HAL
open science

Instabilité et dispersion de jets de corium liquides : analyse des processus physiques et modélisation dans le logiciel MC3D

Sebastian Castrillon Escobar

To cite this version:

Sebastian Castrillon Escobar. Instabilité et dispersion de jets de corium liquides : analyse des processus physiques et modélisation dans le logiciel MC3D. Mécanique des fluides [physics.class-ph]. Université de Lorraine, 2016. Français. NNT : 2016LORR0102 . tel-01438841

HAL Id: tel-01438841

https://theses.hal.science/tel-01438841v1

Submitted on 18 Jan 2017

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

UNIVERSITÉ DE LORRAINE

AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4
Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10
http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php
http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm

Ecole doctorale Energie Mécanique et Matériaux

Instabilité et dispersion de jets de corium liquides : Analyse des processus physiques et modélisation dans le logiciel MC3D

THESE

Soutenue publiquement le

13 Septembre 2016

Pour obtenir le grade de

Docteur de l'Université de Lorraine

Spécialité : Mécanique et Energétique

Présenté par

Sebastian CASTRILLON ESCOBAR

Préparée au Laboratoire d'études du Physique de Corium

IRSN (Institut de Radioprotection et de Sureté Nucléaire)

Et

LEMTA (Laboratoire d'énergétique et de mécanique théorique et appliquée)

Composition du jury

Rapporteurs :	M. Stéphane ZALESKI	Professeur, Université Pierre et Marie Curie
	M. Sergei SAZHIN	Professeur, Université de Brighton
Examinateurs :	M. Bruno TOURNIAIRE	Docteur-ingénieur, EDF
	M. Hervé COMBEAU	Professeur, Université de Lorraine
Encadrants :	M. Michel GRADECK	Professeur, Université de Lorraine, LEMTA
	M. Renaud MEIGNEN	Docteur-ingénieur, IRSN
	M. Nicolas RIMBERT	Maitre de conférences, ESSTIN-LEMTA
Invité :	M. Pascal PILUSO	Docteur-ingénieur, CEA

REMERCIEMENTS

Tout d'abord, je voudrais remercier l'IRSN pour m'avoir permis d'effectuer cette thèse au sein du pôle de la sureté des réacteurs, dans le laboratoire de physique du corium. Je remercie également le programme RSNR, l'agence nationale de la recherche et les divers partenaires du projet ICE. Les diverses présentations, discussions et tâches engagées m'ont orienté et motivé pour avancer dans mes recherches.

Pendant ces années de thèse, mes encadrants m'ont soutenu constamment envers le progrès scientifique et académique. Les conseils quotidiens, les fructueuses discussions sur le plan technique et toutes leurs suggestions m'ont permis de mener à bien cette thèse. Je remercie mes encadrants Renaud Meignen et Nicolas Rimbert, ainsi que mon directeur de thèse Michel Gradeck. Merci pour votre patience et pour tous vos enseignements.

Je tiens à remercier les rapporteurs et membres du jury de thèse, tout d'abord pour leur temps dédié à la lecture du manuscrit, pour leurs remarques et les discussions. Celles-ci m'ont permis de progresser, de perfectionner et d'améliorer certains éléments de ma thèse.

Les développements dans le code MC3D doivent beaucoup aux travaux de Stephane Picchi et Guillaume Astier. Je tiens à remercier les corrections apportées et les développements effectués. De plus, merci pour la bonne ambiance de travail et les discussions techniques sur les modifications apportées dans MC3D.

Je remercie tous les membres du LEMTA et particulièrement Miloud Hadj-Achour pour la réalisation de mesures expérimentales de fragmentation de gouttes et des jets de métaux liquides. Ceux-ci m'ont beaucoup motivé et aidé pour mener à bien divers éléments des simulations numériques des fragmentations de gouttes. Le chapitre de simulations numériques doit beaucoup aux personnes qui ont développé l'outil GERRIS et spécialement à Gaurac Tomar et Daniel Fuster pour le développement et implémentation du module de suivi lagrangien de particules.

Cette thèse n'aurait pas pu être menée à terme sans le soutien constant de ma mère, Andrea et mon frère. Ils sont les personnes auxquelles je voudrais dédier cette thèse. Je les remercie sincèrement pour leur soutien, leur compagnie à tout moment et surtout pour leur amour.

TABLE DE MATIERES

REMERCIEMENTS **2**

TABLE DE MATIERES **3**

NOMENCLATURE **7**

INTRODUCTION **10**

ENJEUX DE LA CARACTERISATION DU PREMELANGE ET HYPOTHESES GENERALES SUR LA MODELISATION DE LA FRAGMENTATION DU CORIUM 12

CONTEXTE DE LA RECHERCHE SUR LE PHENOMENE 15

PLAN DE LA THESE 15

1 CHAPITRE 1 : ETAT DE L'ART DU PROBLEME DE LA FRAGMENTATION DES JETS DE CORIUM DANS L'INTERACTION CORIUM – EAU **17**

1.1 PANORAMA GENERAL DU CONTEXTE ET DE PHENOMENE DE L'ICR 17

1.1.1 L'ICR pendant les accidents graves 17

1.1.2 Phase de Prémelange pendant l'ICR 19

1.1.3 Phase d'explosion pendant l'ICR 20

1.2 SYNTHESE DES ESSAIS LES PLUS IMPORTANTS 21

1.2.1 Essais FITS 23

1.2.2 Essais CCM 23

1.2.3 Essais FARO 23

1.2.4 Essais KROTOS-ISPRA 24

1.2.5 Essais KROTOS-CEA 24

1.2.6 Expériences TROI 26

1.2.7 Conclusion sur les essais 27

1.3 PHENOMENOLOGIE DE L'ICR 29

1.3.1 Vortex (front du jet) 29

1.3.2 Déstabilisation et fragmentation de la colonne du jet 30

1.3.3 Longueur de rupture 30

1.3.4 Fragmentation du corium 32

1.3.5 Instabilites et fragmentation du jet 32

1.3.6 Fragmentation des gouttes 34

1.3.7 Echelles de longueur-diamètre gouttes 35

1.3.8 Vaporisation du réfrigérant 37

1.4 MODELISATION DE LA PHASE DE PREMELANGE DE L'ICR 39

1.4.1 Modèles analytiques 39

1.4.2 Modélisation codes de calcul CFD 41

1.4.3 Modélisation MC3D 43

2 CHAPITRE 2 : PHYSIQUE DE LA FRAGMENTATION DES JETS ET DES GOUTTES LIQUIDES **45**

2.1 FRAGMENTATION DE JETS 45
2.2 FRAGMENTATION PRIMAIRE 47
2.2.1 Instabilités primaires 47
2.2.2 Processus de fragmentation 50
2.2.3 Modélisation de la fragmentation du jet 53
2.3 FRAGMENTATION SECONDAIRE 57
2.3.1 Mécanismes de stabilisation, impact de la solidification 58
2.3.2 Aspect dynamique de la fragmentation secondaire 59
2.3.3 Régimes de fragmentation 59
2.3.4 Taille de gouttes 61
2.3.5 Revue des modèles les plus courants 62
2.3.6 Distribution de taille de particules 65
2.3.1 Coefficient de trainée 66
2.3.2 Solidification et stabilité de gouttes 68
2.3.3 Modélisation de la fragmentation secondaire 69
2.3.4 Fragmentation en milieu diphasique 70
3 CHAPITRE 3 : OBJECTIFS ET TRAVAUX DE THESE 72
4 CHAPITRE 4 : METHODOLOGIE ET MODELISATION DE LA FRAGMENTATION DES JETS DE CORIUM DANS LE LOGICIEL MC3D 76
4.1 MODELISATION MUDROPS 76
4.1.1 Discrétisation de la distribution 78
4.2 MODELISATION DE LA FRAGMENTATION DES JETS DE CORIUM DANS LE LOGICIEL MC3D 82
4.2.1 Fragmentation secondaire 82
4.2.2 Fragmentation primaire 88
4.2.3 Modelisation couplée de la fragmentation des jets 91
4.3 CONCLUSIONS DE LA MODELISATION DE LA FRAGMENTATION DE JETS ET DES GOUTTES DANS MC3D 100
5 CHAPITRE 5 : METHODOLOGIE DE SIMULATION NUMERIQUE DE LA FRAGMENTATION DE GOUTTES 101
5.1 DISCRETISATION SPATIALE 102
5.2 CRITERES DE RAFFINEMENT 103
5.2.1 GB (critère basé sur le gradient) 103
5.2.2 CB (critère basé sur la courbure) 103
5.2.3 TB (critère basé sur l'épaisseur) 104
5.2.4 Pré-dimensionnement du maillage 104
5.3 TEST DE CRITERES DE RAFFINEMENT 105
5.4 SUIVI LAGRANGIEN DE PARTICULES 108
6 CHAPITRE 6 : SIMULATIONS DE LA FRAGMENTATION D'UNE GOUTTE DE METAL LIQUIDE DANS UN ECOULEMENT D'EAU 110
6.1 GRILLE DE CALCUL 111
6.2 DESCRIPTION DU PROCESSUS DE FRAGMENTATION D'UNE GOUTTE 111

6.2.1 Régime oscillatoire (We < 6): 115
6.2.2 Régime de fragmentation par élongation (6 < We < 12) 123
6.2.3 Régime de fragmentation par rupture de nappe (12 < We < 18) 127
6.2.4 Régime de fragmentation par rupture de nappe et enroulement autour de l'anneau tourbillonnaire (18 < We < 180) 130
6.2.5 Régime d'arrachement, de distorsion et de rupture (We > 180) 133
6.3 ANALYSE GENERALE DE LA FRAGMENTATION SECONDAIRE 135
6.4 CONCLUSIONS SUR LA MODELISATION DE LA FRAGMENTATION SECONDAIRE DE GOUTTES 138
7 CONCLUSIONS 139
8 ANNEXES 142
8.1 DEFINITION DES DIAMETRES MOYENS 142
8.1.1 Diamètre de Sauter moyen 142
8.1.2 Diamètre médian 143
8.2 MODELE D'INSTABILITE DE KELVIN-HELMHOLTZ 143
8.3 ESSAIS DE FRAGMENTATION DE JETS DE METAUX LIQUIDES A BASSE TEMPERATURE, SANS EBULLITION DU REFRIGERANT 145
8.4 LOI LOG-NORMALE 154
8.4.1 Loi log-normale 154
8.5 MODELISATION PREMEL 154
8.5.1 Fragmentation secondaire en premel 155
8.5.2 Résultats préliminaires 156
8.5.3 Modélisation couplée de la fragmentation 157
8.6 FICHE DU TEST FARO-L28 158
8.7 INSTABILITE DE RAYLEIGH-PLATEAU ET RUPTURE DE LIGAMENT 161
8.7.1 Analyse linéaire d'instabilité 162
8.7.2 Solution auto-similaire (ordre de grandeur) 163
8.8 DISTRIBUTION EN MASSE, EN VOLUME ET EN NOMBRE 164
8.9 ESTIMATION DES ERREURS DE DISCRETISATION ET OPTIMISATION 166
8.10 INITIALISATION DE LA SIMULATION DE FRAGMENTATION DE GOUTTES 170
8.11 MODELE ANALYTIQUE D'OSCILATION 171
8.11.1 Ecoulement à l'intérieur de la goutte 172
8.11.2 Terme d'énergie cinétique 172
8.11.3 Terme de dissipation visqueuse 172
8.11.4 Terme d'énergie de surface 172
8.11.5 Terme de travail de pression 172
8.11.6 Equation d'oscillation de la goutte 173
8.12 DETECTION DE VORTEX: CRITERE $\lambda 2$ 173
8.13 ALGORITHME DE SQUELETTISATION 175
8.14 VARIATION DES CARACTERISTIQUES DU VORTEX ET DEPENDANCE DU CRITERE $\lambda 2$ 177
8.15 COEFFICIENT DE TRAINEE PENDANT LA FRAGMENTATION SECONDAIRE 178

8.16 COMPARAISON DE LA SIMULATION DE LA FRAGMENTATION DE GOUTTES EN CONFIGURATION GALLIUM-EAU ET ALUMINE-EAU 179
8.16.1 Régime de fragmentation par élongation 180
8.16.2 Régime de fragmentation par rupture du sac 181
8.16.3 Régime d'enroulement de la nappe autour du vortex et fragmentation de la nappe ...181
BIBLIOGRAPHIE 182
RESUME.....188
MOTS CLES.....188
ABSTRACT.....188
KEYWORDS.....188

NOMENCLATURE

N_d	Coefficient de proportionnalité entre la taille de gouttes générées et la longueur d'onde du modèle d'instabilité de Kelvin-Helmholtz
N_f	Coefficient de taux de fragmentation
C_v	Coefficient de vitesse d'éjection
D_i	Diamètre du jet $(i = j)$ ou diamètre de gouttes $(i = d)$ $[m]$
$f_{(d)}$	Fonction de distribution des gouttes et fragments
α_i	Fraction massique de la phase i
h_c	Hauteur d'eau $[m]$
h_{chute}	Hauteur de chute $[m]$
h	Instabilité à l'interface (Instabilité de Kelvin-Helmholtz)
L_R	Longueur de rupture du jet (Jet break-up length)
λ	Longueur d'onde de l'instabilité $[m]$
m_j	Masse du jet injecté $[kg]$
ρ_i	Masse volumique de la phase i $\left[\frac{kg}{m^3}\right]$
N_c	Nombre de classes (modèle MUSIG)
k	Nombre d'onde de l'instabilité $\left(k = \frac{2\pi}{\lambda}\right)$
Δt	Pas de temps $[s]$
r d	Rayon de la goutte ou du fragment $[m]$ Diamètre de la goutte ou du fragment $[m]$
Γ_{frag}	Taux de fragmentation
T	Température $[K]$
τ_d	Temps caractéristique pour la fragmentation secondaire $[s]$
σ_{ij}	Tension de surface entre les phases i et j $\left[\frac{N}{m}\right]$
μ_i	Viscosité dynamique de la phase i $[Pa * s]$
C_i	Vitesse caractéristique de l'instabilité $\left[\frac{m}{s}\right]$
V_e	Vitesse d'éjection de gouttes $\left[\frac{m}{s}\right]$
U_i, V_i	Vitesse de la phase i $\left[\frac{m}{s}\right]$
V_0	Vitesse initiale $\left[\frac{m}{s}\right]$
ΔV_{ij}	Vitesse relative entre les phases i et j $\left[\frac{m}{s}\right]$

Sous-indices et sur-indices

f	Fragments
$fille$	Goutte fille (Modélisation de la fragmentation secondaire)
0	Goutte mère (Modélisation de la fragmentation secondaire)
j	Phase continue (Jet)
c	Phase continue (réfrigérant)
g	Phase continue environnante gaz
l	Phase continue environnante liquide
d	Phase disperse (Gouttes)
lig	Ligament

Liste d'acronymes

ICR ou ICE	Interaction corium-réfrigérant (eau)
ICB	Interaction corium-béton
KH	Kelvin-Helmholtz (modèle d'instabilité de cisaillement à l'interface)
$MC3D$	Code de calcul multiphasique développé par l'IRSN en collaboration avec le CEA. Code principalement dédie à l'étude de l'ICR
$PREMEL$	Application de MC3D utilisée pour le calcul de la phase de prémélange de l'ICR (Un seul champ de gouttes)
$MUDROPS$	Application de MC3D utilisée pour le calcul de la phase de prémélange de l'ICR (Plusieurs champs de masse et d'énergie pour la phase dispersée)
$D_{0,50}$	Diamètre médian de masse, défini en annexe 8.1 $[m]$
SMD	Diamètre moyen de Sauter, définie en annexe 8.1 $[m]$
$DDRMIN$	Diamètre minimum de fragments (Variable du jeu de données de $MC3D$) $[m]$
$DMAX$	Diamètre maximum de gouttes (Variable du jeu de données de $MC3D$) $[m]$
REP	Réacteur à eau pressurisée
REB	Réacteur à eau bouillante

Nombres sans dimensions:

We_{ch}	Nombre caractéristique de Weber
We_{cr}	Nombre critique de Weber
Oh	Nombre d'Ohnesorge
Re	Nombre de Reynolds

Nombre de Weber	$We_i = \frac{\rho_i \mathrm{D} \Delta V^2}{\sigma}$
Nombre de Reynolds	$Re_i = \frac{\rho_i \mathrm{D} \Delta \mathrm{V}}{\mu_i}$
Nombre d'Ohnesorge	$Oh_i = \frac{\mu_i}{\sqrt{\rho_i D_i \sigma}} = \frac{\sqrt{We_i}}{Re_i}$

INTRODUCTION

Cette thèse se déroule dans le cadre de la recherche en sûreté des réacteurs nucléaires. Dans une situation d'accident grave dans un réacteur nucléaire où les assemblages combustibles fondent, le matériau résultant, couramment appelé corium, peut interagir avec le réfrigérant. Ce phénomène est appelé Interaction Corium-Réfrigérant (ICR) ou FCI pour Fuel-Coolant Interaction en anglais. Sous certaines conditions, l'interaction peut devenir explosive, nous parlons alors d'explosion de vapeur. Le type de réfrigérant peut varier en fonction du type de réacteur, cependant dans notre cas nous considérons l'eau comme réfrigérant, tel que dans les réacteurs du type REP (réacteur à eau pressurisée) ou REB (réacteur à eau bouillante).

Un accident grave est défini comme une situation dans laquelle le cœur du réacteur est dégradé partiellement ou totalement à cause de l'augmentation de sa température due à la perte de refroidissement assurée par le fluide caloporteur (Jacquemain, 2013); en effet, la puissance résiduelle du combustible ne parvient plus à être évacuée. Dans un réacteur type REB ou REP, le corium ainsi produit peut interagir avec le réfrigérant, selon deux configurations, dites en-cuve et hors-cuve (voir Figure 0-1). La configuration en-cuve a lieu lors de la relocalisation du bain de corium dans le fond de la cuve (TMI-2 et très probablement Fukushima). Si ce dépôt du corium en fond de cuve perce celle-ci, le corium peut alors se déverser et interagir avec l'eau présente dans le puits de cuve (cas hors-cuve). Historiquement, c'est la situation en-cuve qui a en premier lieu été analysée. Le risque étudié était celui d'une explosion qui engendrerait un détachement du couvercle de cuve qui irait impacter l'enceinte de confinement. Ce risque a été jugé, après analyse, comme très peu probable, voire physiquement impossible (Theofanous and Yuen, 1995). La défaillance du bas de cuve, lieu de l'explosion a par la suite été également jugée peu probable, même si des doutes subsistent. Ainsi, la configuration qui retient maintenant l'attention est celle-hors cuve, du fait de la relativement faible résistance des structures en béton armée par rapport à celle de la cuve.

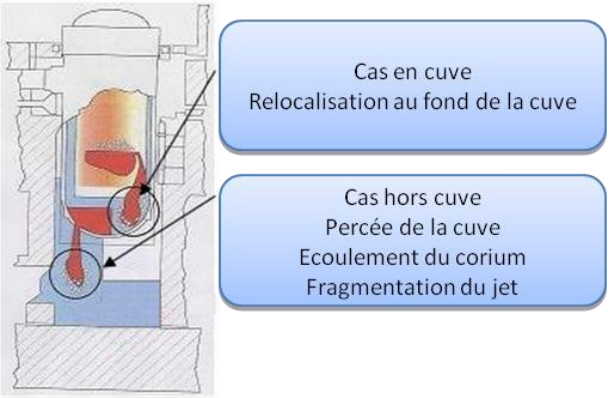


Figure 0-1 : Les deux configurations de l'ICR envisagées dans les REP et REB

Même si les conditions de mélange entre les fluides dans les configurations en-cuve et hors-cuve sont différentes, la phénoménologie de l'ICR est identique. Cette interaction commence par la pénétration d'un jet de corium dans un bain d'eau à des températures du réfrigérant pouvant aller jusqu'à la température de saturation. Cette phase de l'interaction est connue sous le nom de prémélange. Elle est caractérisée par une fragmentation grossière du jet (production de ligaments et de gouttes de taille millimétrique) à cause du cisaillement et des perturbations générées par l'eau et la dynamique du fluide réfrigérant en ébullition. Les instabilités de petite échelle (échelle des gouttes) et de grande échelle (même ordre de grandeur que le diamètre du jet) sont le principal mécanisme de croissance des perturbations dans le jet, qui seront ensuite fragmentées par des effets capillaires ou de cisaillement. Les diverses structures détachées du jet (gouttes et fragments) sont ensuite dispersées au niveau du réfrigérant en échangeant de la chaleur. Ces échanges thermiques provoquent le changement de phase du réfrigérant et sa mise en mouvement. Cette première étape de l'interaction conditionne la suite de l'accident et a trois conséquences possibles (voir Figure 0-2).

- Si le corium n'est pas totalement oxydé avant l'interaction, ce qui est probable, l'oxydation du corium liquide avec la vapeur d'eau provoque un dégagement important et rapide d'hydrogène, avec pour conséquence un risque d'explosion hydrogène si celui-ci s'accumule dans certaines parties du réacteur.

- Le corium fragmenté va se retrouver dispersé pour une partie hors du lieu de l'interaction, entrainé par la vapeur produite et, pour le reste, va se déposer sur le bas de la zone d'interaction. Suivant les caractéristiques de la fragmentation, le dépôt sera plus ou moins compact et donc refroidissable. Si le dépôt n'est pas refroidissable, le corium pourra alors à nouveau progresser dans l'installation (percée de la cuve ou du radier).
- La plus étudiée des conséquences est cependant celle d'une explosion de vapeur qui pourrait, de manière directe ou indirecte, menacer l'intégrité du confinement et provoquer des rejets plus ou moins massifs de produits radioactifs. L'explosion de vapeur est un processus analogue à une détonation et nécessite un mécanisme de déclenchement.

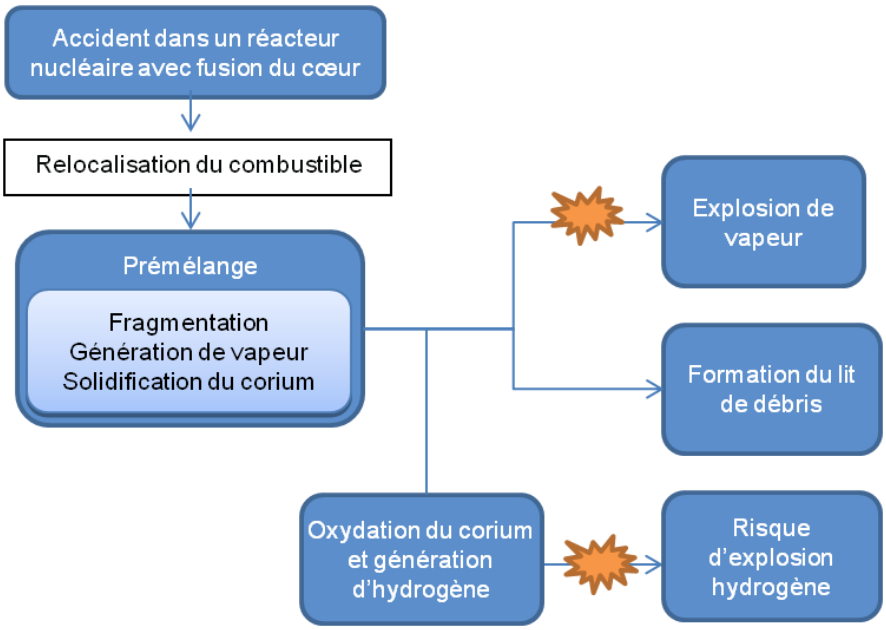


Figure 0-2 : Déroulement et trois conséquences majeures de l'interaction combustible-réfrigérant.

Les analyses de sûreté nucléaire cherchent à mesurer les risques d'accidents nucléaires permettant ainsi la prise de décisions et des dispositions nécessaires pour limiter leurs conséquences. Ces analyses sont basées sur les connaissances existantes des phénomènes et génèrent intrinsèquement des questions de recherche en vue de les améliorer. Tel est le cas de l'ICR, où la compréhension des phénomènes n'est pas complète et nécessite d'une étude approfondie. De nombreuses études ont été effectuées par le passé et divers dispositifs expérimentaux ont été dédiés à l'ICR (FITS (Marshall et al., 1985; Mitchell et al., n.d.), KROTOS (Huhtiniemi et al., 1999, 1997), FARO (Magallon et al., 1999; Magallon and Hohmann, 1995; Magallon and Huhtiniemi, 2001), TROI (Park et al., 2013; Song et al., 2003), entre autres) ainsi que des programmes internationaux de recherche (SERENA-I et SERENA-II pour les plus récents). Malgré ces efforts, les mécanismes responsables du prémélange, pilotés par la fragmentation du jet de corium n'ont pas été totalement identifiés et la modélisation reste perfectible. Des études théoriques, numériques et expérimentales doivent alors être poursuivies.

