

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

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives
Cadarache 13115 Saint-Paul-lès-Durance
Laboratoire de Modélisation des Accidents Graves, LMAG
27/02/2023 - 11/08/2023

Clément Plumecocq



POLYTECH Marseille - Mécanique Energétique

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

Encadrant : Mirantsoa-Aimé Rasolofomanana, Doctorant LMAG

Tuteur école :

Résumé

Qu'est que c'est?. C'est une phrase français avant le lorem ipsum. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Abstract

Qu'est que c'est?. C'est une phrase français avant le lorem ipsum. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Table des matières

1	Introduction	3
2	Présentation des accidents graves dans les réacteurs à eau pressurisée	4
2.1	Fonctionnement d'un réacteur à eau pressurisée	4
2.2	Sûreté des REP	5
2.3	Traitement des accidents graves	6
3	Modélisation par une méthode champ de phase	7
3.1	Méthode d'interface diffuse	7
3.2	Equation de Cahn-Hilliard généralisée	7
3.3	Couplage avec les équations de Navier-Stokes incompressible	9
3.4	Paysage thermodynamique analytique	9
3.5	Élément de stabilité de phase	10
3.6	Évaluation des paraboloïdes	11

Contexte et remerciements

CHAPITRE 1

Introduction

CHAPITRE 2

Présentation des accidents graves dans les réacteurs à eau pressurisée

2.1 Fonctionnement d'un réacteur à eau pressurisée

En France 56 réacteurs nucléaires dispersés sur 18 sites de type réacteur à eau pressurisée (REP) sont actuellement en service. Ces réacteurs représentent 70% de la production électrique dans l'hexagone en 2019 d'après RTE et en 2018 la France a été le deuxième plus gros producteur d'énergie nucléaire après les États-Unis. Les puissances fournies par ces réacteurs varient entre 900 MWe et 1450 MWe. Les réacteurs français actuellement en fonctionnement sont dit de deuxième génération. Un réacteur de troisième génération d'une puissance de 1650 MWe (EPR - European pressurized reactor) est actuellement en construction sur le site de Flamanville, ce type de réacteur prend en compte le retour d'expérience des réacteurs actuels. La construction de 6 nouveaux EPR a été annoncée et 8 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 à 157 bar pour éviter un changement d'état liquide-gaz dans le circuit primaire et ainsi obtenir un meilleur coefficient d'échange thermique, ainsi à l'entrée du condenseur la température du circuit primaire est de 350°C.

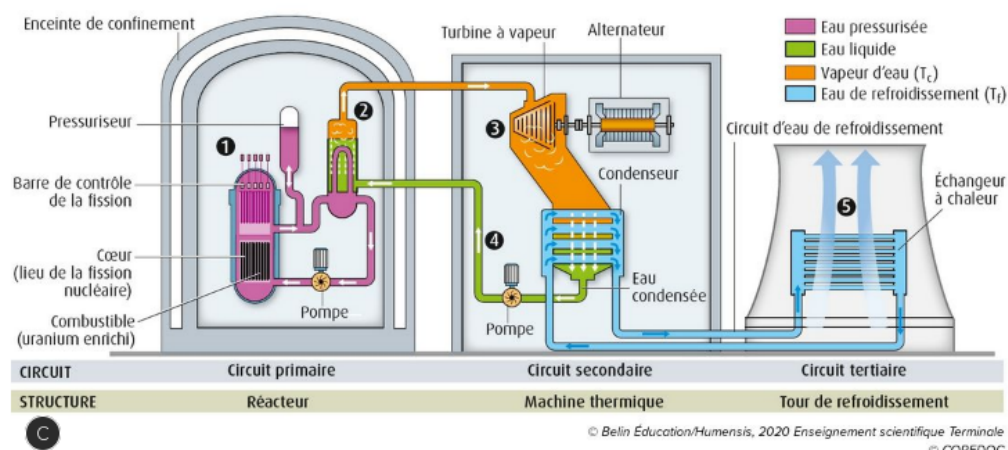


FIGURE 2.1 – Schéma de principe d'une centrale nucléaire de type REP, (d'après manuelnumerique-max.belin.education)

