

Validation et amélioration 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 :

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 et accidents graves pour les REP | 5 |
| 2.3 | Stratégie de rétention du corium en fond de cuve (IVR) | 7 |
| 3 | Modélisation par une méthode champ de phase | 8 |
| 3.1 | Méthode d'interface diffuse | 8 |
| 3.2 | Equation de Cahn-Hilliard généralisée | 8 |
| 3.3 | Couplage avec les équations de Navier-Stokes incompressible | 10 |
| 3.4 | Paysage thermodynamique analytique | 10 |
| 3.5 | Éléments de stabilité de phase | 11 |
| 3.6 | Évaluation des paraboloïdes | 12 |
| 3.7 | Expérience numérique | 12 |
| 3.7.1 | Choix des conditions initiales | 12 |

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.

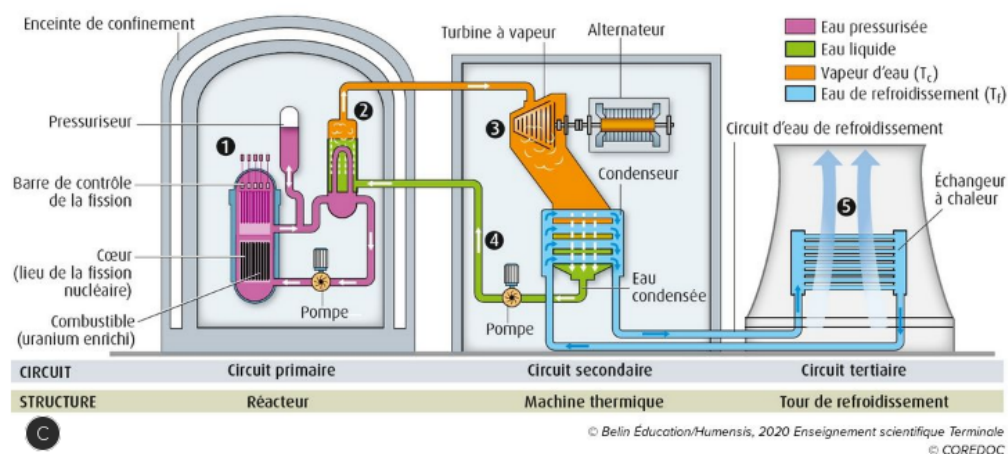
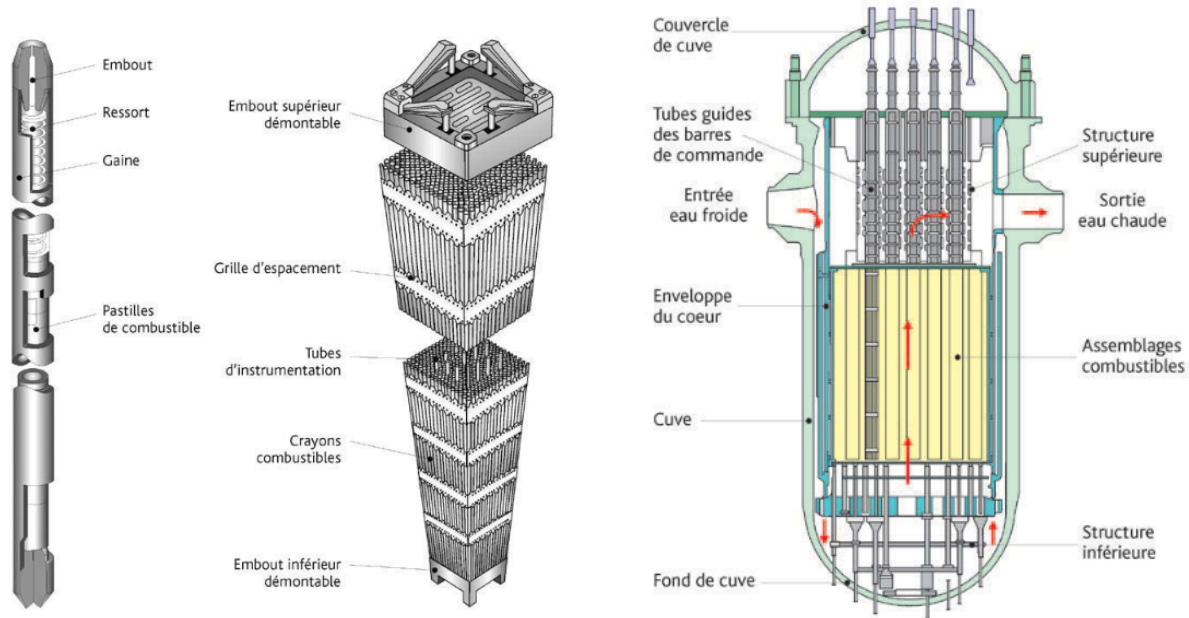