L'enjeu premier pour la modélisation des ICR, est d'arriver à quantifier les divers phénomènes qui interagissent et la fragmentation du corium constitue le point clé de cette interaction (Figure 0-3). L'objectif de la présente thèse est donc d'améliorer la modélisation de la fragmentation du jet et de la formation et dispersion de gouttes dans le réfrigérant (Figure 0-3) dans le logiciel MC3D, développé par l'IRSN.

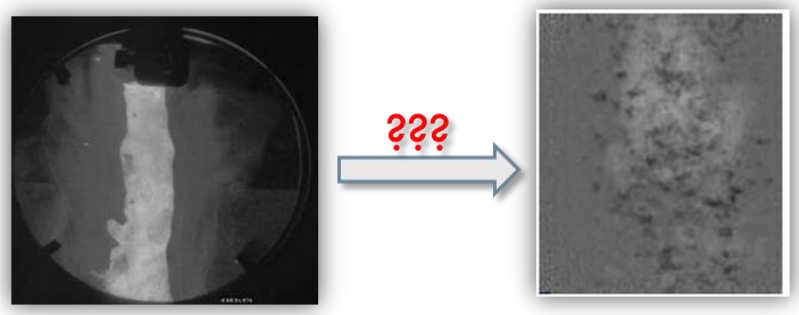


Figure 0-3 : Problème de la fragmentation du corium (passage d'une configuration de jet continu vers des gouttes et fragments). A gauche, photographie d'un jet de corium dans l'installation KROTOS, à droite visualisation du prémélange au rayon X dans la même installation.

La complexité et l'imbrication des processus physiques ne permettent pas d'envisager des descriptions très détaillées du phénomène. Par ailleurs, il est très important de comprendre que la modélisation, tant que la simulation numérique directe sera hors d'atteinte, ne décrit pas forcément de manière exacte la réalité. Il est donc nécessaire de rechercher des lois physiques tenant compte des phénomènes ou paramètres agissant au premier ordre, mais aussi d'en proposer une description simplifiée. Cela suppose donc :

- une certaine compréhension ;
- une hiérarchisation des processus importants ;
- un modèle robuste ;
- une transcription appropriée et compréhensible dans le code de calcul.

ENJEUX DE LA CARACTERISATION DU PREMELANGE ET HYPOTHESES GENERALES SUR LA MODELISATION DE LA FRAGMENTATION DU CORIUM

Dans l'état actuel de connaissances sur l'ICR, il apparait que la phase de prémélange est le résultat d'une interaction cyclique (Figure 0-4) et il est nécessaire de comprendre chaque étape : la fragmentation induit une vaporisation, qui induit une mise en mouvement des fluides qui modifie la fragmentation. Nous notons que la phase d'explosion reproduit ce cycle, mais avec une échelle de temps beaucoup plus courte.

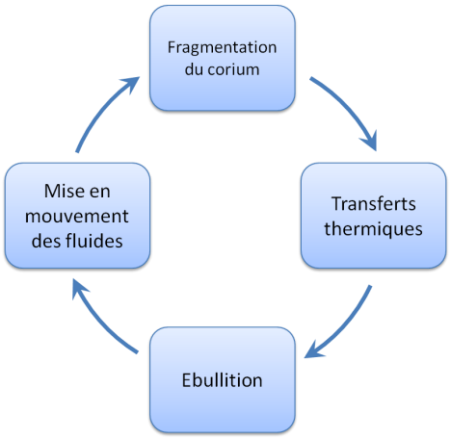


Figure 0-4 : Phénomènes physiques en interaction lors de l'ICR.

Les conditions initiales du jet, tel que son diamètre, sa forme, l'angle d'injection (dépendant des conditions du percement de la cuve), la vitesse d'injection, la composition du corium, l'intensité de la turbulence dans le jet, entre autres, ne sont à priori pas connues. Ces facteurs, conjugués avec le caractère transitoire de l'injection du jet, rendent difficile la prédiction exacte du comportement du jet. Dès que le jet entre en contact avec l'eau, les effets hydrodynamiques provoquent une fragmentation grossière du jet et des gouttes du corium de diverses tailles sont 'éjectées' dans le réfrigérant. Il est difficile de prédire avec précision la taille et la forme des fragments. La présence des fragments dans le réfrigérant produit de la vapeur d'eau à cause de transferts thermiques intenses. Ceux-ci sont très sensibles à l'aire interfaciale entre les gouttes et le réfrigérant. Le réfrigérant se met en mouvement à cause de son ébullition, modifiant ainsi le processus de fragmentation. Pendant le séjour des gouttes dans le réfrigérant, celles-ci peuvent être déformées, à nouveau fragmentées et oxydées.

En échangeant leur énergie avec l'eau, les gouttes vont se refroidir et se solidifier. L'oxydation modifie également la composition du corium, donc les propriétés de solidification. En outre, à cause du caractère exothermique de la réaction, elle apporte de l'énergie et limite donc le refroidissement[1].

Pour pouvoir modéliser la fragmentation du corium dans le logiciel MC3D, un concept général du processus doit être défini à partir d'un certain nombre d'hypothèses simplificatrices. La première hypothèse que nous considérons dans notre étude est une fragmentation du jet de corium selon, deux processus, successifs ou non, à deux échelles spatiales. Le jet est déstabilisé de manière primaire par de grandes déformations (hélicoïdales ou axisymétriques) qui peuvent être assimilées à de grandes gouttes. Ces grandes gouttes sont ensuite sujettes à une fragmentation secondaire, pilotée par des effets locaux à petite échelle. Cette proposition n'est pas arbitraire et est basée sur l'observation de la mise en place d'instabilités à diverses échelles de temps et d'espaces. Cette hypothèse de coexistence de deux échelles permet de découpler la fragmentation en deux processus dont les dynamiques sont différentes.

En effet, il semble irréaliste de considérer que la fragmentation du jet soit le produit d'un cisaillement stationnaire très local à l'interface avec un jet totalement centré et de forme conique. Même dans les configurations sans transferts thermiques et en régime stationnaire d'injection du jet, le développement de grandes structures à l'interface du jet a été observé (Figure 0-5), lesquelles sont bien évidemment plus grandes que l'échelle spatiale caractéristique du cisaillement donnée par les modèles d'instabilité du type Kelvin-Helmholtz.

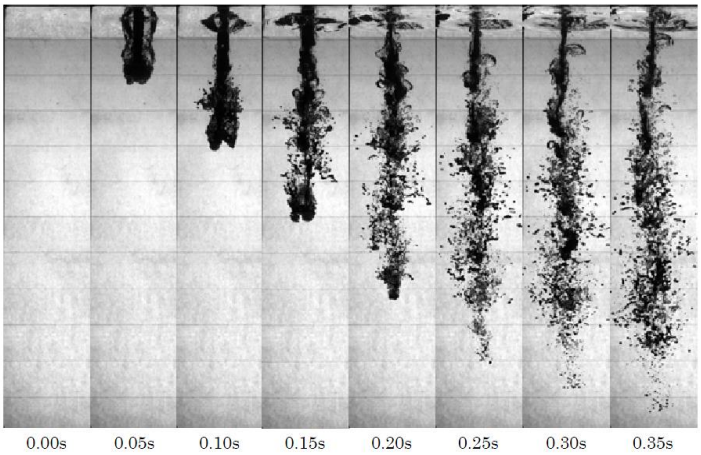


Figure 0-5 : Fragmentation du jet de métal liquide à bas point de fusion dans l'eau. (Abe et al., 2006)

La déstabilisation à grande échelle du jet est réalisée par le cisaillement provoqué par le gradient de vitesse entre le jet et l'écoulement externe. L'échelle caractéristique de ce processus est donc l'échelle même du mélange des fluides (au minimum le diamètre du jet). Cette échelle est en général appelée l'échelle intégrale. La turbulence accompagnant le processus développe des échelles inférieures (la cascade) jusqu'à, pour ce qui nous intéresse, l'échelle de la goutte finale. Le processus déterminant la forme et la dimension finale de la goutte a donc une échelle locale, de l'ordre de celle de la goutte.

Il y a une interaction très forte entre les structures tourbillonnaires et la dynamique du milieu en ébullition avec la déstabilisation en grande échelle du jet. Dans l'état de nos connaissances sur la fragmentation du jet, il est impossible de décrire en détail cette dynamique. Pour essayer de comprendre les effets des structures qui se développent dans le réfrigérant, un dispositif expérimental sera réalisé au LEMTA (Laboratoire d'énergétique et mécanique théorique et appliqué à Nancy) où des moyens de mesure optique du type PIV (Particle Image Velocimetry) permettront d'observer en détail l'interaction des structures du milieu environnant avec le jet. Des visualisations par caméra rapide permettront de mettre en évidence leur impact au niveau de la fragmentation du jet.

En absence d'une vision claire à ce sujet, divers modèles numériques ont été proposés pour permettre d'intégrer une dynamique de grandes échelles dans le processus de fragmentation du jet. Il est également important de rappeler que des phénomènes pouvant intervenir pendant la fragmentation tels que la solidification et l'oxydation n'ont pas été prises en compte dans ces modèles. Des études plus

[1] Dans certain cas avec des métaux très réactifs tels que l'aluminium ou le zirconium, l'oxydation peut s'emballer et faire monter la température.

approfondies sur le plan théorique et numérique sont en cours pour en déduire des lois simples et facilement intégrables dans les logiciels spécifiques pour l'ICR comme MC3D.

Il est d'usage de différencier fragmentation primaire, à partir du jet, et secondaire, à partir de gouttes. En fait, dans un processus à échelle multiple, il est bien difficile de faire cette différentiation, en particulier pour ce qui concerne la fragmentation primaire : où commence-t-elle, où s'arrête-t-elle ? Nous parlerons cependant par la suite de fragmentation secondaire, pour suivre l'usage, s'agissant de la fragmentation d'une goutte en plusieurs gouttes. La fragmentation secondaire a alors une importance particulière dans cette étude puisqu'elle intervient à deux niveaux:

- au cours de la fragmentation du jet, de manière éventuellement assez conceptuelle, du fait de notre hypothèse de fragmentation en deux étapes;
- au cours du prémélange en cas de changement de conditions ;
- au cours de l'explosion, qui est elle-même considérée comme une phase où le combustible est déjà pré-fragmenté.

Son importance tient au fait qu'elle détermine, en absence d'effet de solidification, la dimension des particules, c'est-à-dire l'aire interfaciale entre le corium et le réfrigérant. Pour ce type de fragmentation, bien que des études théoriques et expérimentales existent, la description du phénomène reste encore incertaine, particulièrement dans le contexte de l'ICR. Les études sur ce type de fragmentation consistent principalement à soumettre une goutte de métal liquide à un courant d'eau à différentes vitesses ou à une onde de choc. La Figure 0-6 montre un exemple de ce type d'essais effectué dans le dispositif expérimental DROPSG au CEA (Grenoble) (De Malmazet, 2009).

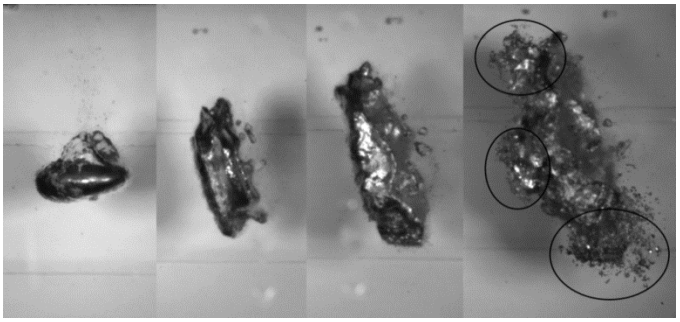


Figure 0-6 : Fragmentation de gouttes chaudes. Les cercles indiquent des zones localisées d'interaction thermique (De Malmazet, 2009).

Dans la Figure 0-6, une goutte d'étain à 1000°C est soumise à des perturbations hydrodynamiques produites par une onde de choc dans l'eau. Le processus commence par une phase de déformation où la goutte prend une forme de disque. Malgré leur qualité, les images ne sont pas assez précises pour voir en détail les processus ni la génération de gouttes filles (fragments). Sur certaines images, des interactions localisées dites thermiques apparaissent. Elles sont caractérisées par une fragmentation très fine isotrope apparaissant subitement, alors que l'ensemble du processus de fragmentation hydrodynamique apparait plus continu (à l'échelle de temps du film). Cette fragmentation résulterait d'instabilités dans le film de vapeur entourant les gouttes, induites par de petites perturbations et par la compression de la vapeur due au passage de l'onde de choc. Ce phénomène peut éventuellement provoquer une véritable pulvérisation explosive de la goutte en quelques millisecondes. Cependant, les travaux réalisés par De Malmazet (Figure 0-6) indiquent que le phénomène peut être très partiel. La fragmentation thermique pourrait donc intervenir au cours du prémélange, cependant nous considérerons qu'elle a un impact assez faible sur la fragmentation globale de la goutte. Par conséquent, nous n'en tiendrons pas compte et nous pouvons donc nous référer aux études réalisées en conditions isothermes ou, plus généralement, sans ébullition du milieu ambiant.

La fragmentation hydrodynamique est due au gradient de vitesse entre la goutte et le fluide environnant. La rupture se fait selon divers modes en fonction du nombre de Weber de la goutte, quand les effets de viscosité peuvent être négligés. Malgré cela, il est étonnant de constater que les résultats d'analyse de la fragmentation des gouttes (distribution en taille de particules, taux de fragmentation, coefficient de trainée, entre autres), particulièrement en liquide/liquide, ne sont pas abondants. Il y a un manque notoire de données tant du point de vue expérimental que théorique. Or, les premières analyses que nous réaliserons nous conduirons à suspecter un comportement différent de la fragmentation en condition liquide/liquide, contrairement au consensus classique pour lequel le nombre de Weber détermine à lui seul les processus, indépendamment de la nature du milieu ambiant. Cela nous a donc amené à effectuer des simulations numériques, à l'aide du code CFD GERRIS, pour comprendre plus en

détail le processus de fragmentation en configuration liquide/liquide pour laquelle très peu d'études existent.

CONTEXTE DE LA RECHERCHE SUR LE PHENOMENE

Pour étudier l'Interaction Corium-Réfrigérant, des moyens théoriques, numériques et expérimentaux ont été mis en œuvre depuis les années 70. Concernant la modélisation, la priorité a rapidement été donnée à la mise en œuvre de modèles multiphasiques multidimensionnels de thermo-hydraulique de type simulation de la mécanique de fluides, plus connu par ses sigles en anglais CFD (Computational Fluid Dynamics). La complexité et la sensibilité sont telles que les modèles thermodynamiques à zéro dimensions, puis stationnaires à une dimension, se sont avérés d'une faible utilité en pratique puisqu'ils conduisaient à des contraintes mécaniques nettement au-delà des capacités de résistance des structures du réacteur. De plus, il est apparu primordial de caractériser plus précisément la phase de prémélange, supposée fournir les conditions initiales de l'explosion.

Il faut également insister sur le fait que de nombreuses tentatives de modélisation ont été initiées avec des succès divers depuis les années quatre-vingt-dix. Le nombre de modèles encore en développement s'est fortement réduit ces dernières années. Si cette diminution s'est réalisée dans un contexte de réduction quasi-généralisée des efforts de modélisation des accidents graves avant l'accident de Fukushima (au plan international), c'est bien la complexité particulière des phénomènes et donc des modèles qui doit être considérée comme étant la première cause. Il apparait, particulièrement après Fukushima, que les efforts doivent être mis en commun au niveau international. Ceci a été rapidement reconnu au niveau expérimental puisque, dès les années 90, les programmes FARO et KROTOS ont été réalisés par le centre européen d'ISPRA, sur des fonds internationaux. Le projet SERENA-II plus récent témoigne du même constat. Une même mise en commun des efforts semblent se réaliser quant à la modélisation, même si celle-ci est plus difficile à mettre en place. Le logiciel MC3D, développé par l'IRSN, issu cependant de développements initiés par le CEA, est actuellement considéré comme un des outils les plus évolués pour l'étude de ce phénomène (Figure 0-7).

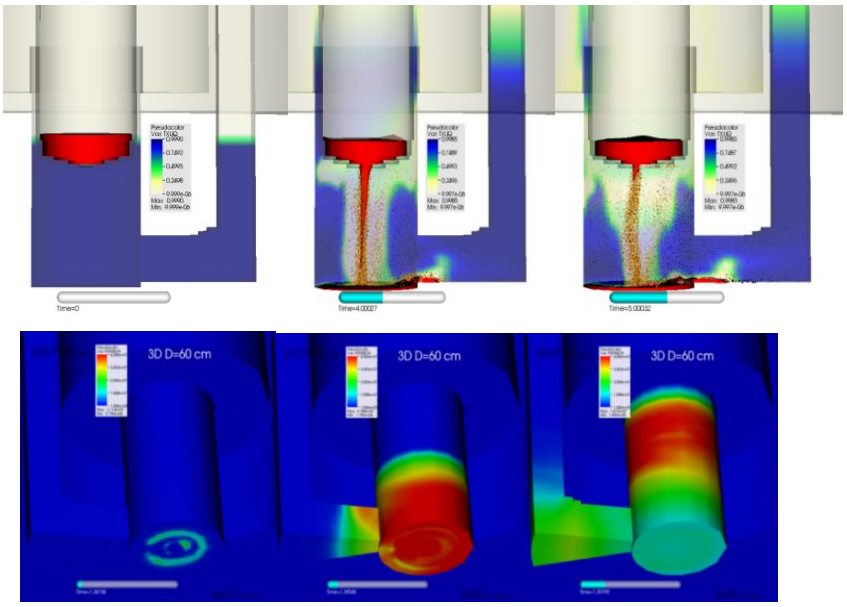


Figure 0-7 : Simulation numérique de l'ICR avec le logiciel MC3D ; Haut : Prémélange (écoulement du corium hors cuve et fragmentation). Bas : Explosion (champ de pression sur les parois du puits de cuve)

Au niveau national, un tel consensus de nécessité de regroupement des efforts s'est matérialisé par la mise en œuvre en 2013 du projet de collaboration nommé ICE, dans le cadre d'un appel à projet gouvernemental (cadre des « Investissements pour l'Avenir ») regroupant l'IRSN, le CEA et le LEMTA (CNRS / Université de Lorraine) pour la partie technique, avec l'appui financier d'EDF, d'AREVA et du gouvernement. La présente thèse s'inscrit dans ce programme et en porte du point de vue théorique, le premier volet, dédié à l'étude de la fragmentation du corium pendant la phase de prémélange.

PLAN DE LA THESE

Cette thèse se concentre donc sur l'étude de mécanismes de fragmentation du corium. Les travaux effectués sont de caractère numérique et théorique. Les travaux sont principalement guidés par les besoins en termes de compréhension physique et de modélisation du code de simulation numérique

MC3D. Les travaux portent principalement sur la fragmentation de grandes structures du jet (fragmentation primaire) et sur la fragmentation secondaire de gouttes de corium à cause des effets hydrodynamiques.

Ce mémoire se divise en plusieurs chapitres. Le premier regroupe une bibliographie de l'interaction corium-eau dédié principalement à l'étude du prémélange, des dispositifs expérimentaux et à la modélisation de l'ICR. Les paramètres les plus importants pour l'étude de la fragmentation dans l'ICR comme la taille finale de particules, le taux de vide, la longueur de rupture de jet, entre autres, seront analysés.

Le deuxième chapitre porte un regard plus précis sur les mécanismes de fragmentation des jets et de gouttes, en donnant une approche plus théorique sur le processus. Ce chapitre nous permet d'introduire les diverses hypothèses et les axes de travail de la thèse. Principalement, nous présenterons la modélisation de la fragmentation à deux échelles où la fragmentation primaire de jets de métal liquide est pilotée par les grandes échelles de l'écoulement et la fragmentation secondaire est fonction des plus petites échelles (échelle de gouttes). Ce chapitre est constitué d'une étude sur la fragmentation primaire en faisant lien aux divers modèles utilisés dans le cadre d'atomisation de jet. Postérieurement, un état de l'art sur la compréhension et modélisation de la fragmentation secondaire de gouttes est présenté.

Le troisième chapitre présente une synthèse de deux premiers chapitres bibliographiques. Nous rappelons les diverses hypothèses considérées pour notre modélisation et nous justifierons les diverses actions de modélisation effectuées dans cette thèse.

Dans le quatrième chapitre, nous exposons les divers modèles implémentés dans MC3D. La modélisation de la fragmentation des jets de métal dans le logiciel MC3D est présentée. Nous exposons la modélisation de la phase dispersée par la méthode des classes avec des modèles de sous-maille pour la fragmentation primaire (du jet en gouttes) et la fragmentation secondaire (de gouttes en fragments). Ces modèles sont issus des études théoriques et/ou numériques développées dans les premiers chapitres de cette thèse. Divers cas d'étude avec des analyses sur la taille des particules et l'impact des modèles et leurs paramètres au niveau de l'ICR sont exposés. Ces études permettent aussi d'évaluer la pertinence d'une modélisation à deux échelles avec des modèles couplés pour la fragmentation primaire et secondaire du corium.

Dans le cinquième chapitre, nous exposons notre travail sur la compréhension et la modélisation de la fragmentation de gouttes de métal liquide par un courant d'eau à l'aire des simulations numériques effectuées avec le code de calcul GERRIS. Les conclusions de ces travaux de thèse seront présentées ainsi que des pistes pour la poursuite des travaux et leur implémentation dans les codes spécialisés ICR tel que MC3D. Finalement, nous présenterons les conclusions de cette thèse ainsi que les perspectives de futurs travaux sur la fragmentation du corium pendant la phase de prémélange dans l'ICR.

1 CHAPITRE 1 : ETAT DE L'ART DU PROBLEME DE LA FRAGMENTATION DES JETS DE CORIUM DANS L'INTERACTION CORIUM – EAU

L'objectif de ce chapitre est d'introduire plus en détail les caractéristiques de l'ICR pendant un accident grave dans un réacteur nucléaire du type REP[2] ou REB[3]. Dans ce chapitre, nous présenterons les caractéristiques de l'interaction en-cuve et hors-cuve. Ceci sera suivi par la présentation de divers dispositifs expérimentaux pour l'étude de l'ICR et les principaux résultats et analyses issus de ces essais. Une étude phénoménologique de l'ICR sera présentée, où les principaux paramètres de l'interaction seront décrits, analysés et comparés aux résultats expérimentaux.

1.1 PANORAMA GENERAL DU CONTEXTE ET DE PHENOMENE DE L'ICR

1.1.1 L'ICR PENDANT LES ACCIDENTS GRAVES

Les interactions corium-réfrigérant sont étudiées du fait de la possibilité d'une interaction très énergétique (explosive) entre le corium et le réfrigérant. Cette interaction peut mettre en danger une ou plusieurs barrières de confinement des produits de fission dans un réacteur nucléaire, par exemple, la rupture de l'enceinte de confinement (Jacquemain, 2013).

Lors d'un arrêt d'urgence du réacteur, la réaction nucléaire est arrêtée par l'introduction automatique des barres de contrôle (graphite) dans le cœur du réacteur. Cependant, la chaleur résiduelle du combustible doit être évacuée, tâche assurée par les systèmes de refroidissement d'urgence de la centrale. Des dysfonctionnements de ces systèmes de refroidissement peuvent pourtant survenir à cause de défaillances matérielles, humaines et/ou à cause d'agents externes (séisme et tsunami dans le cas de l'accident de Fukushima). Le réacteur peut alors se trouver dépourvu de refroidissement. L'absence prolongée du refroidissement entraine l'augmentation de température des crayons combustibles et leur possible endommagement partiel ou total, situation qui est connue sous la dénomination « accident grave ».

L'augmentation de température des crayons entraine leur dégradation et leur fusion partielle. L'échauffement est accéléré par l'oxydation des gaines en zircaloy (alliage de zirconium à environ 98 % et d'étain plus divers autres composants). Cette réaction exothermique se produit aux alentours de $1200\,°C$ et induit une augmentation très rapide de la température des crayons conjointement avec une forte production d'hydrogène. Ce phénomène est connu dans le jargon de spécialistes comme emballement de la réaction. La suite de l'accident dépend de nombreux facteurs qui ne sont pas tous bien maitrisés et connus. L'effondrement et la coulée des crayons provoquent l'établissement d'un "bain de corium" au sein même du cœur, bain délimité par sa propre croute ("auto-creuset"). Le corium ainsi formé est constitué principalement d'oxydes d'uranium, d'oxyde de zirconium et divers composants métalliques plus ou moins oxydés.