2.2 Sûreté des REP

Les questions de sûreté sont intrinsèquement liées à l'exploitation d'une centrale nucléaire tant les conséquences d'un potentiel 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. Pour les REP on compte 3 barrières de confinement de la radioactivité :

1. La gaine combustible
2. La cuve
3. Le bâtiment réacteur

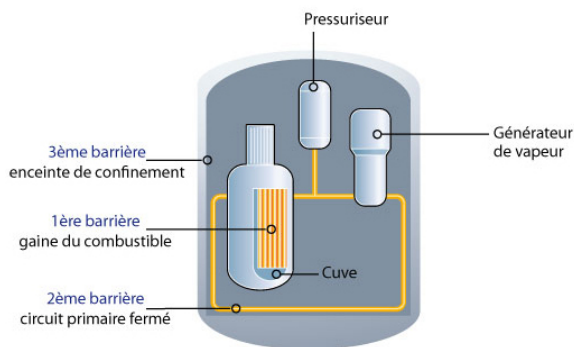


FIGURE 2.2 – Schéma des barrières de confinement (d'après irsn.fr)

De plus les variations par rapport au régime nominal sont classées selon l'échelle INES (International Nuclear Scale Event), cette échelle permet de classer les accidents et leur gravité, elle comporte huit échelons allant d'un simple écart (plusieurs centaines de cas par an en France) à l'accident majeur. 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 résultante de la fusion du cœur, le produit de cette fusion 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 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 fixées 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 2.3 – Echelle de classification des écarts aux régimes nominal INES (d'après ASN)

Les accidents possibles dans les REP sont séparés en deux grandes catégories, les accidents de réactivité et les Accidents de Perte de Réfrigérant Primaire (APRP). Les accidents de réactivité sont dus à une accélération brutale de la réaction en chaîne entraînant une augmentation de puissance thermique produite. Les Accidents de Perte de Réfrigérant Primaire (APRP) résultent quant à eux d'une fuite dans le circuit primaire ou un arrêt de la circulation du fluide caloporteur. Dans la suite nous traiterons uniquement de cette seconde famille d'accident. D'après [1] 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 $\text{UO}_2\text{-ZrO}_2$.

Une fois le cœur fondu celui-ci se relocalise dans le fond de la cuve réacteur et il devient nécessaire d'adopter une stratégie pour refroidir ce bain.

2.3 Traitement des accidents graves

Une fois le cœur fondu et relocalisé en fond de cuve, deux stratégies s'opposent quant à la rétention du corium : la rétention en cuve (IVR : In-Vessel Retention) ou hors cuve (EVR : Ex-Vessel Retention), la stratégie IVR présente l'avantage de garder intacte la seconde barrière de confinement contrairement à l'EVR, cependant sa mise en œuvre sur des réacteur de forte puissance n'est actuellement pas validée.

CHAPITRE 3

Modélisation par une méthode champ de phase

3.1 Méthode d'interface diffuse

Les méthodes de suivi d'interfaces peuvent se découper en deux principaux paradigme concernant le traitement de l'interface, cette dernière peut être raide ou diffuse. Dans le second cas l'interface est modélisé comme une zone de transition d'épaisseur connue entre les deux phases ou les deux fluides cohabitent de manière à ce que les variables observé varient de manière continu, facilitant ainsi le traitement numérique de l'interface.