FIGURE 2.1 – Schéma de principe d'une centrale nucléaire de type REP, (d'après manuelnumerique-max.belin.education)

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 155 bar pour éviter un changement d'état liquide-gaz dans le circuit primaire et ainsi obtenir un meilleur coefficient d'échange thermique, à l'entrée de la cuve la température de l'eau est 290°C et la température de sortie de cuve en fonctionnement nominal est de 330°C.

Le cœur du réacteur est composé d'assemblage combustible comportant chacun 264 crayons combustibles, 24 tubes pouvant contenir les crayons d'une grappe de commande ainsi qu'un tube servant à l'instrumentation. La gaine est constituée de Zircaloy qui est un alliage composé principalement de Zirconium (Zr), les pastilles ont un diamètre de 8.2mm et sont empilées dans une gaine d'épaisseur 0.6mm et d'une longueur d'environ 4m (dépendante du palier du réacteur). Le zirconium est utilisé pour sa bonne résistance à la corrosion et sa faible absorption neutronique. Chaque cœur est composé d'un ensemble d'assemblage combustible (241 pour l'EPR, embarquant au total 144.2 tonnes d'uranium enrichi) qui doivent être renouvelé périodiquement tous les 12 à 18 mois par quart ou tiers de cœur.



(a) Schéma d'un crayon combustible et d'un assemblage combustible

(b) Schéma d'ensemble de d'une cuve d'un REP

FIGURE 2.2 – Schéma des constituants d'un cœur de réacteur de type REP d'après [1]

2.2 Sûreté et accidents graves pour les REP

Les questions de sûreté sont intrinsèquement liées à l'exploitation d'une centrale nucléaire tant les conséquence d'un potentiel accident peuvent être importante. 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

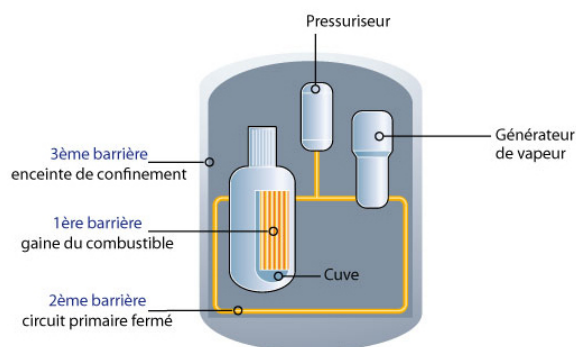


FIGURE 2.3 – Schéma des barrières de confinement (d'après irsn.fr)

De plus les variation par rapport au régime nominal sont classés selon l'échelle INES (International Nuclear Scale Event), cette échelle permet de classer les accident et leurs 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.

| | 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 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 2.4 – Echelle de classification des écarts aux régimes nominal INES (d'après ASN)

Les accidents possible 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 [2] 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 $(\text{U},\text{O},\text{Zr})$
- 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 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.

Les premières études du comportement du bain de corium ont été réalisées pour des bains stationnaires. Il a été montré qu'en régime stationnaire le bain est stratifié avec 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 et donc être en dessous) ou légère. 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). Des études plus récentes ont montré que le transitoire reste plus contraignant et fait donc l'objet d'étude plus poussée. 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 localisée au dessus de la couche d'oxyde et une couche de métal lourd en fond de cuve ainsi qu'une croûte située entre les phases liquides et la cuve est également présente. Finalement on se retrouve dans la situation suivante :