Si le refroidissement n'est pas retrouvé, le corium continu à s'échauffer et le "creuset" va perdre sa géométrie par fusion locale de la croute, provoquant la coulée du corium vers le fond de la cuve. Plusieurs scénarios sont possibles. Dans l'un d'entre eux, le corium peut s'écouler à travers une plaque support percée de trous d'environ $10\,cm$. Le corium devrait alors s'écouler sous la forme de plusieurs jets cylindriques. Un second scénario prévoit une coulée latérale par fusion du cloisonnement, voire de viroles entourant le cœur.

Dans la plupart des cas, le fond de la cuve du réacteur devrait encore contenir du fluide réfrigérant liquide, probablement à température de saturation ou faiblement sous-refroidi, dans lequel le ou les jets de corium pénètrent. Ceci constitue la configuration dite "en-cuve" de l'interaction corium eau (Figure 1-1). Cette interaction en cuve peut mener à une explosion de vapeur, ayant une énergie mécanique qui pourrait produire la défaillance de la cuve et projeter des éclats, voire le couvercle lui-même, vers l'enceinte de confinement. Ce type de défaillance est connu sous le nom de mode alpha (Theofanous and Yuen, 1995). Le fond de la cuve est bien sûr également soumis à une forte sollicitation et, si l'explosion est très violente, celle-ci pourrait rompre, provoquant le relâchement sous très haute pression de l'ensemble des fluides vers l'enceinte. L'impact sur la tuyauterie et les éléments du circuit primaire tels que les générateurs de vapeur, par propagation des ondes de choc, est également étudié.

---

[2] REP : Réacteur à eau pressurisé

[3] REB : Réacteur à eau bouillante

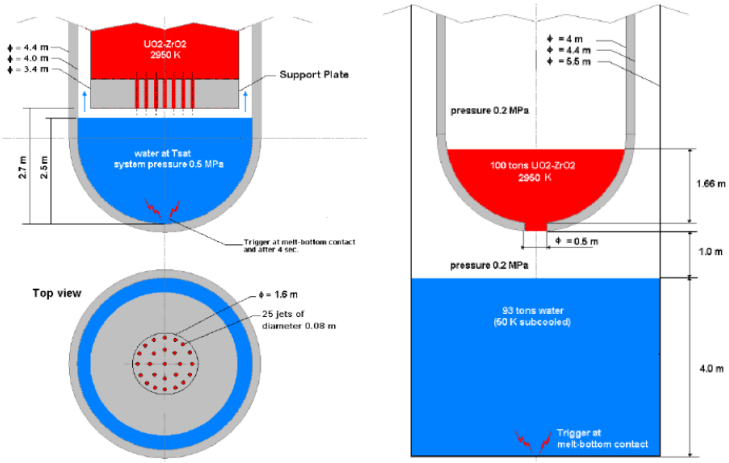


Figure 1-1 : Configurations de l'ICR en cuve (gauche) et hors-cuve (droite) utilisées lors de la phase I du projet international SERENA (Piluso and Hong, 2009)

En l'absence d'une interaction explosive entre le corium et le réfrigérant à l'intérieur de la cuve, le corium va se relocaliser alors dans le fond de cuve du réacteur. Le bain de corium ainsi formé présente une composition complexe dû aux divers composants qui constituent le cœur du réacteur et qui se retrouvent dans le corium. La dynamique de ce bain peut être aussi assez complexe par les phénomènes de thermo convection. Il est probable qu'une stratification du bain de corium se produise car il est constitué de différents matériaux non miscibles avec des masses volumiques différentes. Il est estimé en particulier qu'une séparation entre phases métalliques et phases oxydées va s'opérer. Il apparait, lors des recherches menées, qu'une couche métallique légère devrait exister au-dessus de la phase de corium oxydé. Notons qu'il est également possible de retrouver en fond de cuve une phase métallique lourde incorporant de l'uranium métallique.

La cuve constituée d'acier, d'environ vingt centimètres d'épaisseur, sera érodée thermiquement par le corium et pourra être percée au bout de quelques minutes ou quelques heures. Ce temps dépend de la masse de corium, de sa puissance thermique, de la quantité d'eau présente dans la cuve et du transfert thermique de la cuve vers l'extérieur. Il est estimé que la présence de la couche métallique légère devrait favoriser une concentration de flux thermique sur la cuve et accélérer le processus de fusion localisée de la cuve.

Le corium peut alors s'écouler vers le puits de cuve, qui peut contenir de l'eau. Cette eau peut provenir soit du noyage intentionnel du puits de cuve via un mécanisme dédié, avec l'objectif de refroidir la cuve (dépend des types de réacteur), soit par accumulation de l'eau provenant des systèmes d'aspersion utilisés pour diminuer les niveaux des aérosols radioactifs dans l'enceinte de confinement (cas des réacteur français), soit éventuellement d'une brèche dans le circuit primaire au niveau de la cuve (cas considéré pour le réacteur EPR). Du fait des diverses configurations possibles pour le bain de corium en fond de cuve, les études de sûreté prévoient deux types de percées de cuve : une percée plus ou moins centrale et une percée latérale (Figure 1-2).

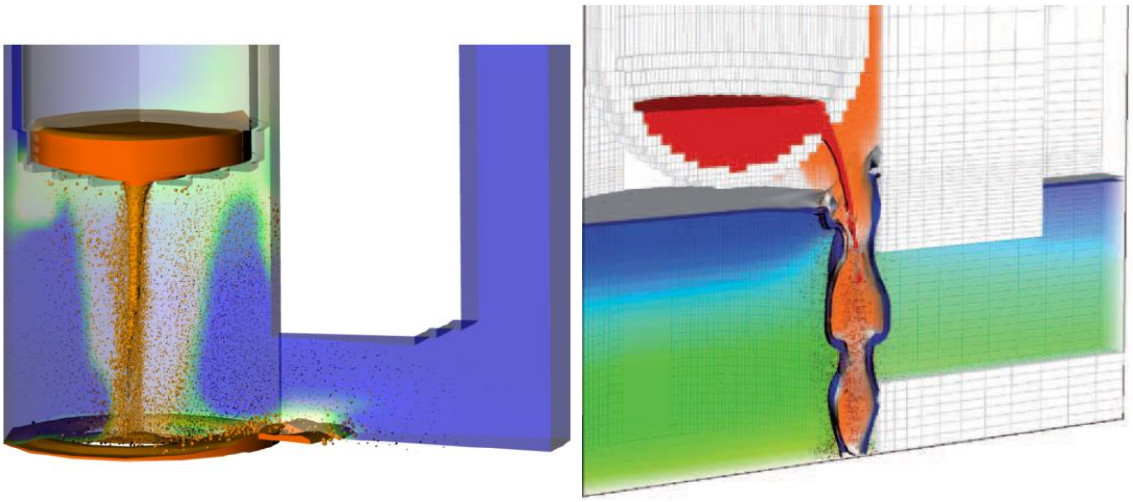


Figure 1-2 : Différents types de percée de cuve ; Gauche, percée centrale ; Droite, percée latérale. Images issues des calculs MC3D

Au moment du contact entre le corium et l'eau, le jet subit une fragmentation grossière où des gouttes de taille millimétrique sont générées. Ces gouttes se dispersent dans le réfrigérant volatil en échangeant de la chaleur, ce qui provoque son ébullition et une pressurisation de l'enceinte. Selon les conditions de l'interaction, si le corium n'est pas totalement oxydé avant l'interaction avec le réfrigérant, le contact avec l'eau provoquera une réaction exothermique d'oxydation avec dégagement d'hydrogène. Comme pour le cas en-cuve, cette interaction "hors-cuve" peut dégénérer en explosion de vapeur. Les risques liés à une explosion de vapeur en configuration hors-cuve peuvent s'avérer plus importants par rapport au cas en-cuve, dû à la moindre tenue mécanique des structures en béton, en particulier du puits de cuve. La dégradation mécanique de ces structures peut elle-même entrainer une dégradation mécanique de l'enceinte de confinement. L'enceinte est constituée d'un cylindre en béton surmonté d'un dôme lui aussi en béton. Il compose la troisième barrière de confinement aux matières radioactives, conçus pour résister à une surpression de quelques bars, en fonction du type de réacteur. Certains réacteurs sont constitués d'une double enceinte.

En cas d'explosion ou pas, le corium se déposera en partie sur le fond du puits de cuve, constitué d'un radier de béton d'à peu près $4\ m$ d'épaisseur (cette épaisseur peut varier d'un réacteur à l'autre). Suivant les caractéristiques de fragmentation du corium, le lit de débris formé sera plus ou moins refroidissable. Il est aussi possible que la fragmentation du jet ne soit pas complète avant que le jet impacte le fond de la cuve (cas de large brèche). Si le lit de débris (au sens large) n'est pas refroidissable, le corium va s'échauffer et refondre. Une interaction entre le corium et le béton, nommée (ICB, Interaction Corium-Béton ou MCCI pour Molten Corium Concrete Interaction en anglais) peut faire progresser le corium hors de l'installation, dans l'environnement. Le corium dissout le béton par sa haute température et la fusion du béton produit une grande quantité de gaz qui contribueront à la montée progressive de la pression de l'enceinte de confinement et pourra postérieurement mener à sa défaillance. L'interaction corium béton correspond au mode de défaillance ϵ (N. Rasmussen et al., 1975), qui correspond à une défaillance de l'étanchéité de l'enceinte de confinement due à la traversée de son radier en béton par le corium.

On note qu'une partie plus ou moins importante du corium se retrouve, selon les études réalisées à l'IRSN, éjectées hors du puits de cuve et dispersées dans l'enceinte. L'eau présente dans le puits lors de l'interaction se retrouverait également éjectée hors du puits de cuve et donc non disponible pour le refroidissement (sauf fuites diverses réalimentant le puits de cuve).

1.1.2 PHASE DE PREMELANGE PENDANT L'ICR

La phase de prémélange pendant l'ICR consiste en l'interaction entre un jet de corium liquide et le réfrigérant avant qu'une éventuelle explosion de vapeur ne se produise. Elle conditionne la suite de l'accident, en particulier la formation et les caractéristiques (porosité et perméabilité) du lit de débris et la quantité d'hydrogène produit par oxydation. Elle conditionne aussi la possibilité et l'intensité d'une explosion de vapeur.

Au moment de l'interaction du jet avec l'eau, le jet est fragmenté en gouttes de taille millimétrique qui sont dispersées dans le réfrigérant. Les transferts thermiques et l'oxydation sont pilotés par le développement de l'aire interfaciale des gouttes. **L'étude et la modélisation du mécanisme de développement de cette aire interfaciale, et donc de fragmentation du corium sont les objectifs principaux de cette présente thèse.**

Les paramètres importants qui déterminent la possibilité et l'intensité d'une explosion de vapeur sont notamment :

- l'état physique des gouttes qui vont plus ou moins se solidifier,
- le "taux de vide", c'est-à-dire taux volumique de gaz dans la zone d'interaction,
- la capacité d'oxydation.

Les gouttes non solidifiées pourront se re-fragmenter finement et participer activement à une explosion. Le rôle des gaz dans le prémélange, par l'ébullition et par le dégagement d'hydrogène, est en fait assez complexe. En faible quantité, il augmente l'intensité de l'explosion en favorisant la fragmentation, par augmentation de la compressibilité du réfrigérant et donc du cisaillement entre corium et réfrigérant lors de l'explosion. En forte quantité, il empêche le contact entre corium et réfrigérant, et donc l'explosion. L'oxydation a également un rôle complexe qui peut être soit bénéfique, soit problématique et qui est encore mal maitrisé. Les effets sont divers par :

- la production d'hydrogène, conduisant à l'augmentation du taux de vide ;
- le dégagement d'énergie (chaleur de réaction), pouvant maintenir les particules liquides et surtout servir de source d'énergie à l'explosion, en complément de l'énergie thermique ;

- le changement des propriétés physiques, qui conduit inversement, a priori, à une solidification plus rapide.

La fragmentation est un phénomène complexe et dépend tout d'abord des caractéristiques de l'injection du jet de corium, elles-mêmes incertaines. La position de la brèche de la cuve conditionne aussi la forme du jet avant son arrivée dans l'eau. Une brèche centrale produira un jet centré et plus cohérent par rapport à une brèche latérale. Un paramètre important du jet est son diamètre caractéristique dont dépendra dans un premier temps la stabilité du jet et sa longueur de pénétration dans le réfrigérant, avant fragmentation complète. Les jets de liquide injectés dans un fluide quasi-statique suivent plusieurs mécanismes de déstabilisation à cause de gradient de vitesses entre le fluide environnant et le jet. Pendant sa chute dans le gaz, et s'il est de petite dimension (cas des essais), le jet peut être perturbé par des instabilités de grandes échelles, notamment de type hélicoïdal. Ces instabilités dépendent des propriétés du jet et sont fortement influencées par sa masse volumique, sa tension de surface et, dans une moindre mesure, sa viscosité. Précisons ici que, si le corium est parfaitement liquide, sa viscosité est faible et elle n'intervient que de manière secondaire dans le processus de fragmentation. La présente étude se place dans cette situation.

Les premières études menées sur la fragmentation des jets de corium décrivaient une fragmentation du corium comme étant l'effet conjoint de la fragmentation d'une boule de vortex qui se développe au front du jet et de la fragmentation à cause du cisaillement le long de sa colonne. La question de la prédominance d'un effet sur l'autre a longtemps été l'objet de polémiques entre spécialistes. Nous y reviendrons plus loin dans la section 1.3.1.

Les gouttes générées pendant la fragmentation auront une taille de l'ordre de quelques millimètres et seront dispersées avec une vitesse initiale donnée par la vitesse du jet et la vitesse d'éjection radiale des gouttes. Ces gouttes traversent facilement le film de vapeur qui s'est éventuellement établi autour du jet (surtout pour les gros jets) et sont fortement ralenties par le réfrigérant liquide. Les gouttes en contact avec l'eau contribuent directement au changement de phase du réfrigérant en produisant une intense ébullition. Sous certaines conditions, un film de vapeur épais s'établit autour du jet, lequel facilite une remontée de la vapeur, avec une vitesse très élevée, produisant elle-même la fragmentation du jet.

Pendant leur séjour dans le réfrigérant, les gouttes peuvent être soumises à des perturbations hydrodynamiques importantes. La possibilité de fragmentation d'une goutte de corium est donnée par son nombre de Weber[4]. Plus le nombre de Weber est grand, plus la goutte se fragmentera en plus petits fragments. De même que pour la fragmentation du jet, la fragmentation de gouttes est supposée être un phénomène purement hydrodynamique. Les études montrent cependant, qu'un phénomène de fragmentation dit "thermique" peut intervenir. Ce phénomène est lié à des contacts quasi-directs entre les gouttes et l'eau, mais son apport est jugé faible voire négligeable dans le processus du prémélange. Les gouttes soumises à des perturbations hydrodynamiques importantes sont déformées, fortement ralenties et fragmentées par l'eau. Cependant, les processus même de fragmentation des gouttes sont mal caractérisés, particulièrement aux nombres de Weber élevés. Pendant leur parcours dans le réfrigérant, les gouttes perdent leur énergie par rayonnement puis par convection, en particulier lorsqu'elles sont au contact de l'eau. En fonction de leur taille et des propriétés du matériau, elles vont plus ou moins se solidifier, ce qui arrêtera leur fragmentation. Les processus de fragmentation des gouttes de corium dans les conditions de prémélange sont donc complexes et restent mal caractérisés.

1.1.3 PHASE D'EXPLOSION PENDANT L'ICR

Selon les conditions de mélange, une explosion de vapeur peut se déclencher au sein même du mélange en formation. L'explosion de vapeur est due à un transfert extrêmement rapide (quelques millisecondes) de chaleur entre le corium et le réfrigérant liquide lié à un processus de fragmentation fine (fragments de quelques dizaines de microns). Le prémélange apparait ainsi comme une situation métastable. Le changement de régime nécessite, comme pour toutes les explosions, un déclenchement.

D'un point de vue physique, le déclenchement peut être obtenu par deux mécanismes (voir paragraphe 1.3.6).

- la fragmentation thermique de gouttes de corium : ce type de fragmentation apparait quand le film vapeur qui entoure la goutte est déstabilisé, provoquant des contacts ponctuels entre la goutte et

---

[4] Nombre de Weber $\left(We_i = \frac{\rho_i \mathrm{D} \Delta V^2}{\sigma}\right)$: Rapport entre les contraintes de cisaillement générées par le fluide environnant et les contraintes stabilisantes générées par la tension de surface

le réfrigérant liquide. Ces contacts occasionnent un transfert de chaleur intense, ce qui génère une surpression locale qui déforme fortement la goutte et produit sa fragmentation. La fragmentation d'une seule goutte ne produit pas une explosion de vapeur, mais déclenche le mécanisme de fragmentation fine des particules environnantes à cause des ondes de pression générées dans le mélange. La fragmentation fine des autres gouttes entretient l'explosion et augmente son intensité.
- le contact du corium encore liquide avec le fond du domaine (cuve, ou puit de cuve). Le ou les mécanismes induits dans ce cas restent très incertains et sont l'objet de travaux en cours.

La fragmentation fine pendant l'explosion, une fois le phénomène déclenché, est un phénomène plutôt hydrodynamique, piloté par la vitesse relative entre les gouttes et le réfrigérant lors du passage des ondes de choc. Certains modèles, comme celui du code TEXAS (Bilbao et al., 1996; Chu and Corradini, 1998) font l'hypothèse d'une fragmentation thermique. Cependant, le consensus général considère que ce phénomène est secondaire. Il n'est plus pris en compte dans le code MC3D.

La fragmentation de gouttes en petits fragments augmente très rapidement la surface de transfert de chaleur entre le combustible et le réfrigérant, en produisant un transfert thermique intense. Le processus exact de pressurisation par les transferts thermiques fait encore l'objet de recherche car il est mal compris. Dans le logiciel MC3D, la pressurisation est due à l'ébullition directement générée par les transferts de chaleur. Mais la caractérisation précise de cette l'ébullition et du volume de gaz généré est complexe à déterminer du fait que l'explosion a lieu en règle générale dans des conditions supercritiques (quelques centaines voire quelques milliers de bars au cœur de l'interaction). La surpression ainsi générée se propage dans la zone de mélange en faisant exploser d'autres gouttes liquides. La surpression s'auto-entretient sous la forme d'une onde de choc.

Nous pouvons noter que les processus de fragmentation hydrodynamiques des gouttes sont identiques en prémélange et en explosion, même s'ils ont lieu sous des conditions différentes de nombre de Weber. **Les apports de cette thèse sur la fragmentation des gouttes pour la phase de prémélange pourront donc être également utilisés pour décrire l'explosion.**

1.2 SYNTHESE DES ESSAIS LES PLUS IMPORTANTS

Divers essais ont été effectués avec des matériaux prototypiques du corium. Des jets à très haute température ($T \approx 3000\,K$) sont injectés dans un bac d'eau sous-refroidie ou à saturation avec des conditions d'injection plus ou moins bien maîtrisées. Dans les essais avec explosion, il est souvent difficile de caractériser la phase de prémélange. Le Tableau 1 ci-dessous compile les principales installations expérimentales programmes concernant l'interaction corium-eau. Des informations complémentaires ainsi que les références des essais sont répertoriées sur les sites internet :

- http://www.oecd-nea.org/tools/abstract/detail/csni2007
- http://stresa.jrc.ec.europa.eu/stresa/

Programme	Laboratoire	Type d'essais	Matériaux	Faits marquants
FITS	SANDIA (Etats Unis)	Explosion	Thermite Al_2O_3-Fe ou Corium (thermite) quelques kilogrammes	- 1er programme important - Nombreux essais - Série d'essais MDC[5] avec du corium: explosions spontanées avec des rendements importants
CCM	ANL (Etats Unis)	Prémélange	Mélanges UO_2-ZrO_2-acier à 2800°C quelques kilogrammes	- 6 essais de prémélange dans différentes conditions (géométrie, diamètre de jet et température d'eau) - Pas d'explosion spontanée
FARO	JRC Ispra	Prémélange	UO_2-ZrO_2 à 2800°C	- Programme de référence pour la qualification des modèles de prémélange

[5] La série d'essai MDC comportent 13 tests conçus pour se familiariser avec la méthode de préparation et la livraison du corium. Tous les essais ont eu un déclenchement externe

	(Commission Européenne)	Explosion	100 à 200 kilogrammes	- Masses importantes
KROTOS-ISPRA	JRC Ispra (Commission Européenne)	Explosion	Sn à 1000°C Al_2O_3 à 2300-2800°C UO_2-ZrO_2 à 2800°C ~ 1 litre	- Programme dédié à l'explosion - Monodimensionnel (section d'essai étroite) - Influence de la composition (alumine ou corium UO_2-ZrO_2)
KROTOS-CEA	CEA Cadarache	Explosion / prémélange	Corium ~ 1 litre	- En service - Evolution de l'installation Ispra - Caractérisation du prémélange par rayons X - Maitrise des conditions d'injection
TROI	KAERI (Corée du Sud)	Explosion + Prémélange	Corium UO_2-ZrO_2 Environ 15 kilogrammes	- En service - De fortes évolutions pendant le programme - 10 à 20 kg injectés

Tableau 1 : Principales installations expérimentales relatives à l'étude de l'explosion de vapeur lors d'une interaction entre un jet de corium ou de matériaux simulants et le réfrigérant (eau)

Nous pouvons également citer un certain nombre d'autres programmes tels que PREMIX et EKO en Allemagne à FzK, ALPHA au Japon, DISCO-FCI, réalisé par KIT en Allemagne avec le financement de l'IRSN ou plus récemment DEFOR en Suède à KTH. Cependant, ces programmes mettaient (ou mettent pour DISCO-FCI et DEFOR) en œuvre des matériaux aux propriétés souvent assez éloignées du corium. Nous avons fait le choix de nous focaliser sur les essais en corium afin de cibler les principales caractéristiques, mais il est clair que les essais en matériau simulant sont souvent très intéressants pour la validation des modèles et outils, à condition d'être suffisamment représentatif du point de vue de la phénoménologie.

Actuellement, les programmes de recherche sur l'ICR comportent un volet de modélisation et un volet expérimental. Tel est le cas du programme de recherche SERENA (Steam Explosion REsolution for Nuclear Applications par ses sigles en anglais). Ce projet de recherche avait pour objectif d'étudier les mécanismes de l'ICR et leurs effets dans la configuration hors-cuve. La première partie du projet (SERENA-I) concernait une étude analytique et une évaluation de divers codes spécialisés ICR. Les conclusions de cette première partie ont servi à définir les besoins auxquels le projet SERENA-II, de nature expérimentale, devait répondre. Les essais ont été menés au CEA (France) et au KAERI (Corée du Sud) avec les dispositifs KROTOS et TROI, respectivement. Les objectifs du programme expérimental étaient de fournir des données pour (OECD Nuclear Energy Agency, 2014):

- Clarifier la phase d'explosion de l'ICR avec du corium prototypique et pour la validation de modèles d'explosion
- Vérifier l'extrapolation géométrique dans le cas de l'explosion de vapeur grâce aux deux différentes géométries utilisées (KROTOS et TROI)

Les questions issues du projet SERENA sur l'interaction ICR ont servi pour constituer le programme de recherche au niveau national AnR ICE dans lequel l'IRSN, le CEA, le LEMTA, EDF et AREVA collaborent. Ce projet à caractère théorique et expérimental vise à améliorer la connaissance des phénomènes physiques mis en jeu dans le code MC3D. Il comporte quatre volets principaux :

- Modélisation de la fragmentation et la dispersion des jets de corium pendant la phase de prémélange
- Modélisation et caractérisation de l'oxydation du corium
- Caractérisation de la solidification du corium
- Validation de modèles d'explosion

Les expériences effectuées dites « intégrales » sont réalisées avec du corium dans l'installation KROTOS au CEA. D'un autre côté, les expériences dites analytiques permettent une analyse détaillée de chacun de phénomènes mis en jeu (étude de propriétés thermodynamiques, physiques et chimiques du corium)(CEA) ainsi que l'étude de la fragmentation de jets de métal liquide (LEMTA).

1.2.1 ESSAIS FITS

Le programme FITS a été le programme "pionnier" en matière d'étude de l'Interaction Corium-Eau. Il a été réalisé par le laboratoire SANDIA (SNL) aux Etats-Unis et a comporté de nombreuses expériences, dans des configurations diverses et avec divers matériaux. Les conditions d'injection étaient cependant assez mal caractérisées. De ce fait, les résultats sont surtout qualitatifs. Il a permis les premières caractérisations des conditions d'obtention d'explosions spontanées.