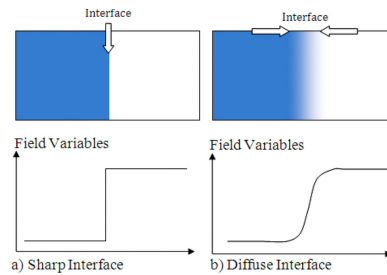


FIGURE 3.1 – Schéma d'une interface raide et d'une interface diffuse, tirée de [2]

L'interface est alors suivi implicitement grâce à une fonction champ de phase qui est définie à partir de grandeurs thermodynamiques. Cette fonction champ de phase prend des valeurs constantes et connue dans chaque phase. Dans la suite on notera cette variable champ de phase ϕ . Cette méthode est utilisée dans de nombreux domaines.

3.2 Equation 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 la phase i et contraint tel que :

$$\sum_i \phi_i = 1 \quad (3.1)$$

ainsi pour N phase on a :

$$\phi_N = 1 - \sum_{i=1}^{N-1} \phi_i \quad (3.2)$$

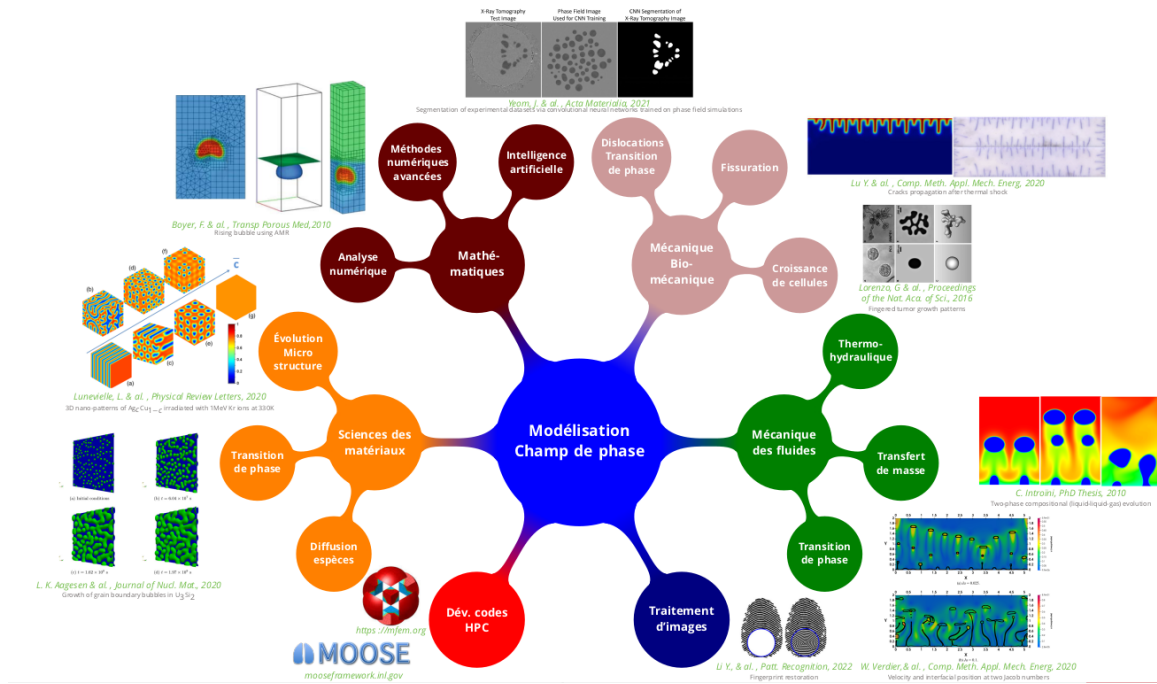


FIGURE 3.2 – Domaine d’application de la méthode champ de phase, tirée de [3]

Ainsi pour un mélange à N composant on suit uniquement $N - 1$ phases. L’équation de Cahn-Hillard pour N composants, avec $i \in \{1, \dots, N\}$

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{u} \phi_i = \nabla \cdot \left(\sum_{j=1}^{N-1} \frac{\mathcal{M}_{ij}}{\lambda} \nabla \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \phi_j} \right) \quad (3.3)$$

avec : \mathcal{M}_{ik} la mobilité (paramètre cinétique), ϕ le paramètre d’ordre.
on définit le potentiel chimique $\tilde{\mu}$ tel que :

$$\mathcal{F} = \int_V f_0(\phi, \mathbf{x}, t) - \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=1}^{N-1} \frac{\kappa_{ij}}{2} \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j dV \quad (3.4)$$

Où le premier terme représente la densité d’énergie liée au volume et le second terme l’énergie liée aux interfaces. κ est alors un coefficient de gradient.