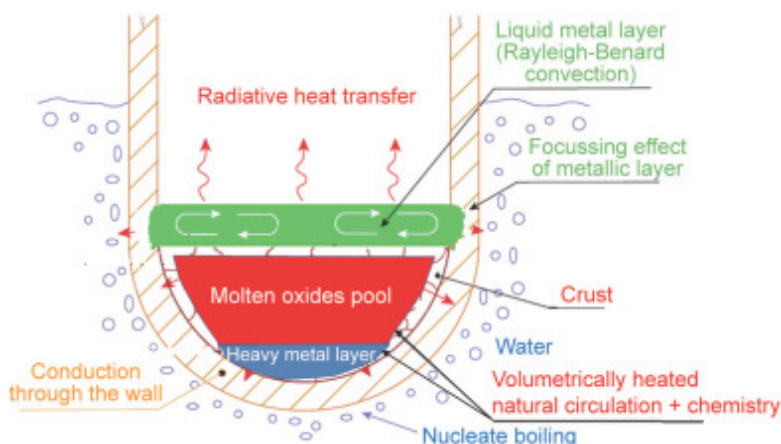


FIGURE 2.5 – Schéma du comportement du corium en fond de cuve, d'après pourlascience.fr

La couche de métal lourd est dû à un transfert de masse entre la phase oxyde et métal léger créant des gouttes d'acier lourd se relocalisant en fond de cuve. Les différents essais expérimentaux nous permettent de savoir que la phase de métal lourd se forme via des gouttes, cependant la remontée de la phase lourde vers la phase légère n'a jamais été observée.

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 continuellement, facilitant ainsi le traitement numérique de l'interface, les gradient à l'interface n'étant plus infinis.

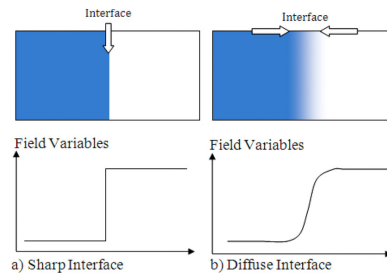


FIGURE 3.1 – Schéma d'une interface raide et d'une interface diffuse, tirée de [3]

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 :

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

Soit pour la N -ième phase on a :

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

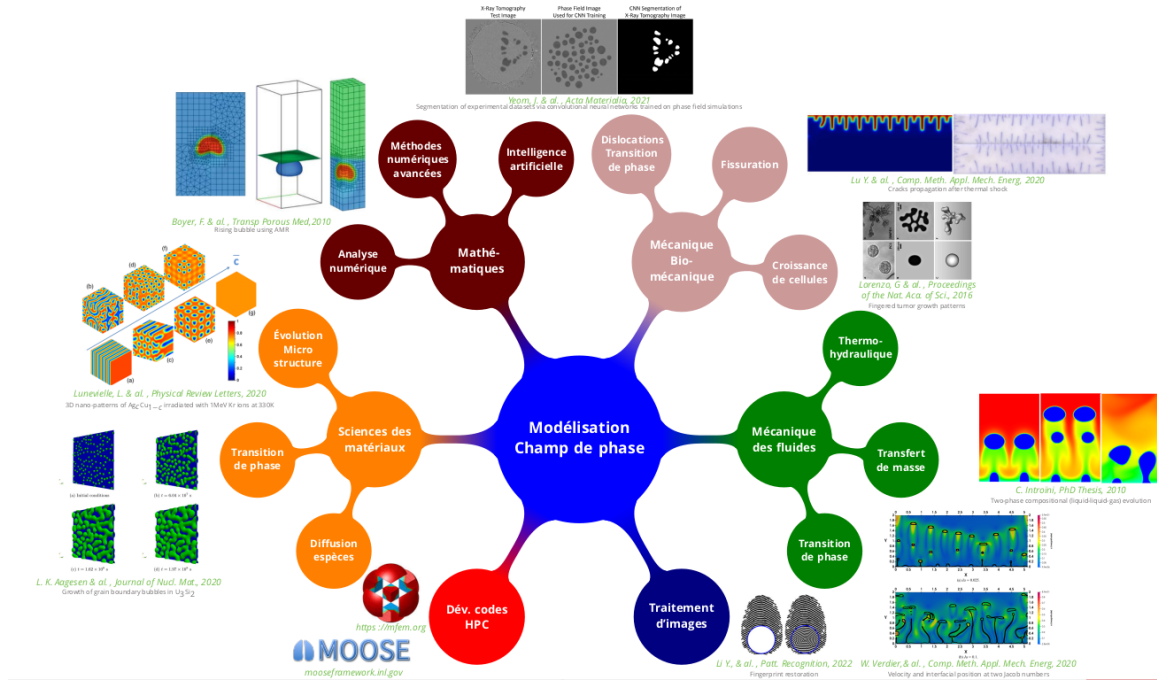


FIGURE 3.2 – Domaine d'application de la méthode champ de phase, tirée de [4]