Le programme s'est terminé par la destruction inattendue de la boucle lors de l'essai RC2 en thermite $Al_2O_3 - Fe$. Cet essai reprenait pour l'essentiel les conditions de l'essai RC1 mais a débouché sur l'explosion la plus violente jamais enregistrée, sans que les raisons n'en soient comprises. L'aspect stochastique de l'explosion de vapeur pourrait en être la cause. Les conditions d'injection, où le combustible est obtenu par une réaction thermitique d'oxydo-réduction préalable assez mal maitrisée, peut également expliquer ces différences de comportement.

Des explosions spontanées et violentes ont été obtenues avec un corium constitué d'un mélange $UO_2 - ZrO_2 - acier$, lui aussi issu d'une réaction thermitique. Ces essais sont malheureusement très peu documentés, la NRC (Nuclear Regulatory Commission par ses sigles en anglais) mettant en avant des difficultés d'interprétation des résultats. Les expériences FITS ne sont actuellement pas utilisées pour la qualification des logiciels car les conditions expérimentales de mise en contact des fluides, mal caractérisées, peuvent difficilement être reproduites dans les calculs.

1.2.2 ESSAIS CCM

Le programme CCM a ensuite été réalisé à Argonne (ANL) aux Etats-Unis, avec des conditions mieux maîtrisées et a fourni les premières données permettant de mieux comprendre le processus de prémélange. Sur les six expériences, réalisées en faisant varier la géométrie (bac plus ou moins monodimensionnel), les masses de corium et d'eau ainsi que les températures de l'eau, aucune explosion n'a pas été constatée. Le corium contenant de l'acier, ces essais fournissent en particulier des données intéressantes sur l'oxydation. Nous trouvons ainsi que la température de l'eau joue un rôle prépondérant. Quand l'eau est sous-refroidie le degré d'oxydation est de quelques pourcents, mais celui-ci monte à environ 30% en eau saturée. Cependant, les conditions d'injection restent trop incertaines et ces essais sont peu utilisés pour la validation des codes.

1.2.3 ESSAIS FARO

Les données de référence pour l'étude du prémélange sont celles issues des expériences FARO réalisées par le Joint Research Center (JRC) de la Commission Européenne à Ispra en Italie. La qualité du programme tient à la grande précision des conditions d'injection du corium, plus facilement exploitables pour les modèles et facilitant l'interprétation des résultats. Nous remarquons cependant que, sur la trentaine d'essais, seulement une douzaine est exploitable.

Les données des essais retenus comme exploitables sont regroupées dans le Tableau 2. Ce programme mettait en œuvre des masses beaucoup plus importantes de corium, de 100 à 200 kg (hormis « scoping tests » et l'essai L-29 qui a mal fonctionné). A part l'essai L-11, incorporant de l'acier, tous les tests ont été réalisés avec un corium oxydé $UO_2 - ZrO_2$. L'installation a été légèrement modifiée à partir de l'essai L-28. Jusqu'au test L-29, les essais étaient réalisés en eau saturée. Il s'agissait d'une part d'être plus proches des conditions en cuve et d'autre part de limiter les possibilités d'explosion spontanée, conclusion des essais FITS. L'essai L-31 a été réalisé avec une eau fortement sous-refroidie, de même que L-33 qui est similaire, mais pour lequel une explosion a été déclenchée de manière externe (pour clore le programme).

Test	L-06	L-08	L-11	L-14	L-19	L-20	L-24	L-27	L-28	L-29	L-31	L-33
Experimental conditions												
Corium composition[a]	A	A	B	A	A	A	A	A	A	A	A	A
Melt mass[b] (kg)	18	44	151	125	157	96	177	117	175	39	92	100[c]
Melt temperature (K)	2923	3023	2823	3123	3073	3173	3023	3023	3052	3070	2990	3070
Melt release diameter[d] (mm)	100	100	100	100	100	100	100	100	50	50	50	50
Melt fall height in gas (m)	1.83	1.53	1.09	1.04	1.99	1.12	1.07	0.73	0.89	0.74	0.77	0.77
System pressure (MPa)	5	5.8	5	5	5	2	0.5	0.5	0.5	0.2	0.2	0.4
Gas phase	Steam/Ar	Steam/Ar	Steam/Ar	Steam/Ar	Steam[e]	Steam[e]	Steam[e]	Steam[e]	Steam[e]	Argon	Argon	Argon
Water depth (m)	0.87	1.00	2.00	2.05	1.10	1.97	2.02	1.47	1.44	1.48	1.45	1.60
Water temperature (K)	539	536	535	537	536	486	425	424	424	297	291	293
Water subcooling (K)	0	12	2	0	1	0	0	1	1	97	104	124
Water Mass (kg)	120	255	608	623	330	660	719	536	517	492	481	625
Debris bed data[f]												
Hard debris, cake (kg, %)	6, 33	14, 32	0, 0	20, 16	77, 49	21, 22	27, 16	26, 23	77, 48	39, 100	0, 0	8, 8
Loose debris (kg, %)	12, 67	30, 68	146, 100	105, 84	80, 51	73, 78	141, 84	70, 77	84, 52	0, 0	83, 100	89, 92
Mean loose debris size (mm)	4.5	3.8	3.5	4.8	3.7	4.4	2.6	Na[g]	3.0	–	3.4	2.6[h]

[a] A: 80 wt.% UO_2–20 wt.% ZrO_2; B: 77 wt.% UO_2–19 wt.% ZrO_2–4 wt.% Zr.
[b] Total mass which interacted with water.
[c] Approximately 25 kg in water at time of trigger.
[d] Diameter of the orifice. In general a crust ~3 mm thick forms during melt release.
[e] >95 wt.% steam; <5 wt.% argon.
[f] Refers to debris found in the debris catcher.
[g] Not available.
[h] Steam explosion after ~25 kg of melt had penetrated in water.

Tableau 2 : Principales données et caractéristiques des lits de débris des essais FARO (Magallon, 2006)

1.2.4 ESSAIS KROTOS-ISPRA

L'analogue du programme FARO pour l'étude de l'explosion a été le programme KROTOS, réalisé également au JRC Ispra, à une échelle plus petite (volume de combustible de l'ordre d'un litre). Bien que dédiées à l'explosion, les expériences KROTOS ont néanmoins apporté des éléments qualitatifs de compréhension générale quant au rôle du prémélange.

Ce programme a mis en évidence une plus faible tendance à l'auto-explosion ainsi que des chargements en pression moins importants avec un corium oxyde $UO_2 - ZrO_2$ comparativement aux cas avec de l'oxyde d'alumine Al_2O_3. Ce résultat a fait l'objet de nombreuses spéculations sur l' « effet matériau ». Cependant, la différence de densité entre le corium et l'oxyde d'alumine peut déjà expliquer ce résultat pour une grande part (Figure 1-3). La plus faible densité de l'oxyde d'alumine (environ 2700 kg/m^3 contre environ 8000 kg/m^3) a un double effet : fragmentation des jets en particules plus grosses entraînant une moindre vaporisation et une moindre solidification ; augmentation du volume de combustible dans le mélange à cause d'une faible vitesse de dépôt sur le fond de la section d'essai.

Figure 1-3 : Visualisation de prémélange avec de l'alumine (à gauche, expérience KROTOS-57) et du corium (à droite, expérience KROTOS-58). La fenêtre de visualisation est de 10 x 20 cm.

1.2.5 ESSAIS KROTOS-CEA

L'installation KROTOS a été reconstruite (fortement modifiée) au CEA Cadarache et, grâce à un nouveau système de visualisation aux rayons X du prémélange, fournit des données intéressantes quant au prémélange (Figure 1-4), même si le programme reste orienté vers l'explosion. Ce dispositif peut fournir des données concernant la vitesse de fragments, la distribution de taille de particules, leur volume ainsi que le volume de vapeur et la vitesse de déplacement de poches de vapeur dans la zone de mélange.

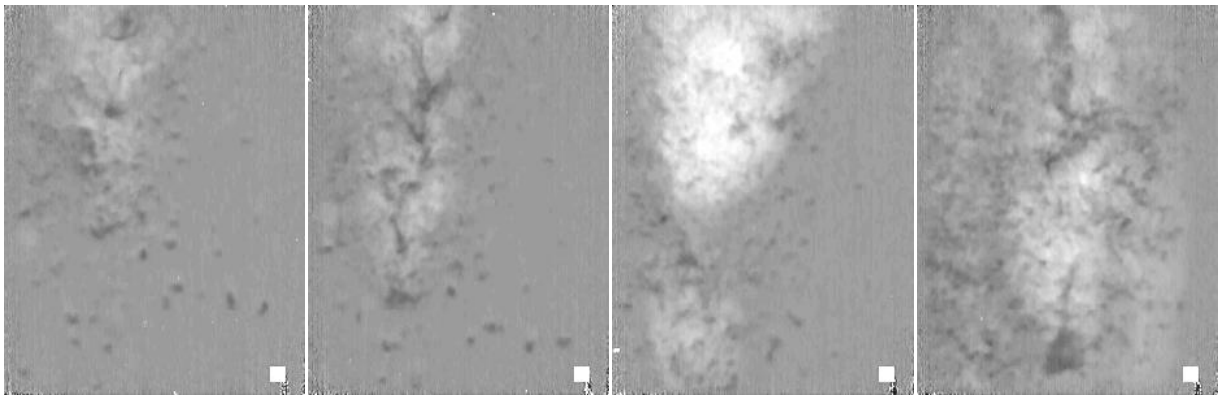


Figure 1-4 : Visualisation du prémélange durant le test KROTOS KS-2.

Pendant le projet international SERENA, ce dispositif expérimental, conjointement avec l'installation TROI sont utilisés dans le but d'étudier l'effet de échelle (jet de $3\ cm$ avec KROTOS et de $5\ cm$ avec TROI), l'effet matériau[6] avec composition oxydé, partiellement oxydé avec différents intervalles de température entre $T_{solidus}$ et $T_{liquidus}$.

Plus récemment, des expériences dédiées au prémélange sont programmées dans le cadre du projet ANR RSNR-ICE. Le Tableau 3 donne une indication sur les cinq essais prévu dans le projet. Nous remarquons que ces essais visent également à la caractérisation du prémélange (jets en chute gravitaire ou accélérés) principalement pour mieux décrire l'explosion. Pour les essais de prémélange (sans déclenchement de l'explosion), l'insertion d'une plaque plane au fond de la section d'essai permettra de caractériser la formation du lit de débris (voir Figure 1-5). Cette plaque est équipée de thermocouples pour mesurer la température du lit de débris. Le champ de visualisation par rayons-X permet d'observer le dépôt de particules sur cette plaque.

Référence	Type	Matériau	Vitesse d'injection du jet
KA-1	Prémélange	$80\%\ UO_2 - 20\%\ ZrO_2$	Normal
KA-2	Explosion	matériau 3 (SERENA) : $70\%\ UO_2 - 30\%\ ZrO_2 - acier - Zr$ Même composition KS5	Normal
KA-3	Prémélange	$80\%\ UO_2 - 20\%\ ZrO_2$	Rapide
KA-4	Explosion	Matériau 4 (SERENA): $70\%\ UO_2 - 30\%\ ZrO_2 + produits\ de\ fission + oxydes\ de\ fer + matériaux\ absorbants$ Même composition KS6	Rapide
KA-5	Explosion	A définir	

Tableau 3 : Spécification de divers essais KROTOS-CEA prévus dans le cadre du projet ANR RSNR-ICE

[6]matériau 1 : $70\%\ UO_2 - 30\% ZrO_2$, matériau 2 : $80\%\ UO_2 - 20\%\ ZrO_2$, matériau 3 : $70\%\ UO_2 - 30\%\ ZrO_2 + acier + Zr$ et matériau 4 : $70\%\ UO_2 - 30\%\ ZrO_2 + produits\ de\ fission + oxydes\ de\ fer + matériaux\ absorbants$

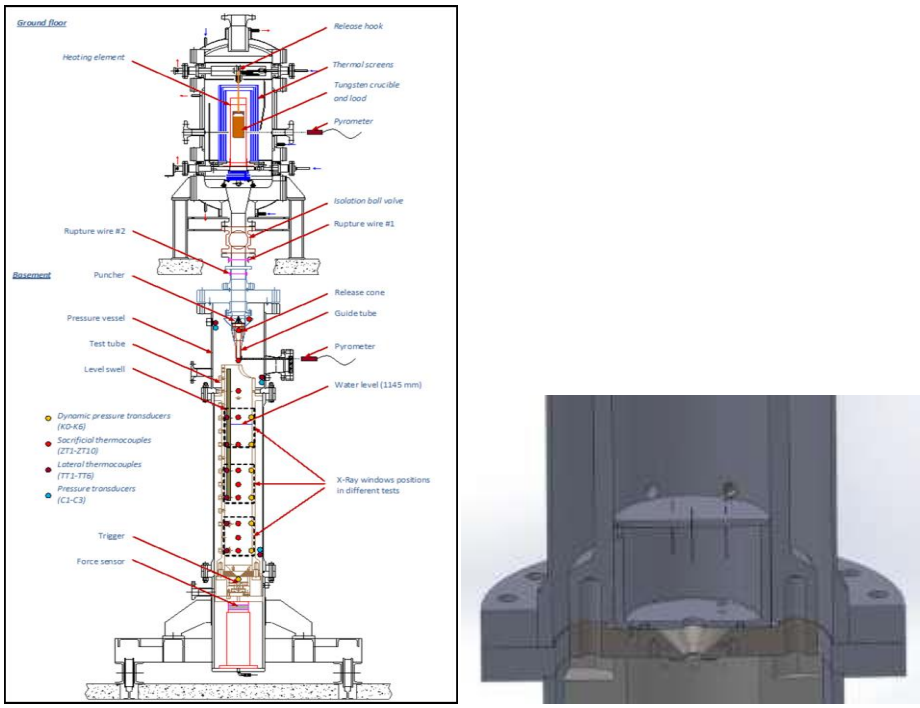


Figure 1-5 : Vue en coupe de l'installation KROTOS – CEA Cadarache

Le premier essai KA-1 a été réalisé au mois de mars de l'année 2015, cependant, les *résultats complets de l'essai n'ont pas été communiqués à la date de rédaction de cette thèse*.

1.2.6 EXPÉRIENCES TROI

Le programme TROI, conduit par le Korea Atomic Energy Research Institute (KAERI) en Corée du Sud, est réalisé à une échelle intermédiaire entre KROTOS et FARO (environ 15 kg de corium), dans une géométrie plus tridimensionnelle (hauteur d'eau à peu près égale au diamètre du bac). Cette installation, a été utilisée avec KROTOS dans le programme OCDE SERENA-2, les deux installations étant assez complémentaires. Le programme TROI comporte un grand nombre d'essais (une soixantaine), réalisés avec une installation en constante évolution afin d'améliorer la caractérisation de l'injection et les mesures. Un certain nombre d'essais ont été effectués en utilisant un bac en plexiglas pour contenir l'eau, ce qui permet une visualisation intéressante du prémélange (Figure 1-6) et, dans certains cas, du déclenchement de l'explosion.

Cette installation a permis de confirmer la possibilité d'explosions spontanées avec du corium, éventualité qui avait été remise en cause suite aux expériences KROTOS. La géométrie tridimensionnelle, proche de celle des essais FITS, semble favoriser le déclenchement spontané d'une explosion, en favorisant un meilleur mélange entre l'eau et le corium. Ce déclenchement semble avoir lieu quand le corium se retrouve au fond de la section d'essai.

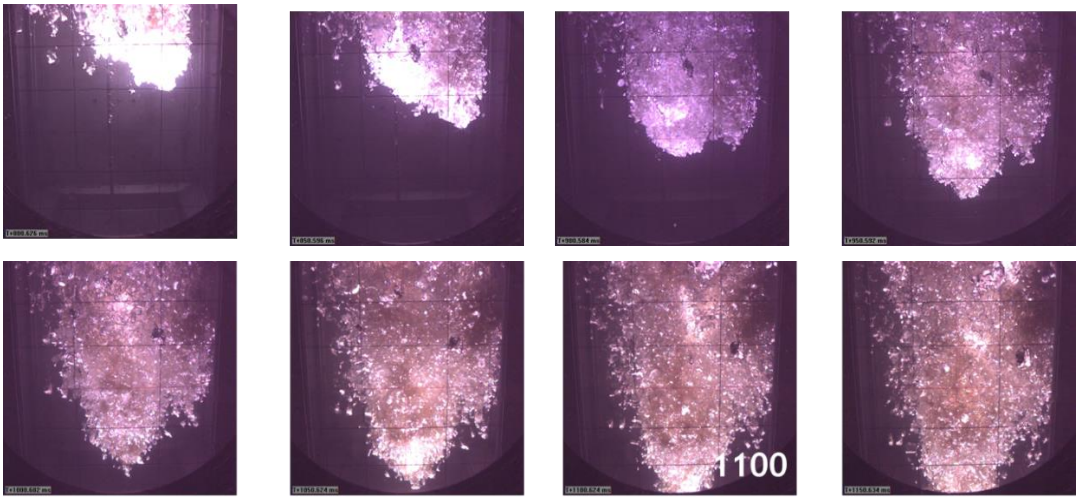


Figure 1-6 : Visualisation de l'essai TROI-VISU

1.2.7 CONCLUSION SUR LES ESSAIS

Il est difficile de remonter aux données concernant la fragmentation des gouttes et des jets de corium à travers les données expérimentales disponibles. La présence de la vapeur d'eau et sur certains essais d'une explosion limitent l'information utile pour l'analyse du prémélange. Pour l'instant, concernant les essais à hautes températures, la caractérisation des échelles de fragmentation se fait via l'étude des débris de corium en fin d'interaction.

Les fragments arrivent plus ou moins solides au fond de la section d'essai et forment un milieu plus ou moins poreux. Notons que l'intérêt de connaitre avec précision les caractéristiques du lit de débris concerne également son refroidissement, qui dépend de la distribution granulométrique des fragments déposés et de la porosité de l'agglomération. L'analyse complète de la granulométrie est donc conditionnée au refroidissement des gouttes de corium. Un refroidissement incomplet va engendrer une agglomération forte qui ne permettra pas d'obtenir une granulométrie précise. De la même manière, la fragmentation du jet peut ne pas être complète et celui-ci peut alors s'étaler sur le fond de la section d'essai. La Figure 1-7 donne des images du lit de débris recueilli dans l'expérience FARO L-28 (voir annexe 8.6), mettant en œuvre 180 kg de corium UO_2/ZrO_2. Le lit de débris obtenu contient une partie très compacte (on parle dans le jargon des spécialistes de « cake »), quasiment sans porosité, et une partie fragmentée, avec une porosité de l'ordre de 60 % (taux de corium de l'ordre de 40 %). La Figure 1-8 compare la configuration des lits dans les deux expériences L-24 et L-28. La configuration du lit de débris dans le cas L-24 permet de penser que le jet de corium a touché le bas de la cuve avant d'être complètement fragmenté. Nous rappelons que le diamètre du jet de L-24 est de 10 cm pour 5 cm pour L-28 (voir Tableau 2), ce qui pourrait expliquer une fragmentation incomplète. Le cas L-28 est plus difficile à interpréter puisque il y a à la fois absence d'étalement et très forte compacité de la partie agglomérée (cake). Ceci fait l'objet de débat, mais l'interprétation actuelle faite à l'IRSN est que la fragmentation a pu évoluer au cours du mélange (10 secondes) et que celle-ci pourrait être complète au début de l'essai, puis incomplète, suite à la forte éjection de l'eau hors de la section d'essai.

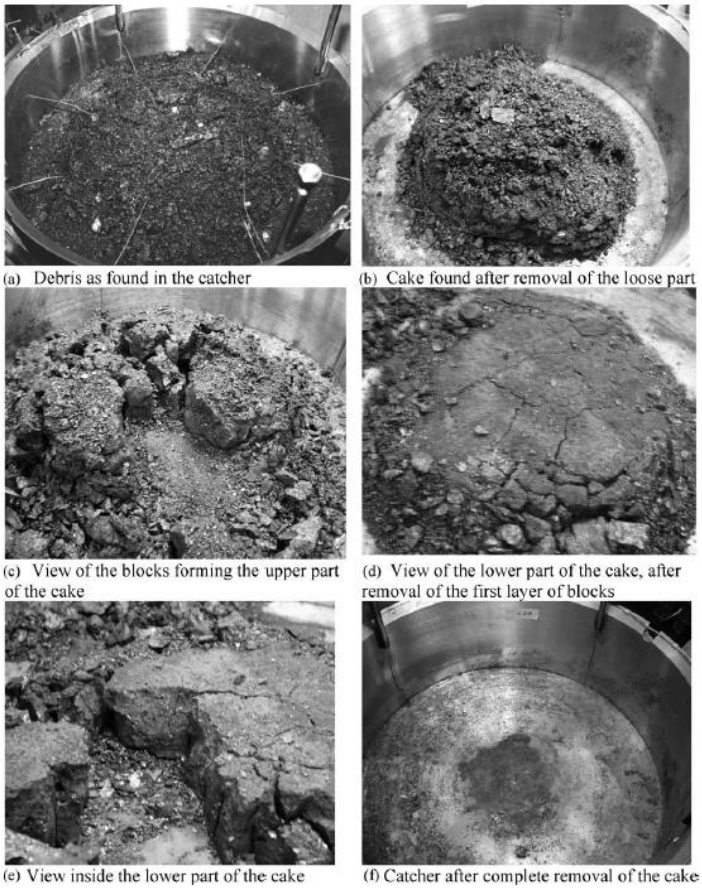


Figure 1-7 : Images du lit de débris de l'essai FARO L-28 à différentes étapes d'extraction (Magallon, 2006)

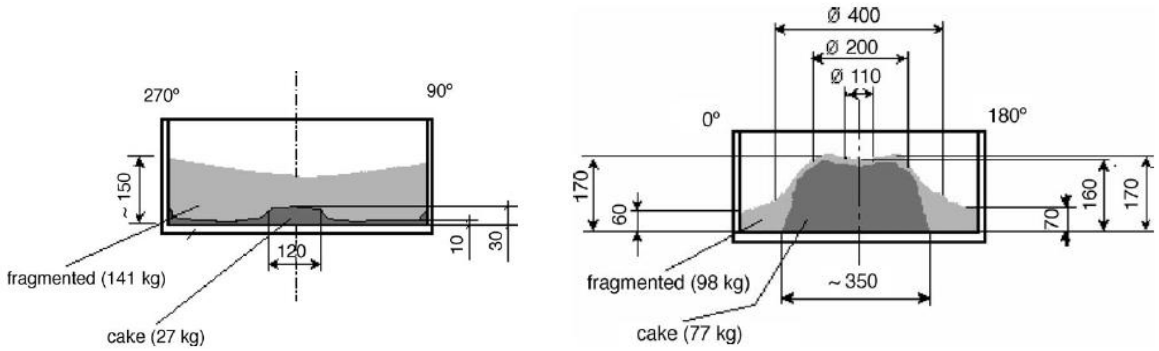


Figure 1-8 : Configuration du lit de débris. A gauche, FARO L-24 et à droite, FARO L-28 (dimensions en mm, (Magallon, 2006)**)**

Un processus de refroidissement complet sans « cake » sur le fond de la section d'essai peut fournir quelques indications sur la fragmentation. Si le refroidissement n'a pas impacté la fragmentation, nous devrons retrouver des particules avec une forme assez régulière, plus ou moins rondes (plus les particules sont grosses, moins elles sont rondes). Dans certains cas, les débris sont composés de nappes ou filaments, indiquant de toute évidence une solidification prématurée ayant limité la fragmentation.

Dans le cas où la solidification a impacté le processus de fragmentation, la forme des débris pourrait permettre de remonter qualitativement à des informations sur le processus de fragmentation et les régimes de fragmentation auxquels le corium a été soumis. Cependant, la méconnaissance d'une carte précise de régimes de fragmentation limite l'étude quantitative du phénomène.

Les divers essais FARO et KROTOS effectués en eau saturé et sous-refroidi sont actuellement une référence pour l'étude du prémélange et de l'explosion, respectivement. Les débris collectés dans le fond de la section d'essai ont été analysés qualitativement (par vidéo et microscope) et quantitativement (par tamisage).