De tel sorte que :

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \phi_j} = \frac{\partial f_0}{\partial \phi_j} - \sum_{k=1}^{N-1} \kappa_{jk} \Delta \phi_k = \mu_j \quad (3.5)$$

avec $\tilde{\mu}$ le potentiel chimique.

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.

3.3 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 avec l'hypothèse de Boussinesq. On rappelle les équations de Navier-Stokes avec ces hypothèses :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (3.6)$$

$$\rho(\phi) \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla P + \eta(\phi) \Delta \mathbf{u} + \sum_{i=1}^{N-1} \tilde{\mu}_i \nabla \phi_i + \rho(\phi) \mathbf{g} \quad (3.7)$$

avec \mathbf{u} la vitesse, P la pression, $\tilde{\mu}_i$ le potentiel chimique du composant i , $\mathbf{g} = -g\mathbf{e}_z$, η la viscosité cinématique, ρ la masse volumique

La densité est alors calculé :

$$\rho(\phi) = \rho_0 \left(1 + \sum_{i=1}^{N-1} \beta_i \phi_i \right) \quad (3.8)$$

Les paramètres β sont à déterminer en fonction du système étudié, ρ_0 correspond à une masse volumique de référence. L'équation de Cahn-Hilliard étant d'ordre 4, une résolution implicite est préférée pour la suite de ce travail.

3.4 Paysage thermodynamique analytique

L'objectif est de déterminer le paramètre de densité d'énergie liée au volume f_0 . Dans l'hypothèse de température et pression constante on écrit :

$$\tilde{\mu}_i = \left. \frac{\partial g^{liq}}{\partial \phi_i} \right|_{P, T, \phi_j \neq i} \quad (3.9)$$

Avec α un pré-facteur correctif et g^{liq} l'énergie libre de Gibbs par unité de volume. On définit également un pseudo grand potentiel correspondant à l'énergie nécessaire pour changer de minimum d'énergie.

$$\Omega^* = \Omega - \Omega^{eq} = g^{liq} - \sum_i \tilde{\mu}_i^{eq} \phi_i - \left(g^{liq, eq} - \sum_i \tilde{\mu}_i^{eq} \phi_i^{eq} \right) \quad (3.10)$$

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 que l'on note :

$$\Omega^* = P^{dis} \times P^{cont} \quad (3.11)$$

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

$$P^k = \left(\frac{\cos(\theta^k) (\phi_A - \phi_A^{eq,k}) + \sin(\theta^k) (\phi_B - \phi_B^{eq,k})}{a_A^k} \right)^2 + \left(\frac{-\sin(\theta^k) (\phi_A - \phi_A^{eq,k}) + \cos(\theta^k) (\phi_B - \phi_B^{eq,k})}{a_B^k} \right)^2 \quad (3.12)$$

Avec $k = \{disp, cont\}$ la phase (dispersée ou continue), a_A (respectivement a_B) le demi-grand (resp petit) puits, θ_k l'angle de rotation associé au puits de la phase k

On cherche alors à tracer ce paysage.