Ainsi pour un mélange à N composants, seul $N-1$ équations de Cahn-Hilliard sont à écrire. Finalement les équations de Cahn-Hilliard pour N composants, avec $i \in \{1, \dots, N-1\}$ s'écrivent sous la forme :

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

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 définit tel que :

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

Où le premier terme représente la densité d'énergie liée au volume et le second terme l'énergie liée aux interfaces que l'on pourra relier, par la suite, à la tension de surface. κ est alors un coefficient de gradient.

Finalement la dérivé variationnelle de cette fonctionnelle d'énergie libre peut être définit comme un potentiel de diffusion $\tilde{\mu}$:

$$\frac{\partial \mathbb{F}}{\partial \phi_j} = \lambda \frac{\partial f_0}{\partial \phi_j} - \sum_{k=1}^{N-1} \kappa_{jk} \Delta \phi_k = \tilde{\mu}_j \quad (3.5)$$

avec μ_j le potentiel chimique de l'espèce j et λ un paramètre d'upscaling 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 petit éléments.

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 en utilisant l'approximation de Boussinesq. Finalement d'après [5] le système d'équation s'écrit sous la forme :

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

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

avec \mathbf{u} la vitesse, P la pression, μ_i le potentiel chimique du composant i , $\mathbf{g} = \{0, 0, -g\}^T$, η la viscosité cinématique, ρ^* la masse volumique du solvant

La densité est alors calculé :

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

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 :

$$\tilde{\mu}_i = \left. \frac{\partial g^{liq}}{\partial \phi_i} \right|_{P, T, \phi_j \neq i} = \frac{1}{V_m} (\mu_i^{eq} - \mu_N^{eq}) \quad (3.9)$$

Avec $\tilde{\mu}_i$ (en J.m^{-3}) représente le potentiel de diffusion de l'élément i à l'équilibre, g^{liq} (en J.m^{-3}) l'énergie libre de diffusion de Gibbs et V_m le volume molaire. 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 paraboloïdes correspondant à la phase dispersée et continue. Dans le cas ternaire, avec les éléments A et B , les paraboloïdes sont de la forme :

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

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 Éléments 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 :

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

L'égalité des matrices hessienne du pseudo-grand potentiel et de l'énergie libre de Gibbs est ici immédiate. D'après [6] 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 le trop grand nombre de paramètres, ne permettent pas la convergence des algorithmes de fit 'classique'.

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 liant les coefficients polynomiaux aux paramètres des paraboloides

Ainsi on exprime :

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

On note alors $\Gamma = \phi^{misc^i} \phi^{immi^j}$ la matrice contenant les variables du polynôme, $\mathbf{c} = c_{ij}$ le vecteur contenant les coefficient polynomiaux et Θ le vecteur contenant les valeurs issus d'Open-CALPHAD. Ainsi on cherche à résoudre :

$$\Gamma \mathbf{c} = \Theta \quad (3.18)$$

Or on a $\text{cond}(\Gamma) \simeq 20626 \gg 1$ ainsi le problème est mal conditionné (sur-déterminé) et les résultats ne peuvent être satisfaisant.

3.7 Expérience numérique

L'objectif est de refaire numériquement l'expérience proposée par Abhijit Rao et al. dans [7]. Pour cette expérience une goutte composée d'Acetonitrile et de Chlorobenzene est placée dans de l'eau. l'acetonitrile est miscible dans l'eau contrairement au chlorobenzene qui est immiscible. Initialement la goutte est plus légère que l'eau environnante et monte puis sous l'effet du transfert de masse la densité de la goutte augmente jusqu'à une inversion du rapport de densité conduisant à la redescende de la goutte.