L'analyse de débris montre que la composition du corium avec Zr incrémente le refroidissement pendant le prémélange avec une complète fragmentation du jet (absence de « cake ») (Magallon, 2006), comportement attribué principalement à l'oxydation du corium. D'autre part, pour les autres essais, les caractéristiques de la partie agglomérée montrent que ceux-ci ont été constitués à partir du corium qui n'a pas suivi de fragmentation lors de l'interaction. Le jet a donc impacté le fond de la section d'essai. Les essais FARO ont permis de confirmer que la fragmentation du jet est le résultat de l'érosion de la colonne produite par le cisaillement de l'écoulement environnant le jet. A la différence de la fragmentation de la tête du jet, l'érosion de la colonne est un processus qui se produit tout le long de l'interaction, tant que le corium est en contact avec de l'eau. Le cisaillement est d'autant plus responsable de la fragmentation que la masse de la coulée de corium est importante (Magallon et al., 1999). Les essais FARO n'ont pas révélé d'influence particulière de sous-refroidissement sur la fragmentation du jet. En effet, il n'a pas été constaté de fortes variations sur la longueur de rupture, ni la taille de fragments. (Namiech, 2002). Malgré les nombreux essais effectués, les nombre de paramètres étudiés ont été limités. Par ailleurs, de conditions plus maîtrisées de contact entre le corium et l'eau entre les divers essais sont requises, ainsi qu'une visualisation de l'interaction.

Le programme SERENA-II (volet expérimental) avec un système de visualisation rayons X et conçu pour une maitrise précise de l'injection de corium montre que le matériau prototypique (mélange $UO_2 - ZrO_2$) ne produit pas d'explosions de forte intensité comparé aux essais avec matériau simulant (test en alumine). Ceci peut être la cause d'une plus forte masse volumique du corium par rapport à l'alumine. Cette différence peut-être aussi à cause de la solidification du corium pendant le prémélange, qui n'est pas le cas pour l'alumine. La solidification est reconnue comme une de principaux phénomènes qui limitent l'explosion. Il est important de vérifier ce comportement avec différents matériaux avec différents intervalles de température entre le solidus et liquidus (OECD Nuclear Energy Agency, 2014). Le corium solide n'est pas donc disponible pour le processus de fragmentation fine pendant l'explosion. En effet, les essais en corium produisent plus petites gouttes, plus de vide et moins de dispersion, favorisant la formation de grandes régions de vapeur. Cette question constitue une de principales incertitudes pour les prédictions de l'ICR avec les codes de simulation numérique.

Des différences entre les résultats des essais TROI et KROTOS sont significatives pour des compositions de corium pas totalement oxydés. Les essais TROI montrent une importante variation du prémélange à cause de la production d'hydrogène (oxydation), cependant, la quantité de H_2 n'a pas été mesuré. Par contre, les essais KROTOS quantifient la masse d'hydrogène produit, cependant ils ne sont pas concluants sur le rôle de l'hydrogène lors de l'interaction.

Il semble que le rendement de l'explosion dépende des contraintes imposées par les parois de la section d'essai. En effet, les essais effectués dans KROTOS avec parois rigides résultent en un rendement d'explosion plus faible que celui relevé lors des essais TROI avec parois moins rigides.

Les essais TROI relèvent une intensité d'explosion plus importante par rapport aux essais KROTOS. Cette analyse semble contre-intuitive car, KROTOS est un dispositif de nature unidimensionnel (petite section transversale), normalement avec une efficience d'explosion plus grande par rapport au dispositif multidimensionnel TROI. Cette différence de comportement peut-être due à l'évolution du taux de vide. Les essais KROTOS montrent un taux de vide plus important que les essais TROI. Les essais KROTOS et TROI sont en général consistants par rapport aux effets d'échelle. Les résultats peuvent être extrapolés à l'échelle réacteur avec une incertitude acceptable.

Les précédents essais TROI avec un matériau eutectique ($70\%\ UO_2 - 30\%\ ZrO_2$) révèlent un caractère plus explosif que le corium non-eutectique ($80\%\ UO_2 - 20\%\ ZrO_2$). Ceci n'a pas pu être corroboré dans le projet SERENA (OECD Nuclear Energy Agency, 2014), car les essais effectués montrent un comportement inverse. L'influence de l'intervalle de solidification et de l'oxydation du corium dans l'ICR a besoin d'études complémentaires, telles celles proposées dans le projet ICE.

1.3 PHENOMENOLOGIE DE L'ICR

Maintenant, il est temps d'étudier les paramètres clés influençant la fragmentation des jets pendant la phase de prémélange. Dans la section suivante, nous analyserons les caractéristiques et phénomènes physiques lors du prémélange (longueur de rupture, diamètre des gouttes formées, vaporisation du réfrigérant, …). Nous comparerons aussi quelques modèles utilisés pour l'ICR.

1.3.1 VORTEX (FRONT DU JET)

Quelques études précédentes supposaient que, lors de la pénétration du jet dans l'eau, une boule de vortex se forme au front du jet (Burger et al., 1995; Schneider, 1993; B. W. Spencer et al., 1986), Figure 1-9. Cette boule a même été identifiée expérimentalement. Elle est due au frottement subit par le jet qui est décéléré et le corium s'accumule donc au front du jet. Le phénomène est identique à celui menant à la déformation des instabilités de Rayleigh-Taylor en phase non linéaire (Figure 1-9). Cette tête subie des effets de cisaillement et des fragments peuvent être éjectés à son équateur. Cette boule de vortex a fait l'objet de nombreuses discussions et controverses sur son existence d'abord, puis sur son importance relative dans le processus de fragmentation. (Dinh et al., 1999) ont suggéré que cette boule de vortex disparait quand le rapport de densités (ρ_d/ρ_c) est supérieur à 4. Dans le cas de jet de corium, avec un rapport 8 à 9, cette boule devrait donc être d'un faible impact. Elle n'est pas ou peu visible dans les expériences avec visualisation. Les simulations réalisées avec MC3D ne mettent pas non plus en évidence une boule très développée. Ainsi, il est maintenant supposé que cette boule de vortex, si elle se forme, est d'une faible ampleur et d'un impact globalement faible.

<u>Hypothèse</u> : **Bien que cela mérite confirmation, nous ferons dans la suite de la thèse l'hypothèse d'un impact négligeable de cette boule de vortex et que la fragmentation a principalement lieu le long de la colonne, par un processus d'arrachement progressif**. Nous ne reviendrons pas sur cet aspect par la suite.

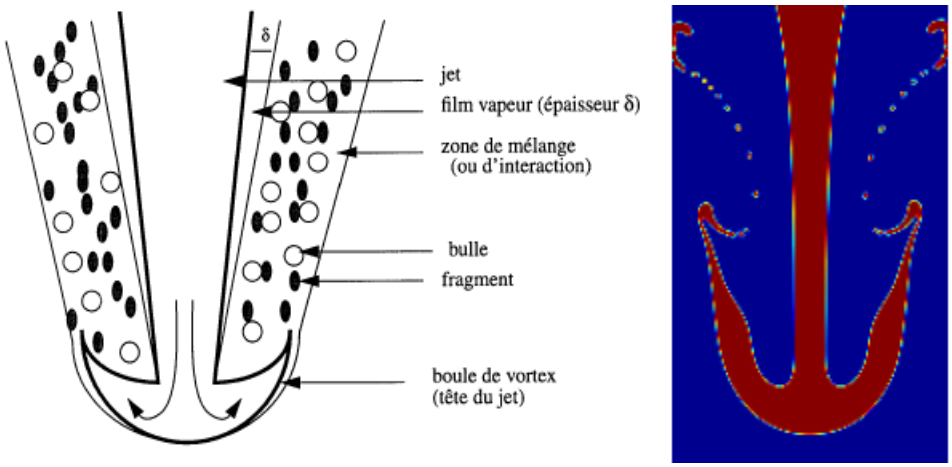


Figure 1-9 : Gauche : schéma conceptuel de la zone de mélange lors des interactions corium-eau (Meignen, 1995); droite : phase non-linéaire de l'instabilité Rayleigh-Taylor (simulation numérique avec le logiciel GERRIS-2D).

1.3.2 DESTABILISATION ET FRAGMENTATION DE LA COLONNE DU JET

La fragmentation du jet le long de sa colonne apparait ainsi être le mécanisme principal de génération des gouttes. Cette fragmentation est due aux effets de cisaillement entre le jet de corium et le réfrigérant. La fragmentation est donc précédée par des instabilités et déformations du jet qui croissent suffisamment jusqu'au moment où des gouttes et des ligaments sont arrachés de la surface.

Pour l'heure, **tous les modèles et toutes les expériences font l'hypothèse simplificatrice d'un problème avec un jet central dans une configuration axisymétrique** similaire à celle présentée en Figure 1-9 et Figure 1-12. Il s'agit d'une hypothèse extrêmement forte qui suppose donc l'absence d'écoulement transverse. Si cela simplifie fortement le problème et la compréhension des résultats expérimentaux, **la démonstration de la représentativité ou du conservatisme pour ce qui est de l'explosion, reste à faire.** Par ailleurs, en général, le jet est soumis à une chute préalable dans le gaz avant de pénétrer dans l'eau. Pendant cette chute, le jet est faiblement cisaillé par le gaz et il ne devrait pas être perturbé. Cependant, il a souvent été constaté des instabilités de grandes échelles naissant à la sortie de l'injecteur, déstabilisant globalement le jet et modifiant ainsi sa pénétration dans l'eau (Figure 1-10). Ces instabilités sont probablement liées à une turbulence interne se développant dans le système d'injection. Il n'y a d'ailleurs aucune raison de penser qu'il pourrait en être autrement dans la réalité.

Ces instabilités ont été observées, en particulier, dans les expériences TROI alors qu'elles n'étaient pas visibles dans les expériences FARO, avec pourtant un système d'injection similaire. Une explication possible est la masse plus importante (10 fois plus) dans FARO, qui impose une charge statique plus importante dans le creuset contenant le corium, minimisant ainsi la turbulence. Ceci est important car le processus de pénétration dans l'eau s'en trouve fortement impacté. Dans les expériences TROI, il est difficile de déduire une longueur de pénétration. Les visualisations ont mis en évidence qu'un jet développé et compact pouvait ensuite apparaitre.

Figure 1-10 : image de jets de corium dans les expériences KROTOS (gauche) et TROI (droite) illustrant des fortes déformations avant de pénétrer dans l'eau.

1.3.3 LONGUEUR DE RUPTURE

Que ce soit pour les expériences intégrales en corium ou pour les essais en matériau simulant avec ou sans ébullition, les mesures disponibles ne permettent qu'une description globale de la fragmentation. Pour caractériser globalement ce processus, il est couramment fait appel au concept de longueur de rupture du jet. Cette grandeur est supposée fournir un taux de fragmentation global. Cependant, en absence de visualisation, cette longueur est obtenue à partir des capteurs de températures (pour les essais à haute température) et est souvent sujette à interprétation. De fortes incertitudes existent donc. Nous pouvons par exemple citer le cas des récents essais TROI du programme SERENA-II dont les mesures indiquent une fragmentation immédiate dès l'entrée dans l'eau, alors que les essais FARO, assez similaires en termes de géométrie, donnaient des longueurs de rupture adimensionnelle (ratio L/D) de l'ordre de la vingtaine. Un essai avec visualisation a montré d'une part que capteurs et images ne donnaient pas la même interprétation et que la descente du jet est transitoire et ne se conduit pas nécessairement à un processus de fragmentation constant dans le temps. Cette grandeur (longueur de rupture) permet d'évaluer grossièrement l'impact des propriétés physiques étudiées, mais ne comporte aucune information par rapport au processus et mécanisme de génération de gouttes.

La longueur de rupture du jet est définie comme la profondeur maximale que le jet parcourt dans le réfrigérant avant complète fragmentation (voir Figure 1-11).

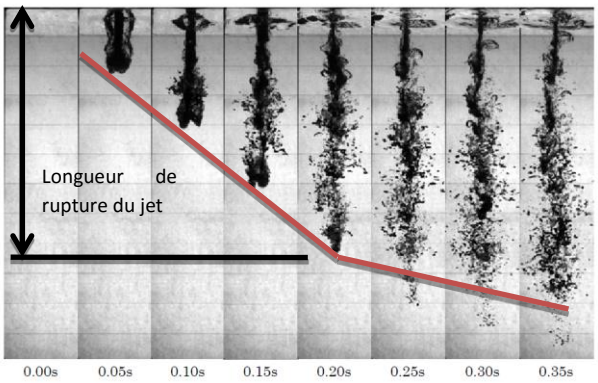


Figure 1-11 : Mesure de la longueur de rupture (Matsuo et al., 2008)

Cette longueur est généralement calculée à partir d'un suivi (visuel ou par capteurs de température) de la position du front du jet. Généralement, le détachement du front du jet occasionne un changement dans sa vitesse de pénétration dans le réfrigérant. Cette longueur est présentée dans sa forme adimensionnelle (longueur de rupture du jet/ diamètre du jet au moment du contact avec le réfrigérant). L'usage de ce paramètre est très courant. Cependant, les valeurs expérimentales ne sont pas toujours précises et elles n'apportent aucune ou très peu d'information concernant le processus de fragmentation du jet.

Si nous supposons que la fragmentation du jet dans le réfrigérant par unité de surface est constante, nous pouvons en déduire un taux de fragmentation global par unité de surface (V_e), qui a la dimension d'une vitesse (on parle aussi de vitesse d'érosion), par la relation :

$$\frac{L_R}{D_j} = \frac{V_j}{2V_e}$$

Dans ce cas, le moment de rupture du jet correspond au diamètre de jet $D_j = 0$, comme l'indique la figure ci-dessous :

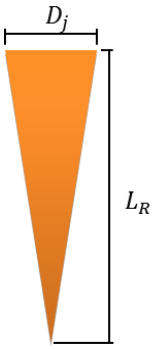


Figure 1-12 : Forme schématique du jet avec l'hypothèse d'une fragmentation globale constante par unité de surface.

(Abe et al., 2006) proposent de regarder la longueur de rupture du jet en fonction de sa vitesse de pénétration. Cette méthode de mesure de la longueur de rupture est possible dans le cas où une visualisation complète de la zone de mélange soit disponible. En repérant la position du front du jet par traitement d'image, la vitesse du front du jet peut être obtenue par différentiation des positions du front par rapport au temps d'acquisition. La Figure 1-13 montre un exemple de l'évolution de la vitesse de pénétration du jet en fonction du temps.

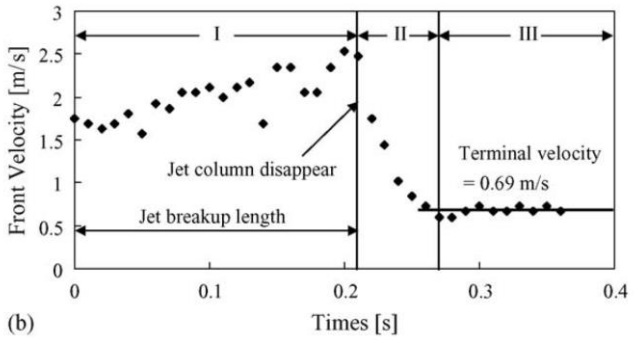


Figure 1-13 : Estimation de la longueur de rupture du jet par la vitesse de pénétration (Abe et al., 2006)

Le graphe présente trois zones différentes et bien distinctes. La première correspond au moment de pénétration du jet dans l'eau avant fragmentation complète. La deuxième zone correspond au moment de la rupture totale du jet avec une chute brutale de la vitesse. La troisième et dernière zone correspond à la vitesse de chute terminale du jet. A ce moment-là, le jet n'existe plus, en effet, le combustible se présente sous forme de gouttes. La longueur de rupture est définie comme la distance que parcourt le jet entre le début de la phase I et le début de la phase II.

La valeur de la longueur de rupture peut varier selon les conditions de l'interaction. Pour les situations à haute température, la longueur du jet est souvent plus importante que celle relevée pour les essais sans ébullition. En effet, la vapeur autour du jet retarde les instabilités dans la colonne du jet.

1.3.4 FRAGMENTATION DU CORIUM

Classiquement, nous parlons de fragmentation primaire pour décrire le détachement de gouttes à partir du jet. La fragmentation secondaire concerne une re-fragmentation de ces gouttes (Figure 1-14). La réalité apparait plus complexe puisqu'il y a à la fois une déformation des interfaces, à cause des instabilités où se mêlent plusieurs échelles de longueur, et la fragmentation qui est finalement le moment final où la goutte se détache, sous l'effet des forces de tension superficielle. Les expériences montrent qu'il est souvent difficile de distinguer jet et gouttes puisque le corium passe par des états souvent extrêmement déformés, sous forme de filaments, avant de produire des gouttes, si la solidification n'est pas intervenue avant.

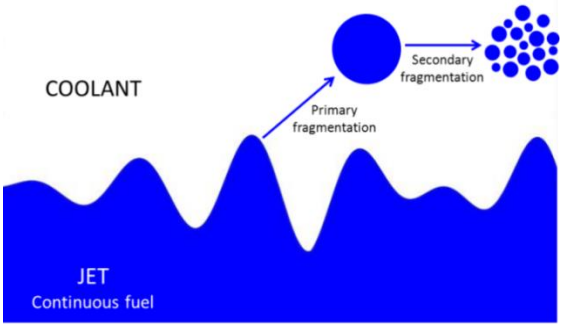


Figure 1-14 : Schéma classique de la fragmentation du combustible

Pour l'instant, nous proposons de conserver cette formulation courante : **la fragmentation primaire est le processus qui fait passer le corium d'un état continu à un état discontinu**. Cependant, ce processus sera surtout vu sous l'angle de la modélisation. **Une déformation locale plus ou moins forte de l'interface pourra en fait être considérée comme une première phase de fragmentation**.

1.3.5 INSTABILITES ET FRAGMENTATION DU JET

Généralement, les grandes structures de l'écoulement déstabilisent le jet et génèrent de grandes déformations. Ces déformations prennent souvent la forme de grandes ondulations hélicoïdales (par exemple Figure 1-4 et Figure 1-10), mais également de renflements axisymétriques (Figure 1-15). Il semble en fait que ces déformations sont ensuite soumises à de plus petites déformations à cause des structures plus petites de l'écoulement, à une échelle plus locale. Nous assistons donc à une déformation avec plusieurs échelles de longueur. Eventuellement, les grandes déformations peuvent provoquer une fragmentation de grande échelle, formant de grosses gouttes, ou plus généralement de gros morceaux, qui vont ensuite se re-fragmenter, mais la fragmentation à petite échelle peut également intervenir avant la fragmentation de grande échelle.

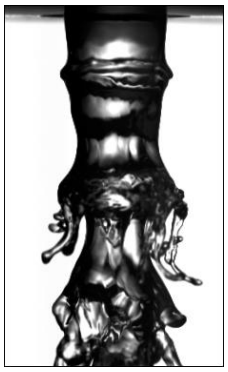


Figure 1-15 : Renflements axisymétriques (Marmottant, 2001)

<u>Hypothèse</u> : il semble dès lors que nous puissions faire une distinction entre les grandes échelles qui déstabilisent globalement le jet et pilotent la dispersion, et les petites échelles qui définissent la dimension finale (hors effets de solidification prématurée) des particules. *Cette hypothèse constitue une approche nouvelle du problème qu'il conviendra de justifier et vérifier*. En effet, les modèles actuels considèrent que le taux de fragmentation et le diamètre de particules doivent être obtenus via un seul processus. Les modèles les plus courants se basent sur le modèle d'instabilités de Kelvin-Helmholtz. Ce modèle aboutit à l'identification d'un taux de croissance des instabilités en fonction de la longueur d'onde (λ), avec un maximum que nous identifions comme la dimension caractéristique des fragments en posant $D_f = Cte\,.\lambda_{max}$. Ce modèle KH constitue une des approches de compréhension de l'instabilité, mais il ne modélise réellement aucune caractéristique des instabilités. En effet, ce modèle considère un cas très hypothétique d'une instabilité de fluides non-visqueux parallèles avec une couche de cisaillement d'épaisseur nulle et sans effets non-linéaires (voir Figure 1-16). Cependant, ce modèle nous donne plusieurs ordres des grandeurs de grande utilité pour la modélisation de la fragmentation.

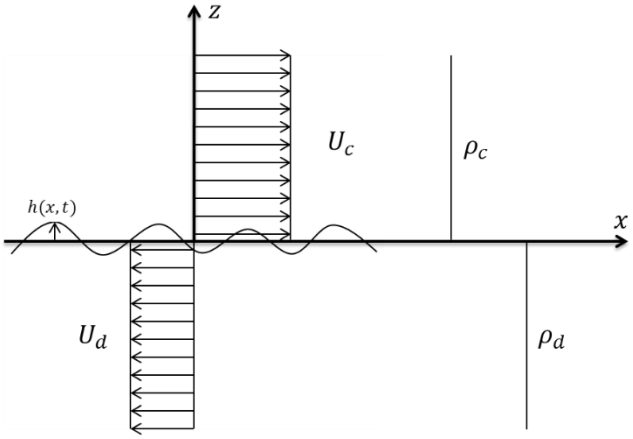


Figure 1-16 : Schéma de la mise en problème de l'instabilité KH

Nous rappelons que la croissance de l'instabilité peut se mettre sous la forme :

$$h = h_0 e^{\sigma t + ikx} = h_0 e^{ik(x+ct)}$$

σ et c sont complexes et, avec notre notation, $\sigma_r = k\,c_i$ est le taux de croissance de l'instabilité, dont la dimension est l'inverse d'un temps. c_i est une vitesse que nous considèrons comme caractéristique. En effet, en dérivant l'expression ci-dessus, nous avons :

$$\frac{dh}{dt} = kc_i h$$

c_i est donc la vitesse de l'instabilité quand $kh = 1$.

L'expression du taux de croissance σ de l'instabilité en fonction des propriétés physiques des fluides et de la vitesse relative (ΔV_{dc}) est donnée par :

Eq. 1-1 $$\boldsymbol{\sigma} = -\frac{ik(\rho_c U_c + \rho_d U_d)}{(\rho_c + \rho_d)} + \sqrt{\frac{\rho_c \rho_d k^2 (\Delta V_{dc})^2}{(\rho_c + \rho_d)^2} - \frac{\sigma k^3}{(\rho_c + \rho_d)}}$$

Avec : $\Delta V_{dc} = U_d - U_c$

Le maximum de taux de croissance σ_r se trouve quand $\frac{d\sigma_r}{dk} = 0$ (avec σ_r la partie réelle de σ):

Eq. 1-2 $\boldsymbol{k_{maximum}} = \frac{2}{3}\,\frac{(\Delta V_{dc})^2 \rho_d \rho_c}{\sigma(\rho_d+\rho_c)}$, où **Eq. 1-3** $\boldsymbol{\lambda_{maximum}} = \frac{2\pi}{k_{maximum}}$ longueur d'onde la plus excitée

Nous définissons $c_i = \frac{\sigma_r}{k}$ (Vitesse caractéristique de la croissance de la perturbation):

Eq. 1-4 $\boldsymbol{c_i} = \frac{\sqrt{\rho_c \rho_d (\Delta V_{dc})^2 - k(\rho_c+\rho_d)\sigma}}{\rho_c+\rho_d}$, où le taux de fragmentation est proportionnel au $\boldsymbol{c_i}$

En remplaçant la valeur de $k_{maximum}$ dans l'expression de la vitesse caractéristique de la perturbation, nous obtenons l'expression suivante:

Eq. 1-5 $\boldsymbol{c_i} = \frac{\Delta V_{jc}\sqrt{\frac{1}{3}\rho_j \rho_c}}{\rho_c+\rho_j}$

Cette expression montre que le taux de fragmentation est indépendant de la tension superficielle.

1.3.6 FRAGMENTATION DES GOUTTES

Le processus de fragmentation secondaire en phase de prémélange de l'ICR ne peut pas être clairement identifié car la résolution spatiale et temporelle des instruments de visualisation ne permettent pas de le capturer. Rappelons que dans le cadre ICR, la fragmentation fait intervenir un fluide à très haute température dans un réfrigérant volatile. Il y a donc nécessairement des effets thermiques qui peuvent intervenir. En situation de prémélange en ICR, les gouttes se trouvent soit dans le liquide entourées par un film vapeur (Figure 1-17), soit dans le gaz (vapeur plus éventuellement gaz incondensables). Dans le premier cas, la situation est plus complexe puisque des effets liés à l'ébullition peuvent intervenir. L'impact du film est difficile à caractériser et il est supposé en première approximation que son impact est faible. Deux configurations sont classiquement étudiées : liquide/liquide et liquide/gaz. Les gouttes sont par ailleurs considérées comme étant dans un état complètement liquide. Ces deux hypothèses sont assez fortes et devront être reconsidérées pour des études postérieures. Cependant, pour l'heure, ce sont les processus même de la fragmentation qui demeurent incertains et doivent être clarifiés.

