2.2 Méthode champ de phase conservative

2.2.1 Présentation générale

Le traitement numérique de l'interface présente deux paradigmes : le premier traite l'interface comme une discontinuité. Le second modélise 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 est alors facilité. Ce concept d'interface diffuse date du XIX^{ème} siècle et est introduit par Van Der Walls [18].

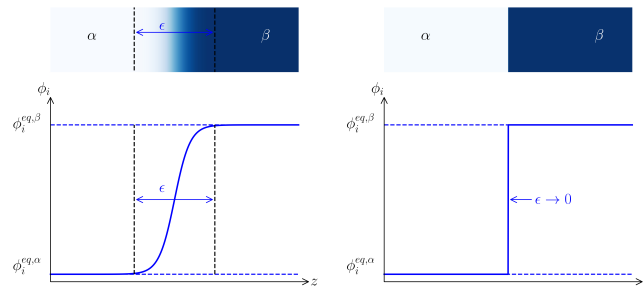


FIGURE 2.1 – Comparaison entre une interface diffuse (à gauche) et une interface raide (à droite)

Le concept d'interface diffuse va gagner l'intérêt de la communauté scientifique avec le développement de la méthode champ de phase. En 1950, Ginzburg et Landau propose une description de l'énergie libre d'un système tenant compte des inhomogénéités spatiales (interfaces) en fonction d'un paramètre d'ordre [19]. En 1958, Cahn et Hilliard [20] introduisent l'utilisation de cette description pour décrire l'évolution de la composition. Ces études sont la base de la méthode champ de phase. En effet la méthode champ de phase est basée sur la représentation d'un système au travers d'une fonctionnelle d'énergie libre, la description diffuse de l'interface et le suivi de paramètres d'ordre ϕ . La méthode champ de phase est aujourd'hui utilisée dans de nombreux domaines, certains sont présentés en figure 2.2.

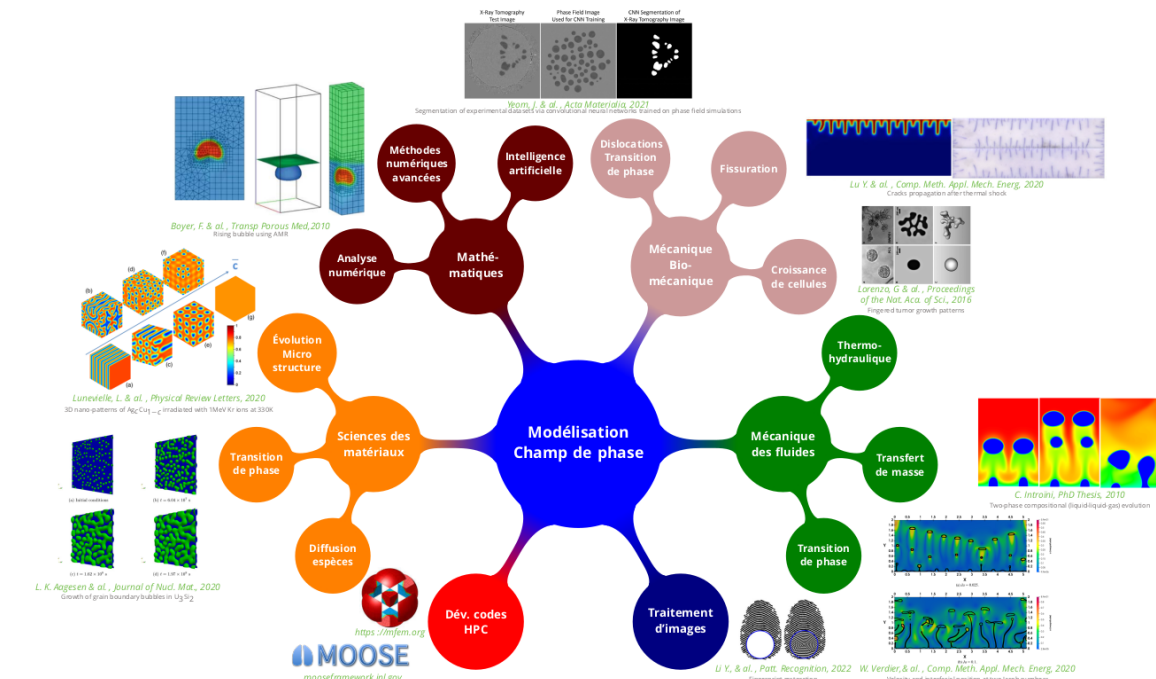


FIGURE 2.2 – Domaine d'application de la méthode champ de phase, tirée de [22]