3.7.1 Choix des conditions initiales

Les conditions initiales choisies pour la concentration sont de la forme tangente hyperbolique.

$$\phi_i(\mathbf{x}, t = 0) = \frac{\phi_i^{init,cont} + \phi_i^{init,disp}}{2} + \frac{\phi_i^{init,cont} - \phi_i^{init,disp}}{2} \tanh \left(\frac{\sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2} - R}{\varepsilon} \right) \quad (3.19)$$

Avec (x_0, y_0) les coordonnées du centre de la goutte, R le rayon de la goutte, ε l'épaisseur de l'interface (paramètre numérique) et $\phi_i^{init,cont}$ (resp. $\phi_i^{init,disp}$) la concentration initiale de l'élément i dans la phase continue (resp. dispersée) .

Cette solution analytique provient d'un problème avec une interface plane (sans courbure), dans la littérature il n'existe pas de solution analytique pour une interface courbée, l'effet de Gibbs-Thomson n'est donc pas pris en compte, ainsi on observe un léger mouvement de l'interface lors du premier pas de temps.

Pour cette expérience, le caractère sphérique de la goutte est supposé vrai sur toute la durée de la simulation, pour s'assurer de la sphéricité de la goutte on calcul le nombre adimensionné de Bond qui represente le ratio entre les forces de gravité et la tension de surface tel que :

$$Bo = \frac{\Delta \rho g D^2}{\sigma} \quad (3.20)$$

avec $\Delta\rho$ la différence de densité entre les deux phases, D le diamètre de la goutte et σ la tension de surface.

On considère que pour $Bo \ll 1$ la tension de surface domine et la goutte reste sphérique.

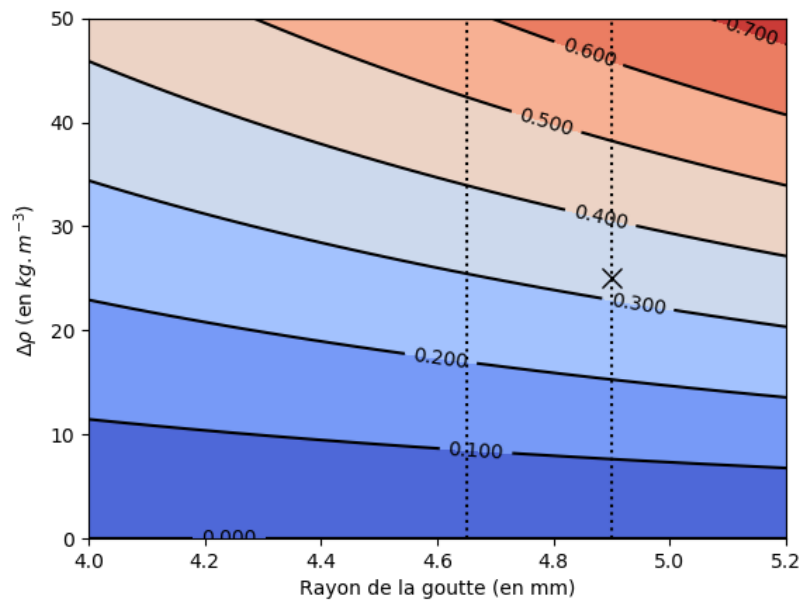


FIGURE 3.3 – Valeur du nombre de Bond en fonction de la différence de densité et de la tension de surface entre les phases, le marqueur représente l'état initial

Il est alors possible, dans notre cas, de discuter de la sphéricité de la goutte au vu de la valeur ici $Bo = 0.32$

Bibliographie

- [1] Bernard CLÉMENT et al. *Les accidents de fusion du coeur des réacteurs nucléaires de puissance : Etat des connaissances*. Sous la dir. de Didier JACQUEMAIN. EDP Sciences, 4 nov. 2020. ISBN : 978-2-7598-1846-4. DOI : 10.1051/978-2-7598-1846-4. URL : <https://www.degruyter.com/document/doi/10.1051/978-2-7598-1846-4/html> (visité le 03/05/2023).
- [2] 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).
- [3] 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).
- [4] 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*.
- [5] 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. URL : <https://www.cambridge.org/core/journals/communications-in-computational-physics/article/phasefield-models-for-multicomponent-fluid-flows/0672FBD318BBE2621A51AE0F2C9C2FE3> (visité le 04/05/2023).
- [6] 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).
- [7] 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. URL : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/aic.14612> (visité le 29/03/2023).