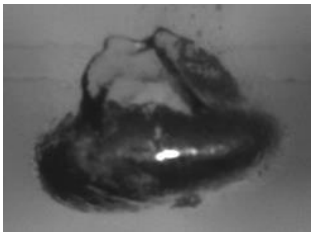


Figure 1-17 : Goutte d'étain chaude dans l'eau (De Malmazet, 2009)

Classiquement la fragmentation secondaire est caractérisée par deux nombres adimensionnels (Weber et Ohnesorge). La fragmentation dans le gaz a été plus étudiée par le passé et ses régimes de fragmentation sont pour la plupart bien documentés. Cependant à cause des petites échelles considérées, la connaissance est incomplète. Ce n'est que récemment, avec le développement des méthodes expérimentales, que des visualisations précises ont été obtenues (voir Figure 1-18).

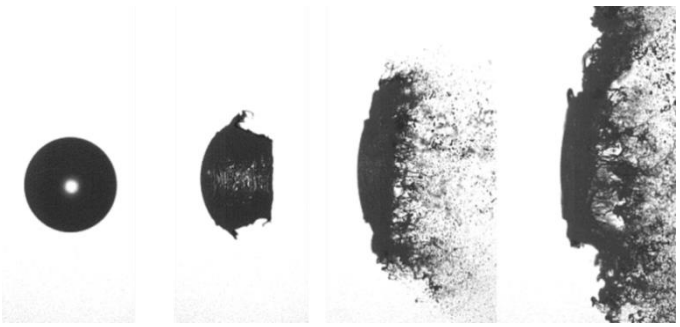


Figure 1-18 : Fragmentation aérodynamique (Theofanous et al., 2012)

La fragmentation dans le liquide a fait l'objet de peu d'investigation et ses régimes de fragmentation sont supposé identiques à ceux dans le gaz. Les processus à l'origine de la fragmentation hydrodynamique dans un milieu liquide feront l'objet d'une étude spécifique développée dans les chapitres 5 et 6.

Aussi complexes qu'ils soient, les mécanismes hydrodynamiques sont relativement bien compris en comparaison du phénomène dit de fragmentation thermique, spécifique à l'ICR. Ce phénomène très spectaculaire a été mis en évidence dans les années quatre-vingts dix (voir par exemple Figure 1-19). Même si une explication semble faire consensus, nous pouvons encore trouver dans la littérature récente

des explications divergentes. Citons, à propos de ce phénomène, les travaux réalisés par J. Lamôme (Lamome, 2007; Lamome and Meignen, 2008), dans le cadre d'une thèse à l'IRSN.

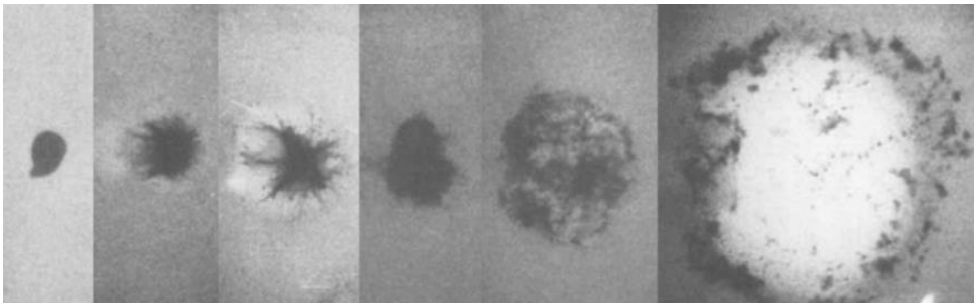


Figure 1-19 : Fragmentation thermique (Ciccarelli and Frost, 1994)

Dans ce phénomène très isotrope (donc sans effet hydrodynamique), le consensus est que la fragmentation serait due à des surpressions générées par des contacts locaux entre la goutte chaude et l'eau liquide (vaporisation rapide du réfrigérant) ; ce contact résulterait d'instabilités dans le film de vapeur entourant les gouttes, induites par de petites perturbations en pression. Ce phénomène provoque une véritable pulvérisation de la goutte en quelques millisecondes. Il est un initiateur possible du déclenchement des explosions de vapeur. Cependant, des travaux récents réalisés au CEA (Figure 1-20) indiquent que le phénomène peut être partiel et ne pas déclencher d'explosion généralisée. **La fragmentation thermique pourrait donc intervenir au cours du prémélange.**

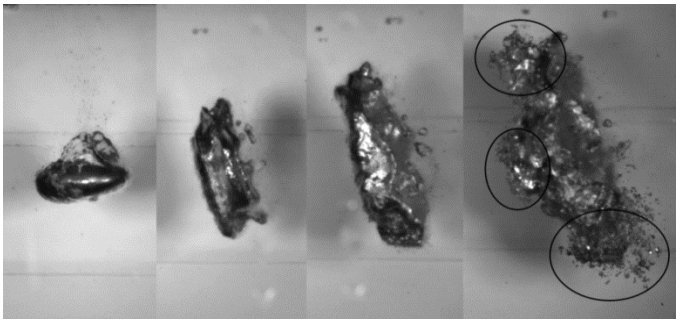


Figure 1-20 : Fragmentation de gouttes chaudes. Les cercles indiquent des zones localisées d'interaction thermique (De Malmazet, 2009).

Cependant, si ce phénomène de fragmentation thermique apparait potentiellement pendant la phase de prémélange, il s'avère complexe et agit de façon localisée. Par conséquent, il n'est pas pris en compte dans les modèles ICR et est supposé avoir un impact assez faible. Nous ferons également la même hypothèse, car aucune modélisation simple ne semble réalisable et vérifiable (dans le cadre de cette thèse). Nous considérons que la fragmentation de gouttes est causée seulement par des effets hydrodynamiques qui perturbent la goutte, la déforment et produisent sa fragmentation.

1.3.7 ECHELLES DE LONGUEUR-DIAMETRE GOUTTES

Concernant la taille des particules issues de la fragmentation des jets pendant l'ICR, nous obtenons en général un spectre assez large de tailles de fragments. A titre d'exemple, la Figure 1-21 fournit la répartition en masse telle que mesurée après un essai TROI (voir la légende pour la lecture de la figure). Dans cette expérience, le diamètre médian est d'environ 3 mm. Environ 40 % des gouttes ont un diamètre supérieur à 4 mm et environ 25 % ont un diamètre inférieur à 2 mm. Mis en termes d'aire interfaciale, nous voyons que la répartition est très différente. Cette fois, 70 % des fragments ont un diamètre inférieur à 2 mm. Puisque la chaleur est échangée par les interfaces, nous remarquons qu'en réalité les petites gouttes sont plus importantes qu'il n'y parait : si elles ne représentent que 30 % de l'énergie emmagasinée, elles comptent, tant qu'elles sont chaudes, pour 70 % du transfert de chaleur. Utiliser un diamètre unique pour les décrire pose donc un problème.

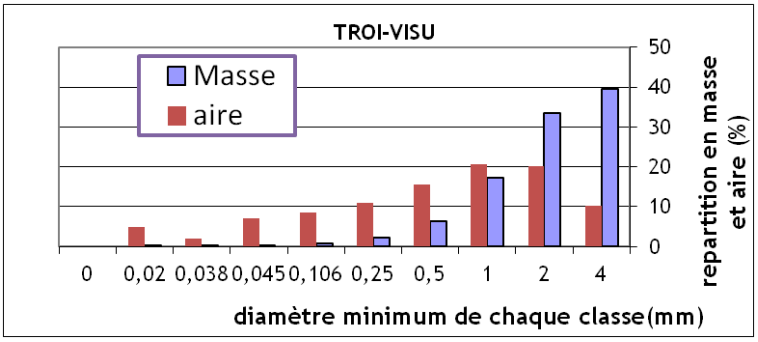


Figure 1-21 : Répartition en masse et aire du corium dans l'expérience TROI-VISU. Le diamètre correspond à la valeur minimum de chaque classe considérée. Lecture : il y a 33 % de la masse avec des diamètres compris entre 2 et 4 mm

Il est courant de considérer que la distribution[7] en masse peut-être approximativement représentée par une fonction log-normale, ce qui est souvent vrai en première approximation. Il semble cependant qu'en général la fonction Gamma soit plus représentative (voir annexe 8.4). La distribution pour le test TROI-VISU (programme SERENA-2) est comparée à ces deux fonctions dans la Figure 1-22 et la comparaison est excellente, en particulier pour la loi Gamma. Par contre, nous constatons que pour TROI-20, qui est également un essai de prémélange, la distribution à deux bosses ne peut pas être représentée précisément par ces fonctions.

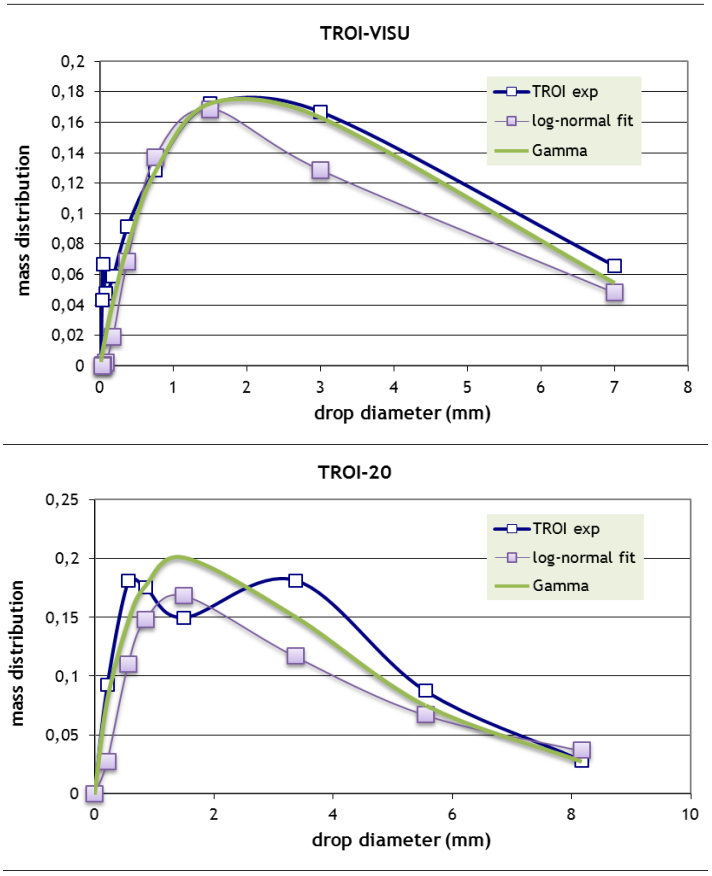


Figure 1-22 : Distribution en masse de la taille des fragments récupérés dans les expériences TROI-VISU et TROI-20, comparées à une loi log-normale ajustée et une loi Gamma ajustée.

Il est donc impossible de représenter précisément le spectre par la donnée d'un seul diamètre et les diamètres moyens ne servent qu'à fixer des ordres de grandeurs et à les comparer d'une expérience à l'autre. Nous estimons cependant que le diamètre de Sauter (moyenne en aire) est le plus représentatif en considération des échanges entre fluides. La Figure 1-23 fournit une comparaison des diamètres de

[7] Nous rappelons que la distribution est la répartition par unité de diamètre.

Sauter de différentes expériences en corium en fonction de la vitesse estimée du jet au moment de contact avec la surface d'eau.

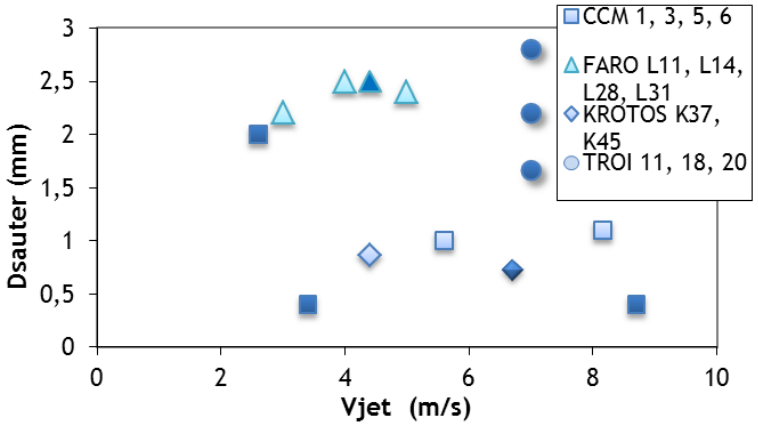


Figure 1-23 : Diamètre de Sauter des quelques expériences en corium. La couleur des symboles est relative à la température de l'eau : les tests représentés en bleu clair ont été effectué avec une eau à température de saturation, alors que ceux en bleu foncé sont avec une eau sous-refroidie (température ambiante en général).

Concernant le diamètre final de particules la situation semble confuse. Nous constatons en premier lieu une absence apparente de lien avec la vitesse du jet. Dans une hypothèse de film mince de vapeur (donc de faible impact de la vapeur), la fragmentation est liée à l'écart de vitesse entre jet et eau (tous les modèles prédisent un impact fort de la vitesse). Dans le cas du modèle de Kelvin-Helmholtz, nous attendons une décroissance proportionnelle au carré de la vitesse. Les résultats expérimentaux plaident pour une autre explication. Une hypothèse de film épais, où la vitesse du jet est faible devant la vitesse de la vapeur, elle-même conditionnée par les effets gravitaires, est plus cohérente avec ces résultats. Nous notons que la pression ambiante, dans ces conditions, à un impact faible puisque le facteur dominant de l'instabilité (dans le modèle de Kelvin-Helmholtz) est $\rho \Delta V_{dc}{}^2$, lui-même proportionnel à la charge hydrostatique pilotant la dynamique du film de vapeur.

A y regarder de plus près, il est également étonnant de constater qu'en fait, il semble y avoir deux familles de résultats. En effet, tous les points situés dans la partie haute du graphe correspondent à des expériences avec des jets assez larges (au moins 5 cm) injectés dans des bacs de diamètres assez importants (environ 70 cm)[8]. Tous les points situés dans la partie basse concernent, quant à eux, des tests avec des jets fins (2 cm environ) dans des bacs étroits (20 cm environ). **Ce fait est pour l'instant totalement inexpliqué et ne peut pas être reproduit par les modèles actuels.**

1.3.8 VAPORISATION DU REFRIGERANT

Les instabilités et la fragmentation du jet sont influencées par le changement de phase du réfrigérant et sa mise en mouvement par des effets d'ébullition. En effet, à cause de la haute température du jet $(T \approx 3000\ K)$ un film de vapeur se forme autour du jet, empêchant le contact direct entre l'eau liquide et le jet chaud. La vaporisation du réfrigérant est en retour fortement impactée par la présence de gouttes chaudes éjectées du jet. Elle dépend fortement de la température de l'eau. Des essais réalisés au laboratoire Argonne en eau sous-refroidie et à saturation montrent que, pour l'eau à saturation, la vapeur se génère rapidement et forme de grandes cavités (Okkonen, 1999) qui acquièrent une vitesse de remonté importante. Ceci génère plus d'instabilités à la surface du jet, plus de cisaillement et plus de dispersion du corium dans le réfrigérant. Pour le réfrigérant sous-refroidi, la formation de vapeur se fait de façon progressive avec moins de dispersion du corium. Ce même comportement à été également relevé lors des essais FARO.

Certains modèles considèrent que la vaporisation autour du jet est si intense qu'un film plus ou moins épais de vapeur entoure complètement le jet. Le cisaillement est alors produit principalement par de la vapeur d'eau surchauffée. C'est également ce que tendent à montrer les calculs MC3D (Figure 1-2), surtout en configuration réacteur. Certains modèles font l'hypothèse inverse d'un film très mince qui n'aurait pas d'impact sur les instabilités. Cette dernière hypothèse ne semble pas réaliste, hormis dans le cas des certaines expériences avec jets de petit diamètre ou à température modérée. Il faut donc considérer que le jet est, en général, entouré d'un film de vapeur épais. Cependant, les caractéristiques

[8] Les tests CCM sont réalisés avec deux géométries faisant varier en particulier le diamètre du bac d'eau et le diamètre d'injection de corium.

exactes de ce film sont inconnues, car il pourrait contenir des gouttes d'eau en plus des gouttes de corium. Nous notons que la modélisation du code MC3D est supposée représenter l'ensemble des situations, via une extension des modèles d'instabilités considérant que l'un des fluides en interaction est diphasique.

Il apparait également des calculs réalisés en particulier avec MC3D que l'ébullition du milieu ambiant n'est pas stationnaire. Les récentes visualisations au rayons X fournies par les essais KROTOS du programme SERENA (Figure 1-24) tendent à montrer que le film est instable et qu'il apparait de grandes poches de vapeur qui se propagent le long du jet. Ce comportement peut contribuer à déstabiliser le jet et modifier sa fragmentation.

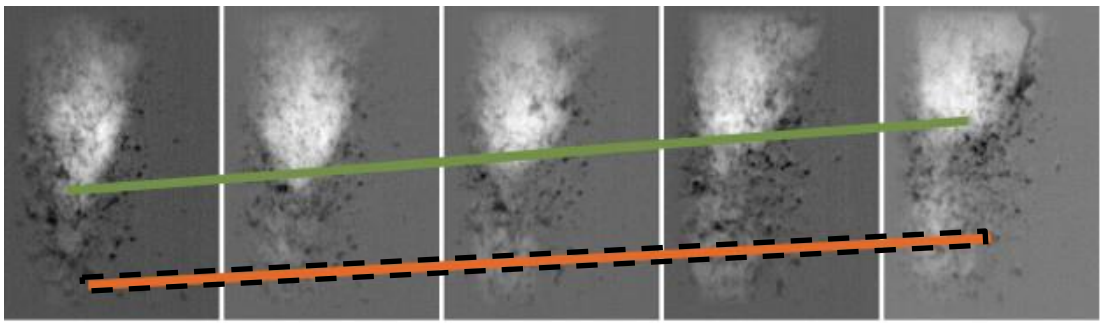


Figure 1-24 : Images au rayons X, essai KROTOS ; Intense fragmentation du corium (ligne orange, trait discontinu) due à la remonté de grandes poches de vapeur (ligne vert, trait clair)

Si nous admettons que le jet est entouré d'un film épais de vapeur, c'est-à-dire d'un milieu avec un fort taux de vide, alors le cisaillement est en grande partie dû au mouvement du film de vapeur sous l'effet des forces de volume. La vitesse de la vapeur peut être très importante et il apparait que dans beaucoup de configurations, la vitesse du jet est faible devant celle du milieu environnant. Il vient que la fragmentation doit être peu dépendante de la vitesse du jet. Cette hypothèse simplificatrice implique alors que la longueur de rupture devrait être proportionnelle à la vitesse du jet ($L_R/D_j = V_j / 2V_e$, $V_e =$ vitesse moyenne d'éjection des gouttes). Dans son analyse, R. Meignen (Meignen, 1995) a proposé une corrélation qui, dans le cas de jet de corium se réduit à $L_R/D_j \sim 5V_j$. La comparaison de ce résultat avec les résultats expérimentaux est fournie en Figure 1-25. Nous constatons en premier lieu qu'il est difficile de dégager une tendance de ces résultats. D'ailleurs, les expériences TROI ne sont pas placées dans cette figure : la longueur de pénétration a une valeur proche de zéro. Il est apparu par la suite que la mesure n'était pas pertinente pour TROI du fait d'une évolution des caractéristiques de fragmentation. La situation est sans doute identique pour certains tests CCM. S'il semble exister une tendance à une augmentation avec la vitesse, il apparait clairement qu'il est difficile de se référer à cette mesure de la longueur de rupture pour valider de manière précise un modèle de fragmentation.

Sur cette même Figure 1-25 est tracé le résultat de la corrélation d'Epstein (Epstein and Fauske, 2001), qui prédit une valeur constante pour la longueur de rupture. Ceci sera rediscuté par la suite mais nous pouvons préciser à ce stade, qu'une telle corrélation est justifiée par une modélisation simple basée sur la théorie des instabilités de Kelvin-Helmholtz et globalement validée par les résultats expérimentaux de fragmentation de jets de métaux liquides dans un autre liquide sans ébullition (métaux à bas point de fusion). Le modèle d'Epstein correspondrait donc à une hypothèse de film mince. S'il est difficile de conclure que le modèle d'Epstein est satisfaisant pour les tests en corium, il est également indéniable que l'ordre de grandeur est respecté. Il est donc, sur la base de ces mesures, difficiles de trancher, même si l'hypothèse de film épais semble plus adaptée.

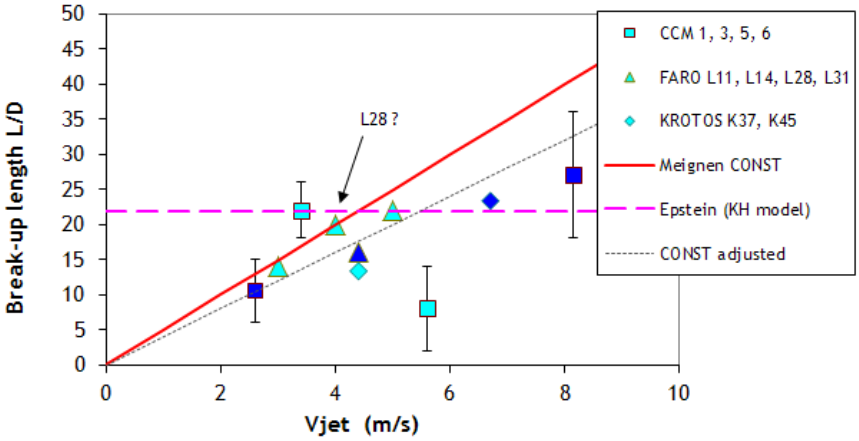


Figure 1-25 : Présentation de quelques longueurs adimensionnelles de pénétration des jets de corium dans l'eau. La couleur des symboles est relative à la température de l'eau : les tests représentés en bleu clair ont été effectués avec une eau à température de saturation, alors que ceux en bleu foncé sont avec une eau sous-refroidie (température ambiante en général). Les traits sont relatifs aux modèles ou corrélations. Pour les données CCM, les auteurs ont estimés une incertitude sur la mesure, transcrite ici par des barres d'incertitude.

1.4 MODELISATION DE LA PHASE DE PREMELANGE DE L'ICR

La modélisation de tous les phénomènes présents dans la phase de prémélange de l'ICR s'avère très complexe. Depuis les années 90, la modélisation s'est réalisée via le développement de codes de simulation numérique du type CFD. Plusieurs codes ont été conçus avec des succès divers. Nous présentons maintenant rapidement les principaux modèles, en partant des modèles analytiques jusqu'à la modélisation mise en œuvre dans MC3D, code que nous utilisons et qui est considéré comme un des plus avancés pour la simulation de l'ICR.

1.4.1 MODELES ANALYTIQUES

La plupart de modèles analytiques décrivant la fragmentation des jets de corium sont des modèles monodimensionnels dits «intégraux ». Certains sont encore utilisés mais d'autres ne servaient qu'à produire une analyse et des corrélations/modèles simplifiés pour des codes CFD. Ces modèles proposent une description globale de l'écoulement plus ou moins poussée. En particulier, le milieu ambiant et son ébullition doivent être modélisés (voir par exemple Figure 1-26). Avec le recul, il apparait que la modélisation du milieu ambiant constitue en soi un problème majeur, nécessitant des hypothèses dont le réalisme est sujet à caution. Ces travaux proposent de calculer la fragmentation du jet de corium à travers un calcul de stabilité en phase linéaire. Ces calculs d'instabilité peuvent être simples (instabilité de Kelvin-Helmholtz) ou très complexes (équation d'Orr Sommerfeld étendue).

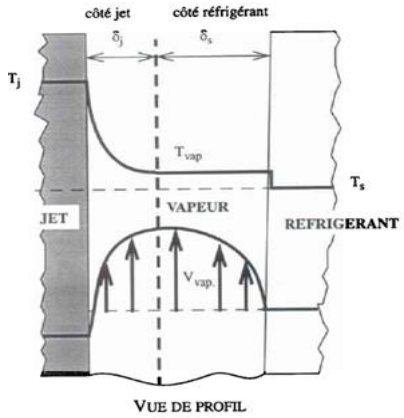


Figure 1-26 : Exemple de modélisation du milieu ambiant dans le modèle de Meignen (Meignen, 1995). Nous y supposons l'existence d'un film épais composé de deux couches limites turbulente.

Les principaux modèles de ce type sont les suivants :

- Le modèle THIRMAL (ANL, (Wang et al., 1989)). Celui-ci utilise le modèle simple de Kelvin-Helmholtz. Les auteurs ont préféré privilégier la complexité "globale" du problème et le couplage de multiples phénomènes. De multiples effets sont incorporés, chacun étant modélisé de manière assez simple.