2.2.2 Équation de Cahn-Hilliard généralisée

Dans le cas n -composants on note $\{\phi_i\}_{i=1,\dots,n}^1$ l'ensemble des paramètres d'ordre du système. Ces paramètres peuvent représenter la concentration, la fraction massique ou d'autres grandeurs. Comme expliqué précédemment la méthode de champ de phase repose sur le suivi de ces variables. Ces paramètres d'ordre peut être conservés ou non, dans notre étude les paramètres d'ordres sont conservés. De plus on considère un système fermé, ainsi on obtient la contrainte :

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

Ainsi pour un mélange à n composants, cette loi de fermeture permet de décrire l'ensemble du système en suivant l'évolution d'uniquement $n - 1$ composants. 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. Le comportement de ces variables est alors régi par des équations de réaction-diffusion dites d'Allen-Cahn, non résolue dans cette étude. 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} les coefficient de la mobilité (paramètre cinétique), ϕ_i le paramètre d'ordre, \mathbf{u} la vitesse et \mathbb{F} une fonctionnelle de Ginzburg-Landau généralisée [13] définit tel que :

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

Avec \mathbf{x} le vecteur position et V le volume. 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 [23] :

$$\left\{ \lambda \frac{\partial \tilde{g}}{\partial \phi_i} \Big|_{\phi_i^{\alpha,eq}} = \lambda \frac{\partial \tilde{g}}{\partial \phi_i} \Big|_{\phi_i^{\beta,eq}} = \tilde{\mu}_i^{eq} \right. \quad (2.4a)$$

$$\left. \lambda \tilde{g}^{\alpha,eq} - \sum_{i=1}^{n-1} \tilde{\mu}_i^{eq} \phi_i^{\alpha,eq} = \lambda \tilde{g}^{\beta,eq} - \sum_{i=1}^{n-1} \tilde{\mu}_i^{eq} \phi_i^{\beta,eq} \right. \quad (2.4b)$$

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

Le second terme représente la contribution des interfaces, le coefficient κ_{ij} , 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 dérivée variationnelle de cette fonctionnelle d'énergie libre peut être définie comme un potentiel de diffusion $\tilde{\mu}$:

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

avec λ un paramètre d'*upscaling* numérique ajouté pour augmenter l'épaisseur de l'interface. Cet élargissement de l'interface permet d'utiliser des maillages réalistes compte tenu des capacités de calcul actuelles.

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

$$\begin{cases} \tilde{\mu}_i = \frac{\lambda}{V_m} \hat{\mu}_i \\ \hat{\mu}_i = \mu_i - \mu_n \end{cases} \quad (2.6a)$$

$$\quad (2.6b)$$

Avec $\tilde{\mu}_i$ (en J.m^{-3}) représente le potentiel de diffusion volumique de l'élément i , $\hat{\mu}_i$ (en J.mol^{-1}) le potentiel de diffusion molaire et V_m le volume molaire supposé constant dans tout le système.²

Dans le cas où $\bar{\kappa} = \bar{0}$ on retrouve une équation d'advection-diffusion classique, dans le cas contraire on obtient

1. Par soucis de simplification on pourra également utiliser la notation $\{\phi\}$
2. Dans le cadre de ce rapport on note $\hat{\cdot}$ les grandeurs volumiques

une équation d'ordre 4. Pour un système binaire le gradient d'énergie et le paramètre d'*upscaling* peuvent être déterminés analytiquement. Dans le cas d'une modélisation à n-composants cette approche analytique ne fonctionne plus. Ainsi une des principales difficultés de la mise en place de la méthode champ de phase dans les cas n-aires est l'obtention de ces paramètres. Dans la suite de ce travail nous utiliserons une proposition de paramétrage introduite par [24] et présentée en annexe ???. Cette paramétrisation permet de déterminer les paramètres d'*upscaling* λ et le gradient d'énergie $\bar{\kappa}$ en fonction des paramètres physiques du système, la tension de surface σ et l'épaisseur d'interface ϵ . Ce paramétrage est construit de façon à être consistant vis-à-vis d'un système binaire.