On retrouve dès lors le potentiel chimique grâce à la formulation analytique (3.11) :

$$\begin{aligned}\tilde{\mu}_i &= \frac{\partial}{\partial \phi_i} \left\{ \Omega^* + \sum_j \tilde{\mu}_j^{eq} \phi_j + \left(g^{liq,eq} - \sum_j \tilde{\mu}_j^{eq} \phi_j^{eq} \right) \right\} \\ &= \frac{\partial \Omega^*}{\partial \phi_i} + \frac{\partial g^{liq,eq}}{\partial \phi_i} + \sum_j \frac{\partial \tilde{\mu}_j^{eq} (\phi_j - \phi_j^{eq})}{\partial \phi_i}\end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned}\frac{\partial g^{liq,eq}}{\partial \phi_i} &= 0 \\ \sum_j \frac{\partial \tilde{\mu}_j^{eq} (\phi_j - \phi_j^{eq})}{\partial \phi_i} &= \tilde{\mu}_i^{eq} + \tilde{\mu}_{j \neq i}^{eq} \frac{\partial \phi_{j \neq i}}{\partial \phi_i} = \tilde{\mu}_i^{eq}\end{aligned}$$

car les variables sont indépendantes. Finalement on écrit :

$$\tilde{\mu}_i = P^{dis} \frac{\partial P^{cont}}{\partial \phi_i} + P^{cont} \frac{\partial P^{dis}}{\partial \phi_i} + \tilde{\mu}_i^{eq} \quad (3.13)$$

L'objectif est alors de déterminer les paramètres des paraboloïdes pour obtenir des résultats constants.

3.5 Élément de stabilité de phase

Le calcul du paysage nous permet d'avoir des informations sur l'énergie du système pour une certaine composition, cependant on ne connaît aucunement le nombre de phase du système. On cherche alors à déterminer la phase instable ou les deux éléments sont mélangés. Pour cela on calcul la matrice Hessienne définit tel que :

$$\bar{\bar{\mathbf{H}}}_{g^{liq}} = \frac{\partial^2 g^{liq}}{\partial \phi_i \partial \phi_j} \bigg|_{T,P,\phi_k \neq i,j} = \frac{\partial^2 \Omega^*}{\partial \phi_i \partial \phi_j} \bigg|_{T,P,\phi_k \neq i,j} \quad (3.14)$$

L'égalité des matrices hessienne du pseudo-grand potentiel et de l'énergie libre de Gibbs est ici immédiate. D'après [4] les zones spinodale, instable et stable sont définit tel que :

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

$$\det \bar{\bar{\mathbf{H}}}_{g^{liq}} = \prod_i \lambda_i \quad (3.15)$$

Pour le cas ternaire le calcul du déterminant est direct :

$$\det \bar{\bar{\mathbf{H}}} = \frac{\partial^2 g^{liq}}{\partial \phi_i^2} \frac{\partial^2 g^{liq}}{\partial \phi_j^2} - \left(\frac{\partial^2 g^{liq}}{\partial \phi_i \partial \phi_j} \right)^2 \quad (3.16)$$

3.6 Évaluation des paraboloides

L'objectif est de paramétrer les paraboloides afin d'obtenir des valeurs proches de la réalité. Malheureusement du au trop grand nombre de paramètres, les algorithmes de fit 'classique' ne converge pas vers une solution satisfaisante.

Pour remédier à ce problème on découpe le problème en deux sous problèmes :

1. On transforme le produit des deux paraboloides en un polynôme de degré 4
2. On résout un système linéaire liant les coefficients polynomiaux aux paramètres des paraboloides

Ainsi on exprime :

$$\Omega^* = \sum_{i,j} c_{ij} \phi^{misc^i} \phi^{immi^j} \quad (3.17)$$

Bibliographie

- [1] 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. URL : <https://link.springer.com/10.1007/978-3-319-15156-4> (visité le 12/04/2023).
- [2] Nima SAMKHANIANI et Mohamad Reza ANSARI. « The evaluation of the diffuse interface method for phase change simulations using OpenFOAM ». In : *Heat Transfer—Asian Research* 46.8 (2017). _eprint : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/htj.21268>, p. 1173-1203. ISSN : 1523-1496. DOI : 10.1002/htj.21268. URL : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/htj.21268> (visité le 16/03/2023).
- [3] 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*.
- [4] 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. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378381216306227> (visité le 17/04/2023).