- Le modèle IKEJET de Bürger (Burger et al., 1995; Bürger et al., 1991). Dans ce modèle, Bürger a choisi une approche nettement plus complexe et, en principe plus réaliste concernant l'instabilité. Le modèle est basé sur une simplification de l'équation d'Orr-Sommerfeld donnant une linéarisation de l'équation de Navier-Stokes. Une version simplifiée de ce modèle est introduite dans le code JEMI, développé par l'Université de Stuttgart (Pohlner et al., 2006).
- Le modèle COSTA (Meignen, 1995). Ce modèle est encore d'un niveau de complexité supérieure, basé sur une l'équation d'Orr-Sommerfeld complète. Il intègre même des effets supplémentaires comme les gradients de viscosité, qui jouent a priori un rôle important. Ce modèle a ensuite été repris par Namiech (Namiech, 2002) qui a intégré certains effets liés à la présence des gouttes de corium dans le film de vapeur.

Toutes ces approches se limitent à une description des instabilités en mode linéaire. Il semble que cela soit acceptable pour des déformations en réalité assez conséquentes, de l'ordre du quart de la longueur d'onde. Le modèle COSTA était basé sur une des théories les plus complètes des instabilités entre fluides. D'autres théories existent, permettant d'aborder le problème au-delà de la phase linéaire. Cependant, il est clair que ces approches se heurtent à des difficultés importantes liées à la complexité du milieu environnant au jet. Nous nous trouvons alors avec des modèles déséquilibrés, très complexes sur certains points, trop simples sur d'autres. C'est le constat fait par Bürger pour JEMI, mais également par Meignen pour MC3D, qui se sont finalement tournés vers des modèles plus simples pour la fragmentation, en cohérence avec les capacités globales de modélisation.

Nous notons de plus que les modèles d'instabilité ne décrivent pas la fragmentation elle-même et que des hypothèses supplémentaires doivent être faites. Tous ces modèles utilisent un schéma commun de description (que nous appellerons schéma classique), décrit en Figure 1-27.

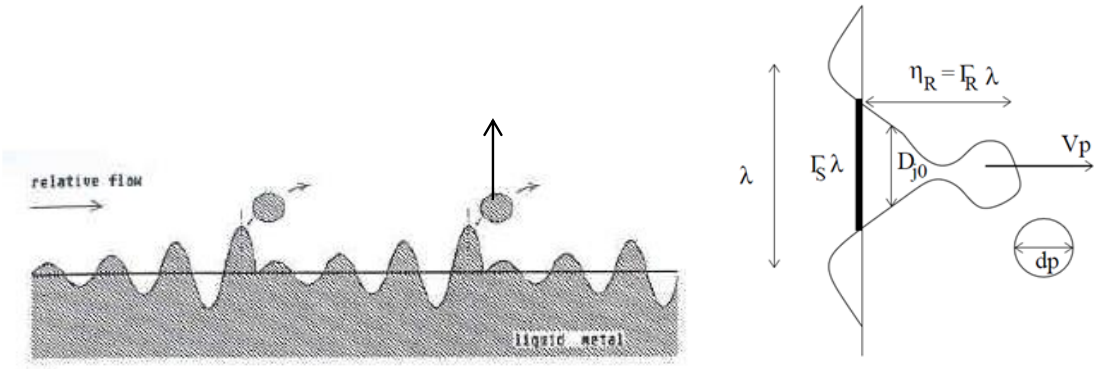


Figure 1-27 : Schéma classique du processus de fragmentation. Il est supposé qu'à la surface du jet, une instabilité se développe de manière prédominante. Elle croit jusqu'à une certaine hauteur où une goutte (ou un filament qui va ensuite se recasser par effet capillaire) va se former. L'onde continue alors avec une amplitude plus faible et croit à nouveau.

Les modèles d'instabilité étant basés sur une décomposition en mode normaux, sans interaction entre modes, chacun de ces modes a sa propre longueur d'onde et son taux de croissance. Il est d'usage de considérer que la longueur d'onde qui se développe est celle ayant le plus fort taux de croissance. Nous considérons des relations de proportionnalité entre instabilité et fragmentation :

- La taille des gouttes est proportionnelle à sa longueur d'onde :

$$D_d \sim \lambda$$

- Le taux de fragmentation et la vitesse d'éjection des particules sont considérés comme proportionnels à la vitesse caractéristique de l'instabilité (c_i), reliée au taux de croissance σ par la relation $\sigma = kc_i$, k étant le nombre d'onde associé à λ, voir annexe 8.2 et paragraphe 1.3.5 :

$$\Gamma_{frag} \sim V_e \sim c_i$$

Nous notons ainsi que ces modèles postulent au final que taux de fragmentation et dimensions des particules finales sont directement reliés. C'est justement cette hypothèse que nous remettons en cause dans ce travail en postulant que l'échelle finale de fragmentation, conduisant à déterminer la taille des particules, est différente de celle imposant la fragmentation du jet, reliée aux grandes structures d'instabilités observées.

1.4.2 MODELISATION CODES DE CALCUL CFD

Il existe actuellement quelques familles de modèles type CFD, toutes basées sur une modélisation couplant plus ou moins les différents phénomènes physiques entre eux. Pour plus de précision, nous nous reporterons au document de comparaison des modèles, émis pendant le programme SERENA-I (Meignen and Magallon, 2005), disponible également dans le rapport IRSN DSR/SAGR/05-66. Les divers codes se caractérisent principalement par les choix de modélisation sur :

- la description et la fragmentation du corium,
- la carte d'écoulement diphasique (eau liquide – vapeur d'eau),
- le nombre de constituants,
- les transferts de chaleur et de masse entre constituants.

Il est, avant tout, nécessaire de faire des choix pour décrire l'écoulement du corium (jet/gouttes de tailles très différentes). Certains outils ne considère qu'un seul champ numérique tandis que d'autres, tels MC3D, ont fait le choix de découpler jet et gouttes dans deux champs numériques.

Du point de vue numérique, deux grandes méthodes sont utilisées : la méthode lagrangienne et la méthode eulérienne. Il y a une certaine tendance à l'utilisation de la méthode lagrangienne pour le suivi de particules dispersées (issues de la fragmentation du jet) car celle-ci permet une résolution précise de la convection de gouttes et des phénomènes comme la fragmentation, le refroidissement et la solidification. Cependant, celle-ci pose des difficultés numériques, puisque le réfrigérant est toujours modélisé par une méthode eulérienne, et le code MC3D reste pour l'heure avec une description eulérienne des gouttes.

1.4.2.1 Descriptions mono-champ

La plus 'simple' des modélisations consiste à considérer que le corium est une collection de gouttes. Cette description mono-champ, adoptée par Theofanous dans le code PM-ALPHA (3D) ou par Corradini dans le code TEXAS (1D), pose problème pour au moins deux raisons :

- Il n'est considéré qu'un seul processus de fragmentation de gouttes. Le résultat est très dépendant de la dimension initiale choisie pour les gouttes injectées ;
- le modèle ne permet pas de décrire une dispersion radiale du corium due à la fragmentation (le cas TEXAS, qui est un code 1D, est particulier puisque dans ce cas, le corium est toujours dispersé de manière homogène avec l'eau).

Cette modélisation est en général réalisée via une description lagrangienne où les gouttes de corium sont suivies (en groupes). Plus précisément, il y a dans ce cas autant de champs numériques que de groupes de particules. Il n'y a cependant qu'une seule description physique pour toutes les gouttes.

La seconde méthode, adoptée par exemple dans les codes SIMMER-III ou IVA[9] (toutes versions) consiste, dans une description eulérienne, à ne considérer qu'un seul champ numérique, où le corium est sous forme compacte ou dispersée en fonction du taux de présence dans la maille. Une telle description est maintenant reconnue comme peu appropriée, pour la simple raison de son intrinsèque dépendance au maillage.

1.4.2.2 Description avec deux champs

Constatant les limitations d'une description mono-champ pour le corium, il est apparu nécessaire de procéder à un découplage et de décrire différemment le corium suivant qu'il est sous forme de jet compact ou sous forme de gouttes. Les modèles de la première famille (modélisation lagrangienne de gouttes) peuvent « facilement » être modifiés en réalisant une modélisation séparée du jet. En réalité, cette approche n'est pas si aisée et seules des descriptions très simplifiées des jets ont été réalisées. C'est le cas par exemple des codes JEMI et JASMINE (JAEA, Japon). Dans ce cas, la forme du jet est présupposée et il évolue selon une direction imposée, en interagissant peu avec le milieu environnant (Figure 1-28). Le jet est donc essentiellement un terme source de gouttes de corium à l'intérieur de la zone de mélange. Ce terme source est évalué soit sur la base d'un modèle séparé et découplé de l'écoulement fluide environnant, comme dans JEMI, soit à l'aide d'une corrélation plus ou moins empirique (cas de JASMINE). Dans les deux cas, la boucle d'interaction n'est pas complète (Figure 1-29) et l'impact de l'hydrodynamique sur la fragmentation est fait de manière indirecte (modèle séparé ou corrélation).

---

[9] Ces deux codes ne sont pas utilisés dans les groupes internationaux de travail sur l'ICR

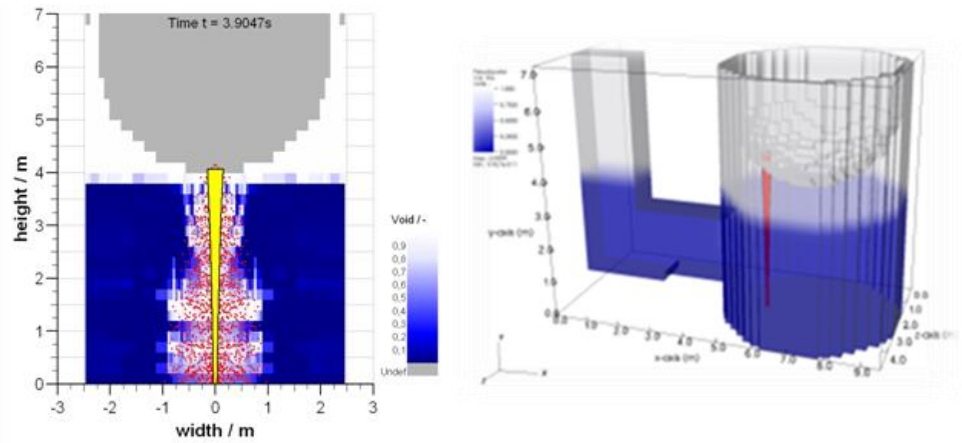


Figure 1-28 : Représentation graphique de résultats de calculs réalisés avec JEMI dans le cadre du programme SERENA-2. Gauche : calcul 2D d'une configuration de type, REP 900 MWe, droite : calcul 3D du même type de réacteur. La direction du jet est imposée, il n'y a pas d'interaction directe avec le milieu environnant, en particulier les effets de l'écoulement transverse pour les jets décentrés. La fragmentation est elle-même évaluée via un modèle séparé.

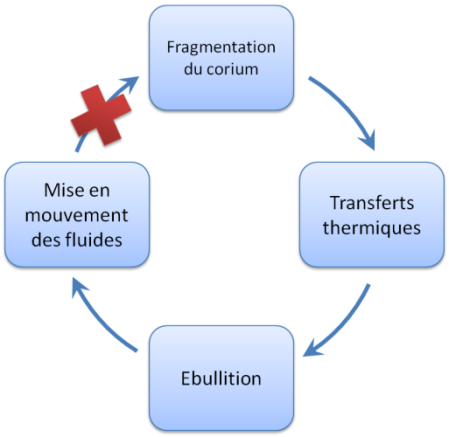


Figure 1-29 : Principe de simulation du prémélange par découplage entre hydrodynamique réelle calculée et fragmentation

Enfin, la dernière méthode, mise en œuvre dans MC3D, vise une description plus complète et plus ambitieuse avec modélisation des deux formes (continues et fragmentées) du corium via deux champs numériques séparés[10]. Dans le modèle complet, le couplage total de la Figure 0-4 est mis en œuvre. En particulier, le champ décrivant le jet est entièrement couplé avec l'hydrodynamique locale. Cependant, nous pouvons utiliser l'hypothèse simplificatrice optionnelle d'une corrélation pour la fragmentation, laquelle ne prend pas en compte les aspects locaux (on se ramène alors au schéma de la Figure 1-29).

Les calculs de la Figure 1-2 utilisent une telle description simplifiée. Malgré l'utilisation d'une corrélation globale pour la fragmentation, l'interaction du jet avec son environnement produit sa déviation par rapport à l'axe (à cause du couloir de ventilation) et augmente sa surface d'échange et sa fragmentation. Ainsi, dans de nombreuses configurations, les calculs mènent à une surpression dans le puits de cuve qui engendre une remontée du corium dans la cuve. Il existe donc un certain couplage entre fragmentation et environnement du jet. La question du couplage est importante. La Figure 1-29 indique qu'il existe une "boucle" dans les couplages des divers phénomènes. Du point de vue numérique, cette boucle est difficile à maitriser puisqu'elle est de nature instable. Cette instabilité recouvre d'ailleurs une réalité physique, puisque c'est sans doute elle qui entraine la transition vers l'explosion. Cependant, nous n'avons pas l'ambition de modéliser prémélange et explosion en même temps. Notre connaissance des mécanismes de déclenchement étant jugé trop incertaine. **Un des enjeux de la modélisation du corium est ainsi de maitriser cette boucle d'interaction, dont le point faible se situe au niveau de la fragmentation**.

[10] Nous verrons plus loin qu'un développement est actuellement en cours, dans le cadre de cette thèse, pour décrire les gouttes par plusieurs champs numériques.

1.4.3 MODÉLISATION MC3D

MC3D est un code de simulation numérique de la thermo-hydraulique multiphasique et multi-constituant. Le code MC3D a une histoire assez longue et est maintenant développé par l'IRSN, en coopération avec le CEA (avec le support financier d'EDF et d'AREVA).

Le code utilise une méthode combinée de volumes finis et de différences finies pour résoudre les équations de conservation de masse, de quantité de mouvement et d'énergie (Meignen and Picchi, 2012). Ces équations sont décrites d'une manière eulérienne et discrétisées selon un maillage cylindrique ou cartésien structuré. Le code a été construit de manière modulaire avec une notion d'"application". Une application est définie par un groupe de composants matériaux, lesquels peuvent être groupés dans des mélanges "massiques" (même volume), mélanges de quantité de mouvement (même vitesse) et de mélanges d'énergie (même température) (Voir Figure 1-30). Une application se défini également par les interactions modélisées entre les différentes composantes et les différents mélanges : frottements, transferts d'énergie, changement de phase, réactions chimiques, entre autres. Des spécifications numériques, tels que le suivi d'aire interfaciale pour les phases discontinues, ou le suivi d'interface pour les phases continues, peuvent également être utilisées.

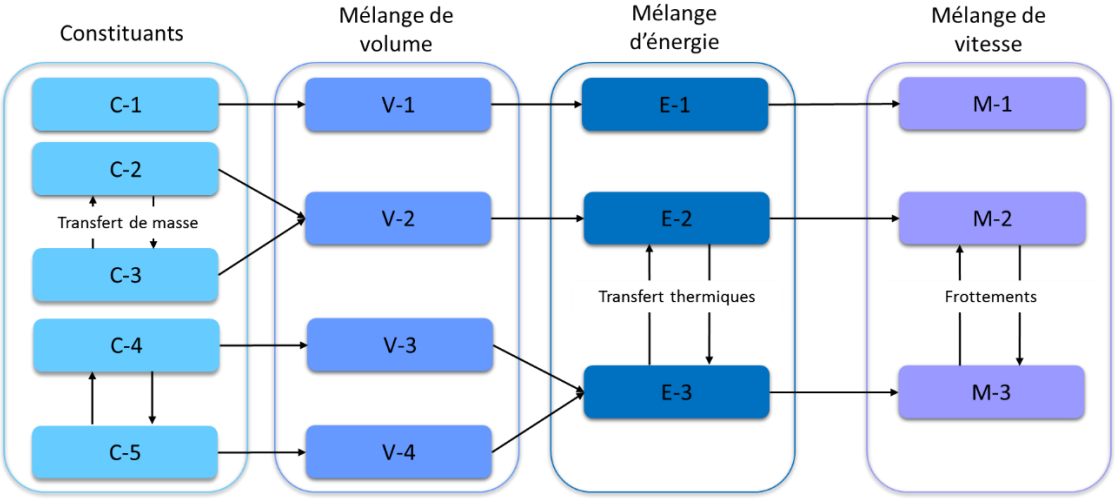


Figure 1-30 : Arrangement générique par groupes et par composantes dans le logiciel MC3D

Toutes les applications sont construites avec la même structure, les mêmes modèles mathématiques et le même cœur de résolution. Le code actuel comporte deux principales applications spécifiques à l'ICR : prémélange (PREMEL) et explosion (EXPLO), ces applications pouvant recevoir des descriptions optionnelles regroupées dans des notions de sous-applications (par exemple PREMEL_MD et EXPLO_MD, pour la méthode multi champs. Nous reviendrons à ce sujet plus tard dans le chapitre 4). La résolution des équations de conservation est effectuée avec une méthode semi-implicite tirée de la méthode ICE (Harlow and Amsden, 1971), avec une méthode itérative Newton-Raphson :

- utilisation des équations de la conservation de la quantité de mouvement pour exprimer les vitesses en fonction de pressions locale et celles des voisins,
- expression des équations d'énergie et de masse d'après les expressions obtenues précédemment en fonction de la pression,
- combinaison des équations (énergie et masse) pour obtenir un système en pression,
- résolution du système puis obtention des nouvelles variables,
- itération jusqu'à convergence des bilans de masses et d'énergie.

Les équations de conservation de masse et d'énergie sont écrites en volumes finis. L'équation de conservation de la quantité de mouvement est écrite en différences finies. Les variables principales du système sont les fractions volumiques de chaque mélange de masse, les vitesses de chaque mélange de quantité de mouvement, les températures de chaque mélange d'énergie et la pression.

Le corium est décrit par deux champs numériques (champ continue et dispersé). Le champ continue de corium est utilisé pour décrire plusieurs situations (jet, grandes structures de corium, bain de corium, entre autres) et fait l'objet d'un traitement spécifique de l'interface avec une méthode de type VOF-PLIC. La méthode VOF-PLIC (volume of fluid – Piecewise linear interface construction) assure la reconstruction de l'interface du champ combustible continue, sa convection et la suppression de diffusion numérique. Cette méthode basée sur la fraction volumique du constituant « JET » permet la reconstruction de l'interface de corium sous forme de droites (2D) ou de plans (3D). Cette méthode est

disponible pour les géométries cartésiennes 2D et 3D et pour le cylindrique 2D (il est difficile de représenter des plans en géométrie cylindrique 3D). Elle est cependant disponible pour les calculs 3D cylindrique moyennant des approximations. Cette méthode a été choisie car elle permet une bonne représentation de l'interface même avec des mailles très déformées (un côté beaucoup plus grand qu'une autre). Actuellement, la tension de surface n'est pas prise en compte. En effet, les simulations de l'ICR utilisent des échelles spatiales très larges, où les effets de tension superficielles sont négligeables.

Le corium dispersé en gouttes peut être calculé avec un seul champ (application PREMEL), deux champs (gouttes et fragments, application EXPLO, voir (Meignen et al., 2014b) pour plus de détails) ou plusieurs champs (sous-application PREMEL_MD). Dans le cadre de cette thèse nous nous intéressons aux applications PREMEL et PREMEL_MD. Cette dernière utilise une description multi-champs pour la description des gouttes de corium, description que nous avons nommée MUDROPS (ou MD), que nous avons contribué à mettre au point dans le cadre de cette thèse.

L'application PREMEL de MC3D est celle couramment utilisée pour les calculs et analyses de sûreté, puisque PREMEL_MD est en cours de développement. La résolution du champ dispersé y est effectuée par une seule équation de conservation de masse, une équation de conservation de la quantité de mouvement, une équation d'énergie et une équation de suivi d'aire interfaciale. Le diamètre des gouttes est calculé en fonction de l'aire interfaciale volumique A de gouttes et de la fraction volumique α dans la maille :

$$SMD = 6 * \frac{\alpha}{A}$$

L'équation d'aire interfaciale comporte des termes sources correspondant à la fragmentation (primaire et secondaire) et à la coalescence (en grosses gouttes ou en jet). Nous reviendrons plus en détail sur ces termes sources dans le chapitre méthodologique de MC3D (chapitre 4) et dans l'annexe 8.5.

Pour décrire plus finement le corium, un modèle de type MUSIG (MUlti SIze Group) a été récemment implanté dans le code MC3D. Ce modèle consiste à utiliser plusieurs champs (que nous appellerons désormais classes) de gouttes, chacun avec son propre bilan de masse et de température. L'objectif principal de cette méthode est de décrire de façon plus précise les différentes tailles de gouttes qui peuvent coexister et par conséquent, améliorer le calcul des phénomènes liés à la taille de particules, en particulier la solidification et les transferts thermiques.

Concernant l'aspect dynamique, la méthode basique, initialement implémentée dans MC3D, considère que les différentes classes de gouttes sont décrites avec une seule équation de quantité de mouvement, c'est-à-dire, toutes les gouttes se déplacent à la même vitesse (MUSIG – homogène). La principale justification de ce type de méthode est bien sûr le temps de calcul, mais également la simplification du codage. Cependant, nous verrons dans le chapitre 4 que cette description est limitant et nous proposons une amélioration dans le cadre de cette thèse. Une deuxième méthode MUSIG, dite hétérogène ou inhomogène, emploie plusieurs champs de vitesses. Il est possible de regrouper plusieurs champs de masse dans un même champ de vitesse. Dans la description que nous proposons, nous effectuons un regroupement dans trois champs de vitesse, le dernier étant en fait celui de l'eau, réservé pour les plus petites particules (supposée ainsi en équilibre hydrodynamique avec l'eau).

2 CHAPITRE 2 : PHYSIQUE DE LA FRAGMENTATION DES JETS ET DES GOUTTES LIQUIDES

Dans le chapitre précédent, une vue globale de l'ICR et de la fragmentation de jets liquides à haute température a été présentée. Cependant, l'ICR fait intervenir de nombreux phénomènes physiques qui complexifient l'étude de la fragmentation du jet de corium. Ce chapitre présente la fragmentation des jets et de gouttes d'un point de vue plus académique. Un état de l'art sur la compréhension physique de la fragmentation dans des situations isothermes sera présenté, en s'appuyant sur des expériences de jets liquides dans un gaz et de jets de métaux liquide à bas point de fusion dans de l'eau. De même, des études expérimentales de fragmentation de gouttes soumises à une onde de choc seront analysées.