$$\begin{cases} \bar{\kappa} = \frac{\sigma\epsilon}{\xi_1\xi_2}\delta_{ij} \\ \lambda = \frac{\xi_2\sigma}{2\epsilon\xi_1} \end{cases} \quad (2.7a)$$

$$\quad (2.7b)$$

avec ξ_1, ξ_2 deux constantes dépendantes de la description thermodynamique adoptée, δ_{ij} le symbole de Kronecker.

2.2.3 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. Kim J. [25] présente un modèle *one fluid* avec densité variable dans le terme de flottabilité. Les équations de Navier-Stokes s'écrivent sous la forme :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \\ \rho^* \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla P + \eta \Delta \mathbf{u} + \sum_{i=1}^{n-1} \tilde{\mu}_i \nabla \phi_i + \rho(\{\phi_i\}) \mathbf{g} \end{cases} \quad (2.8a)$$

$$\quad (2.8b)$$

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, $\rho(\{\phi_i\})$ une loi de densité fonction du paramètre d'ordre.

L'hypothèse du volume molaire constant nous impose que la loi de densité soit une combinaison linéaire des masses volumiques des corps purs que l'on écrit sous la forme :

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

Les paramètres β_i sont à déterminer en fonction du système étudié, $\rho(\phi_n)$ correspond à une masse volumique de référence, généralement celle du solvant.

2.3 Paysage thermodynamique analytique

2.3.1 Introduction d'un pseudo-grand potentiel

L'objectif présenté dans [24] est 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. 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 [13].

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

avec g l'énergie libre de Gibbs (J.mol^{-1})³, utilisé comme grandeur d'intérêt ici puisque le système est supposé isotherme et isobare.

3. En utilisant l'hypothèse du volume molaire constant il est possible d'écrire $\tilde{g} = g/V_m$

2.3.2 Application pour un cas diphasique ternaire

Comme présenté au chapitre ?? le cas d'intérêt de l'étude est le corium. Ce système comprend deux phases à l'équilibre et donc deux points d'équilibre distinct. Ainsi [24] introduit une formulation sous la forme d'un double puits de la forme :

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

Où P^{dis} , P^{cont} représentent deux paraboloïdes correspondant aux deux phases en présence à l'équilibre notées dispersée (ou drop) et continue. Dans le cas ternaire, en considérant les éléments d'intérêt notés miscible (*misc*) et immiscible (*immi*) :

$$P^k = \left(\frac{\cos(\theta^k) (\phi_{misc} - \phi_{misc}^{eq,k}) + \sin(\theta^k) (\phi_{immi} - \phi_{immi}^{eq,k})}{a_{misc}^k} \right)^2 + \left(\frac{-\sin(\theta^k) (\phi_{misc} - \phi_{misc}^{eq,k}) + \cos(\theta^k) (\phi_{immi} - \phi_{immi}^{eq,k})}{a_{immi}^k} \right)^2 \quad (2.12)$$

Avec $k = \{disp, cont\}$ la phase (dispersée ou continue), a_{misc}^k (resp. a_{immi}^k) 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 :

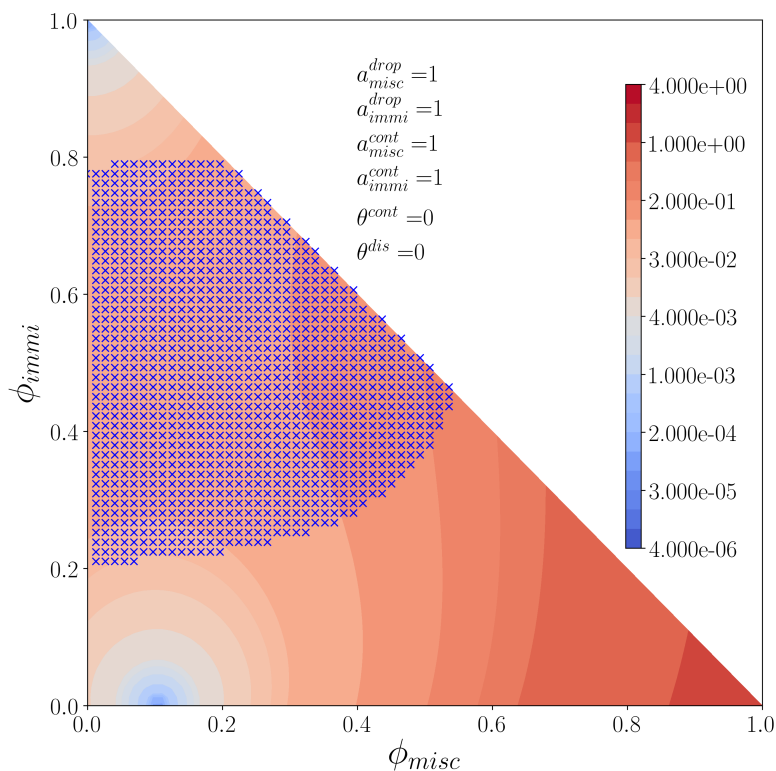


FIGURE 2.3 – Exemple de paysage thermodynamique, la zone bleu représente la zone instable

La zone instable correspond à la zone où la séparation de phase a lieu, la détermination de cette zone est obtenue d'après [26]. Une formulation analytique de cette forme permet d'éviter un couplage entre solveur d'équilibre thermodynamique (Open-Calphad par exemple) et le code CFD. Le temps de développement est alors fortement réduit. De plus, dans le cas d'un système sans données thermodynamiques, la formulation permet d'obtenir des simulations qualitatives. Dans le cas d'un système complètement décrit thermodynamiquement il suffit de trouver la formulation analytique qui convient (via un *fit* par exemple).

Bibliographie

- [1] « Emmanuel Macron annonce la construction de nouveaux réacteurs nucléaires de type EPR ». In : *Le Figaro* (9 nov. 2021). Section : Économie. URL : <https://www.lefigaro.fr/economie/emmanuel-macron-annonce-la-construction-de-nouveaux-reacteurs-nucleaires-de-type-epr-20211109> (visité le 19/06/2023).
- [2] *Le Manuel numérique max - Belin Education*. URL : https://manuelnumeriquemax.belin.education/enseignement_scientifique-terminale/topics/simple/es-tle-c06-134-04 (visité le 19/06/2023).
- [3] *INES : échelle internationale des événements nucléaires et radiologiques*. 27 avr. 2011. URL : <https://www.connaissancedesenergies.org/fiche-pedagogique/echelle-ines> (visité le 19/06/2023).
- [4] Guobao SHI et al. « CAP1400 IVR related design features and assessment ». In : *Nuclear Engineering and Design* 346 (mai 2019), p. 35-45. ISSN : 00295493. DOI : [10.1016/j.nucengdes.2019.03.002](https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2019.03.002). URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0029549319300366> (visité le 16/03/2023).
- [5] J.-M SEILER et al. « Etudes et stratégies pour la rétention du corium ». In : *Revue Générale Nucléaire* (1^{er} jan. 2010), p. 63-72. DOI : [10.1051/rgn/20101063](https://doi.org/10.1051/rgn/20101063).
- [6] François BOUTEILLE et al. « The EPR overall approach for severe accident mitigation ». In : *Nuclear Engineering and Design* 236.14 (août 2006), p. 1464-1470. ISSN : 00295493. DOI : [10.1016/j.nucengdes.2006.04.013](https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2006.04.013). URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0029549306003244> (visité le 19/06/2023).
- [7] A. SHAMS et al. « Status of computational fluid dynamics for in-vessel retention : Challenges and achievements ». In : *Annals of Nuclear Energy* 135 (jan. 2020), p. 107004. ISSN : 03064549. DOI : [10.1016/j.anucene.2019.107004](https://doi.org/10.1016/j.anucene.2019.107004). URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0306454919305067> (visité le 19/06/2023).
- [8] T.G. THEOFANOUS et al. « In-vessel coolability and retention of a core melt ». In : *Nuclear Engineering and Design* 169.1 (juin 1997), p. 1-48. ISSN : 00295493. DOI : [10.1016/S0029-5493\(97\)00009-5](https://doi.org/10.1016/S0029-5493(97)00009-5). URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0029549397000095> (visité le 19/06/2023).
- [9] R. LE TELLIER, L. SAAS et S. BAJARD. « Transient stratification modelling of a corium pool in a LWR vessel lower head ». In : *Nuclear Engineering and Design* 287 (juin 2015), p. 68-77. ISSN : 00295493. DOI : [10.1016/j.nucengdes.2015.02.009](https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2015.02.009). URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0029549315000916> (visité le 19/06/2023).
- [10] D. F. TSURIKOV et al. *Main Results of the MASCA1 and 2 Projects : Integrated Report*. URL : https://www.oecd-neo.org/jcms/pl_18510/main-results-of-the-masca1-and-2-projects-integrated-report?details=true.
- [11] 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).
- [12] R. LE TELLIER, L. SAAS et F. PAYOT. « Phenomenological analyses of corium propagation in LWRs : the PROCOR software platform ». In : *Proc. of the 7th European Review Meeting on Severe Accident Research ERMSAR-2015, Marseille, France* (2015).
- [13] Clément CARDON. « Modélisation de la diffusion multi-composants dans un bain de corium diphasique oxyde-métal par une méthode d'interface diffuse ». These de doctorat. Université Paris-Saclay (ComUE), 21 nov. 2016. URL : <https://www.theses.fr/2016SACLX096> (visité le 12/04/2023).

- [14] R. ZANELLA et al. « Two- and three-dimensional simulations of Rayleigh–Taylor instabilities using a coupled Cahn–Hilliard/Navier–Stokes model ». In : *Physics of Fluids* 32.12 (1^{er} déc. 2020), p. 124115. ISSN : 1070-6631, 1089-7666. DOI : [10.1063/5.0031179](https://doi.org/10.1063/5.0031179). URL : <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/5.0031179> (visité le 09/03/2023).
- [15] R. ZANELLA et al. « Three-dimensional numerical simulation of droplet formation by Rayleigh–Taylor instability in multiphase corium ». In : *Nuclear Engineering and Design* 379 (août 2021), p. 111177. ISSN : 00295493. DOI : [10.1016/j.nucengdes.2021.111177](https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2021.111177). URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0029549321001291> (visité le 16/06/2023).
- [16] 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.
- [17] 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).
- [18] J. S. ROWLINSON. « Translation of J. D. van der Waals' "The thermodynamik theory of capillarity under the hypothesis of a continuous variation of density" ». In : *Journal of Statistical Physics* 20.2 (1^{er} fév. 1979), p. 197-200. ISSN : 1572-9613. DOI : [10.1007/BF01011513](https://doi.org/10.1007/BF01011513). URL : <https://doi.org/10.1007/BF01011513> (visité le 22/06/2023).
- [19] Lev LANDAU et Evguéni LIFCHITZ. *Physique Théorique : Physique Statistique*. 4^{ème} éd édition. Moscou Paris : ELLIPSES, 15 mai 1995. 592 p. ISBN : 978-2-7298-9463-4.
- [20] 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://pubs.aip.org/aip/jcp/article/28/2/258-267/74794). URL : <https://pubs.aip.org/aip/jcp/article/28/2/258-267/74794> (visité le 07/06/2023).
- [21] John W. CAHN. « Free Energy of a Nonuniform System. II. Thermodynamic Basis ». In : *The Journal of Chemical Physics* 30.5 (13 août 2004), p. 1121-1124. ISSN : 0021-9606. DOI : [10.1063/1.1730145](https://doi.org/10.1063/1.1730145). URL : <https://doi.org/10.1063/1.1730145> (visité le 23/06/2023).
- [22] 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*.
- [23] S. G. KIM, W. T. KIM et T. SUZUKI. « Phase-field model for binary alloys ». In : *Physical Review. E, Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics* 60.6 (déc. 1999), p. 7186-7197. ISSN : 1063-651X. DOI : [10.1103/physreve.60.7186](https://doi.org/10.1103/physreve.60.7186).
- [24] M.A. RASOLOFOMANANA, R. LE TELLIER et H. HENRY. *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).
- [25] 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).
- [26] 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).