2.1 FRAGMENTATION DE JETS

Le processus de fragmentation d'un jet liquide a été largement étudié par le passé, notamment pour les configurations liquide/gaz. L'objectif est de décrire les mécanismes de passage d'une masse compacte de liquide (phase continue 'jet') vers une quantité finie de gouttes stables dispersées dans le milieu environnant (gaz ou liquide non miscible avec le jet). Ces mécanismes de fragmentation peuvent changer significativement selon les conditions d'injection du jet et de son état initial (par exemple, vitesse et/ou intensité de la turbulence). Traditionnellement, les caractéristiques de la fragmentation des jets liquides dans le gaz sont classées selon des modes ou régimes de fragmentation. Ces modes de fragmentation ont été identifiés visuellement et dépendent principalement du nombre de Weber hydrodynamique calculé à la sortie de l'injecteur (Lasheras and Hopfinger, 2000). La viscosité du jet peut modifier aussi les caractéristiques de la fragmentation ; cet effet est pris en compte via le nombre de Reynolds et le nombre d'Ohnesorge :

$$We = \frac{\rho_c D_j \left(\Delta V_{jc}\right)^2}{\sigma_{jc}} \, , Re = \frac{\rho_j D_j \Delta V_{jc}}{\mu_j} \, , Oh = \frac{\mu_j}{\sqrt{\rho_j D_j \sigma_{jc}}}$$

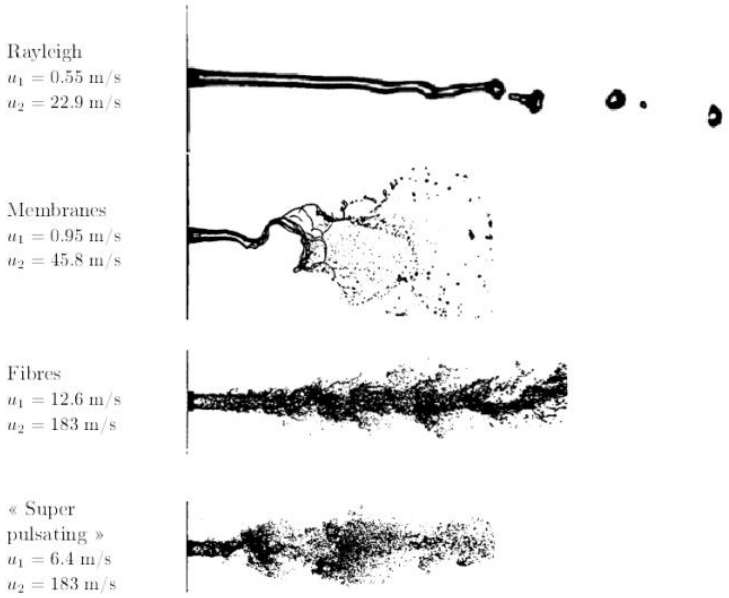


Figure 2-1 : Principaux modes de fragmentation aérodynamique dans le cas de jet coaxiaux eau/air, u_1 = vitesse du jet liquide, u_2 = vitesse du gaz (Chigier and Farago, 1992)

Ces régimes ou modes de fragmentation décrivent qualitativement le comportement du jet. Nous distinguons en premier lieu le régime dit de Rayleigh, dominé par les effets capillaires, qui transforme ici, en l'absence d'effet hydrodynamique notable, des ligaments liquides en gouttes sphériques de diamètre comparable à celui du jet. Sur la Figure 2-1, nous distinguons cependant une instabilité hélicoïdale naissante (régime Rayleigh et membranes), signe d'effet hydrodynamique. A ce stade, l'effet hydrodynamique est faible et les échelles associées sont de grandes échelles. Sous certaines conditions, la déformation peut être extrême et conduire à la formation de nappes ou longs filaments qui vont à leur tour se désintégrer sous les effets capillaires. Ce mode de fragmentation est analogue au mode dit de « bag breakup » (fragmentation en sac pour les gouttes, voir section 2.3.3). L'augmentation des

perturbations hydrodynamiques se traduit par une diminution des échelles d'instabilité (3ème image, Figure 2-1). Nous constatons en fait la coexistence d'une instabilité de longue échelle (ondulation) et fragmentation fine (atomisation) très rapide. La 4ème image présente un mode similaire. Le jet va moins vite et l'instabilité de grande échelle casse plus vite le jet, donnant un effet pulsant à la fragmentation.

Ces modes de fragmentation apparaissent selon des conditions bien définies et n'illustrent pas toutes les manières possibles de fragmentation des jets. Nous notons cependant, la coexistence de plusieurs échelles d'instabilité, plus ou moins prépondérantes. Ainsi, la longueur de rupture peut être liée soit à une brisure de grande échelle (4ème image de la Figure 2-1) soit à l'atomisation progressive. Dans sa thèse, Meignen (Meignen, 1995) propose d'expliquer les différences de longueurs de rupture entre les divers cas de jets de corium par les effets de distorsion de grande échelle qui peuvent être plus ou moins importants. Ces effets ont récemment été mis en évidence dans les expériences KROTOS grâce à la visualisation aux rayons X (voir section 1.3.5). Bien que les configurations liquide/gaz nous donnent des indices sur les mécanismes de fragmentation, les paramètres physiques de cette configuration sont très différents de situations ICR même si nous négligeons les transferts thermiques. Des essais plus représentatifs ont été effectués avec des métaux liquides à bas point de fusion ayant plus de données disponibles dans la littérature (voir annexe 8.3 pour plus d'information). Ces essais se rapprochent plus de situations ICR grâce à leur rapport de densité compris entre 6 et 10 (ce rapport dépend du métal utilisé). Ces études fournissent des données plus précises sur les phénomènes physiques de la fragmentation du jet et permettent de s'affranchir du problème de la génération de vapeur du réfrigérant. Des techniques de visualisation diverses tel que l'ombroscopie et/ou techniques laser sont possibles dans cette configuration (voir Figure 2-2).

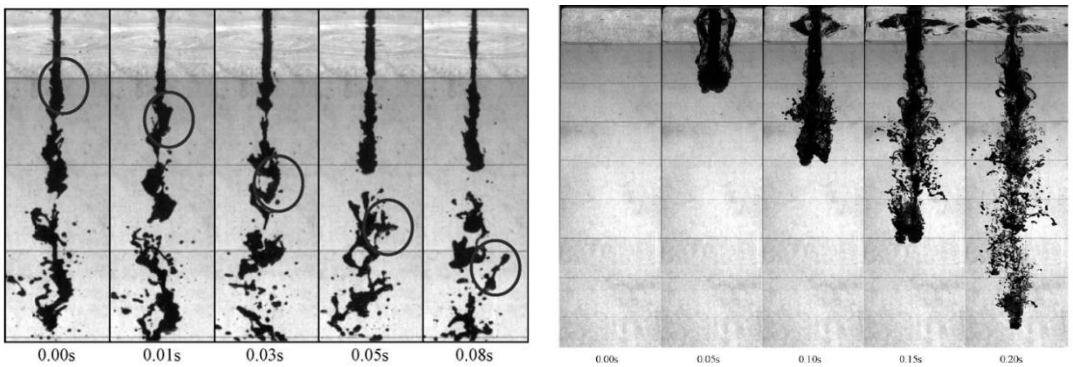


Figure 2-2 : Exemple de fragmentation du jet à bas point de fusion (Abe et al., 2006)

Les visualisations relèvent un processus de fragmentation assez complexe. Conclure sur le mécanisme précis de fragmentation et sur une distinction entre les déstabilisations primaire et secondaire est assez difficile. En effet, la résolution spatiale et temporelle obtenue lors des essais n'est pas suffisante pour décrire quantitativement la fragmentation des jets. Qualitativement, les essais montrent divers mécanismes de déstabilisation qui agissent sur la tête et sur la colonne du jet. La Figure 2-2 montre deux exemples de la fragmentation d'un jet de métaux liquide à bas point de fusion dans l'eau. Nous constatons une déstabilisation de grande échelle agissant globalement sur la morphologie du jet, puis une déstabilisation de plus petite échelle qui modifie localement les structures formées et produit leur fragmentation. Dans le cas de jets liquides fragmentés par des courants gazeux, les essais effectués par Villermaux (Villermaux and Bossa, 2009) montrent que le changement de topologie du jet liquide provient d'un processus à deux étapes. En premier une instabilité de Kelvin-Helmholtz génère des ondulations axisymétriques sur la surface du jet. Ces ondulations augmentent d'amplitude et subissent une déstabilisation transversale du type Rayleigh-Taylor, dû à l'accélération entre les crêtes de vagues et le fluide environnante. Cette déstabilisation transversale produit la formation de ligaments qui s'allongent à cause du cisaillement entre les deux fluides. Ces ligaments ensuite vont se restructurer et par des effets capillaires, se fragmenteront en plusieurs gouttes de différents diamètre (Marmottant and Villermaux, 2004). Ces gouttes donnent lieu à une distribution de taille de particules, la plupart de temps sous une forme du type log-normale ou parfois avec une loi gamma (Villermaux, 2007).

Dans la Figure 2-3, nous présentons un exemple du comportement multi-échelle de la fragmentation de jets issue de simulations numériques. Dans les figures prises de la publication de (Shinjo and Umemura, 2010)(Figure 2-3), les auteurs effectuent des simulations DNS (Direct Numerical Simulation) d'un jet liquide injecté dans du gaz au repos. Il est présenté schématiquement les structures qui se développent derrière la tête du jet de même ordre de grandeur que le diamètre du jet (grandes échelles) et qui génèrent des grandes perturbations (instabilités) à la surface du jet. A l'intérieur de ces structures, des tourbillons de plus petit taille se développent avec une taille de même ordre de grandeur que les gouttes

générées par la fragmentation (voir contour de vorticité, Figure 2-3, droite). Ces structures agissent directement sur la fragmentation de ligaments et des gouttes.

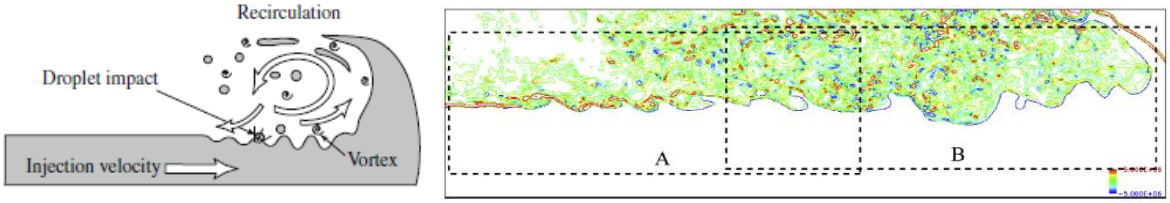


Figure 2-3 : Gauche : Schéma de chemins de perturbations ; Droite : contour de vorticité autour de l'interface du jet (images obtenues à partir de (Shinjo and Umemura, 2010)**)**

2.2 FRAGMENTATION PRIMAIRE

L'étude de mécanismes de fragmentation de jets liquide est basée principalement sur les instabilités produites par le cisaillement à l'interface du jet. Dans les lignes suivantes nous étudierons les mécanismes de déstabilisation primaire présentées schématiquement dans la Figure 2-4. Nous analyserons les instabilités de grande échelle du type hélicoïdal qui sont observées dans les cas de jets cylindriques. Si l'échelle de l'instabilité est petite devant le diamètre du jet, il est possible de se ramener au cas de géométrie plane. Nous discuterons ainsi des instabilités de cisaillement de type Kelvin-Helmholtz, Figure 2-4, b, et plus particulièrement le modèle d'instabilité proposé par Funada (Funada and Joseph, 2001), lequel inclus les effets visqueux dans le modèle classique de Kelvin-Helmholtz. La déstabilisation transversale (Figure 2-4, c) sera ensuite analysée et des exemples de distribution de taille de particules issues de la fragmentation de jets seront donnés.

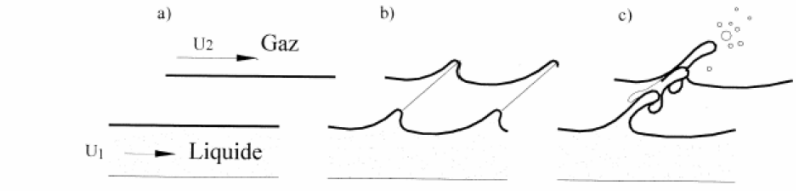


Figure 2-4 : Mécanisme de déstabilisation primaire et formation des ligaments (Hong, 2003)

2.2.1 INSTABILITES PRIMAIRES

Rappelons que certains essais expérimentaux de jet montrent l'apparition des perturbations de grande échelle du type hélicoïdale ($kR \approx 1$) (Hoyt and Taylor, 1977) (Figure 2-5). Ces instabilités apparaissent à cause des effets hydrodynamiques avec le milieu environnant. La première modélisation des instabilités de grande échelle remonte à Yang (Yang, 1992). Cette étude simplifiée sans prise en compte de la viscosité révèle que sous certaines circonstances les instabilités hélicoïdales sont prédominantes. Cependant, en comparaison aux données expérimentales, les ordres de grandeurs de longueur d'onde et du taux de croissance étaient en désaccord. Postérieurement, Lin et Webb (Lin and Webb, 1994), ont proposé une modélisation prenant en compte la viscosité du jet. Ses études montrent que les ondes du type non-axisymétriques sont stables pour un régime à faible nombre de Weber et de Reynolds. Avital (Avital, 1995) propose une méthode similaire mais effectue des calculs à plus haut nombre de Weber et Reynolds. Les résultats sont consistants avec ceux de Yang avec un comportement instable pour tous les modes. Ces modélisations supposent des profils de vitesse uniformes pour les différentes phases. Cette hypothèse est inconsistante par rapport aux deux conditions limites à l'interface, tel que la continuité de déplacement et la continuité de vitesse radiale. Meignen (Meignen, 1995) a proposé une modélisation en supposant un profil de vitesse turbulent dans la phase environnante (liquide ou gaz). Il a pu ainsi retrouver les caractéristiques des instabilités de Hoyt & Taylor.

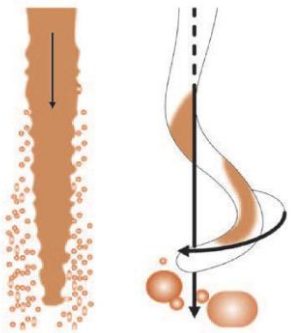


Figure 2-5 : Fragmentation du jet liquide par atomisation (à gauche) et fragmentation liée à des instabilités hydrodynamiques « grande échelle » (à droite) (Jacquemain, 2013)

Dans la situation d'une géométrie plane, pouvant correspondre au cas des instabilités d'échelles plus petites que le jet, le premier modèle pour l'étude de l'instabilité parallèle est celui de Kelvin-Helmholtz, qui ne prend pas en compte la viscosité et où les vitesses sont considérés uniformes de chaque côté de l'interface (voir annexe 8.2). L'équation de dispersion du modèle est :

Eq. 2-1 $$\boldsymbol{\rho_c(\sigma + ikU_c)^2 + \rho_d(\sigma + ikU_d)^2 = -\sigma k^3}$$

Bien que l'implémentation de ce modèle soit simple, il manque de justification physique et n'est pas consistant mathématiquement. En effet, la condition de glissement à l'interface, impose un choix entre continuité des déplacements et continuité des vitesses. Cependant, malgré ses limitations, il apparait que le modèle traduit une certaine réalité. Il est en effet possible de simplifier l'équation de dispersion pour faire ressortir le critère de stabilité de Weber. Le modèle doit donc permettre de caractériser les tailles des instabilités et des particules issues de la fragmentation. Pour aller plus loin, il faut introduire la viscosité et des profils de vitesses dans l'écoulement de base (non perturbée).

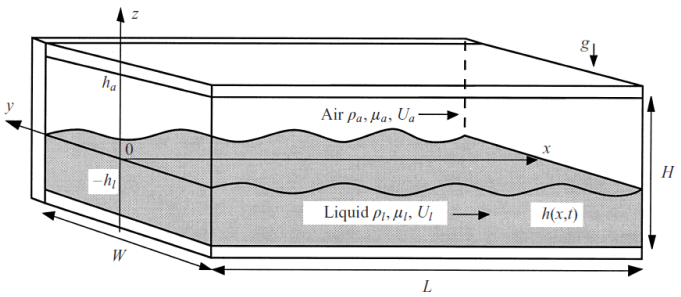


Figure 2-6 : Ecoulement parallèle de deux fluides en géométrie plane ($\boldsymbol{l = liquide, a = gaz}$)[11] (Funada and Joseph, 2001)

Funada *et al.* (Funada and Joseph, 2001) présentent dans leur papier une approche simple pour prendre en compte la viscosité à l'interface du jet. Nous avons utilisé ce modèle dans une configuration corium-vapeur d'eau (hypothèse de film épais) pour vérifier sa pertinence. Le modèle considère toujours des profils constants de vitesse pour le liquide et pour le gaz, donc sans échelle naturelle. Les effets de tension superficielle et de viscosité de deux fluides sont pris en compte dans le bilan des contraintes normales à l'interface. L'équation de dispersion pour fluides semi-infinies est la suivante :

Eq. 2-2 $$\boldsymbol{b_4\sigma_r^4 + b_3\sigma_r^3 + b_2\sigma_r^2 + b_1\sigma_r + b_0 = 0}$$

Avec :

$$b_4 = (\rho_c + \rho_d)^3$$

$$b_3 = 4k^2(\rho_c + \rho_d)^2(\mu_c + \mu_d)$$

$$b_2 = k^2(\rho_c + \rho_d)(5k^2(\mu_c + \mu_d)^2 + k(\rho_c + \rho_d)\sigma - \rho_c\rho_d(\Delta V_{dc})^2)$$

$$b_1 = 2k^4(\mu_c + \mu_d)(k^2(\mu_c + \mu_d)^2 + k(\rho_c + \rho_d)\sigma - \rho_c\rho_d(\Delta V_{dc})^2)$$

$$b_0 = k^7(\mu_c + \mu_d)^2\sigma - k^6(\Delta V_{dc})^2(\mu_c^2\rho_d + \mu_d^2\rho_c)$$

[11] Pour être consistant avec notre nomenclature, nous appelons le liquide avec le sous-indice « d » et le gaz avec le sous-indice « c »

Nous remarquons que cette équation de dispersion peut être facilement simplifiée en supposant des viscosités nulles pour retrouver l'équation de dispersion du modèle Kelvin-Helmholtz.

Le calcul nous indique la présence d'un deuxième mode d'instabilité à plus petite échelle (grand nombre d'onde) que celui donné par le modèle sans viscosité (voir Figure 2-7).

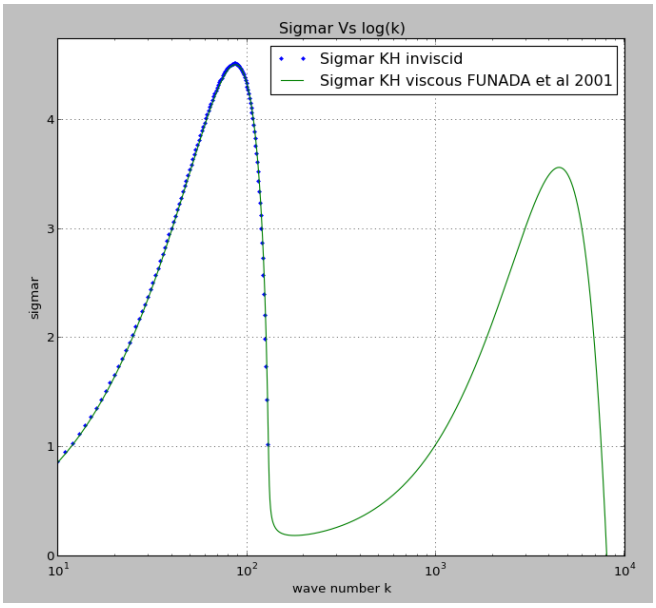


Figure 2-7 : Graphique de σ_r Vs $log(k)$ pour le modèle de KH sans viscosité et KH avec viscosité (Funada and Joseph, 2001). Propriétés des fluides pour les cas Corium - vapeur d'eau à $T = 3000\ K$ et $p = 1\ bar$.

La Figure 2-7 nous montre que pour une température de vapeur d'eau de 3000 K, le deuxième maximum de la courbe $\sigma_r\ Vs\ k$, est presque du même ordre de grandeur que le maximum décrit par la théorie KH non-visqueuse. La différence entre les nombres d'onde correspondant est de $k_{\max(viscous)} \approx 52\ k_{\max(inviscid)}$. Il est cependant étonnant de constater que la viscosité induit des instabilités aux petites longueurs d'onde. En simplifiant l'équation de dispersion (Eq. 2-2), la longueur d'onde du deuxième maximum, à cause des effets visqueux, peut être calculée suivant l'équation (Eq. 2-3):

Eq. 2-3

$$\boldsymbol{k_{m+viscous}} = \frac{9(\rho_c+\rho_d)^2}{16(\mu_c+\mu_d)^2}\left(\sqrt{\left(\frac{\sigma}{(\rho_c+\rho_d)}\right)^2 + \left(2\frac{(\rho_c\mu_d-\rho_d\mu_c)\Delta V_{dc}}{(\rho_c+\rho_d)^2}\right)^2} - \frac{\sigma}{(\rho_c+\rho_d)}\right)$$

$$k_{m+viscous} = \left(18\frac{(\rho_d\mu_c)\Delta V_{dc}}{16(\mu_d)^2}\right) = \left(\frac{\mu_c}{\mu_d}\frac{\rho_d\Delta V_{dc}}{\mu_d}\right) = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\left(\frac{\rho_d\Delta V_{dc}\lambda}{\mu_d}\right) = 2\pi\frac{\mu_d}{\mu_c}$$

Ayant pour taux de croissance : $\sigma_r = -\frac{{k_{m+viscous}}^2(\mu_c+\mu_d)}{(\rho_c+\rho_d)} + {k_{m+viscous}}^{\frac{3}{2}}\frac{\sqrt{2\left(\sqrt{a^2+b^2}+a\right)}}{2}$

Avec :

$$a = -\frac{\sigma}{(\rho_c+\rho_d)} \text{ et } b = 2\frac{(\rho_c\mu_d-\rho_d\mu_c)\Delta V_{dc}}{(\rho_c+\rho_d)^2}$$

En supposant les propriétés du corium constantes, le taux de croissance correspondant à la longueur d'onde la plus instable par les effets visqueux (second pic) augmente au fur et à mesure que la viscosité cinématique du fluide environnant augmente. La viscosité cinématique de la vapeur d'eau augmente rapidement à haute température car sa masse volumique devient faible.

Une des améliorations proposées au modèle de KH classique fait l'hypothèse d'un écoulement idéalisé par des profils de vitesse linéaires par morceaux. Dans ce cas, l'équation d'Orr-Sommerfeld se simplifie pour permettre une résolution analytique. Citons les travaux d'O. Pouliquen (Pouliquen et al., 1994) et ceux de J. Padrino (Padrino, 2006). Ces modélisations supposent que la continuité de la vitesse entre les deux fluides est représentée par une zone de transition correspondante à la couche limite dans le liquide et dans le gaz (voir Figure 2-8).

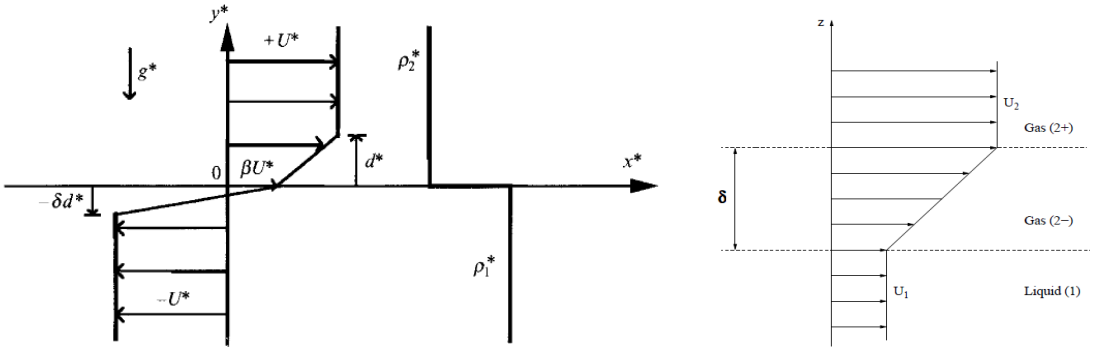


Figure 2-8 : Schéma de l'écoulement de base pour les analyses de stabilité linéaire. Gauche : schéma proposé par (Pouliquen et al., 1994) ; Droite : schéma proposé par (Padrino, 2006)

D'autres études effectuées par (Boeck and Zaleski, 2005) considèrent le même type d'instabilité en géométrie plane avec des profils de vitesses plus complexes mais plus réalistes. Dans leur étude, les effets visqueux sont pris en compte par l'utilisation des profils de vitesse en fonction $\mathrm{erf}(x)$. Les auteurs concluent que la viscosité génère un mode d'instabilité supplémentaire à petits longueurs d'onde.

Concernant la modélisation des instabilités dans une situation ICR, nous avons présenté dans le chapitre 1 très rapidement des modélisations encore plus complexes mettant en jeux plus de deux phases de fluides, des transferts thermiques, des profils de vitesses turbulentes, etc. Cependant, la modélisation reste confrontée au problème de la fragmentation, qui implique des déformations importantes de l'interface, très loin de la linéarité. En l'absence de modèle analytique simple et précis pour cette phase de fragmentation, une grande complexité dans la modélisation de l'instabilité n'est plus, avec le recul, la voie privilégiée de l'analyse. **Bien que le modèle non-visqueux de Kelvin-Helmholtz ne reproduise pas avec précision la longueur d'onde et le taux de la croissance, il nous fournit un ordre de grandeur des instabilités à l'interface du jet et son implémentation dans les codes de simulation numérique est simple**. Le modèle présenté par Funada prend en compte les effets visqueux mais l'absence de profil de vitesse pour les fluides très visqueux ne semble pas consistante. Concernant la modélisation de l'instabilité de cisaillement avec prise en compte des profils de vitesse, il faut tenir en compte du fait que pour un code de simulation du type MC3D, il est difficile de reconstruire le profil de vitesse à l'interface du jet, par le caractère 2D/3D de la simulation et par les différentes échelles résolues par le maillage (ces échelles ne reproduisent pas, avec précision, les profils de vitesses proches de l'interface). **Lors de cette thèse, nous travaillerons donc avec la modélisation KH non-visqueuse pour notre modèle de fragmentation/déstabilisation primaire.**

2.2.2 PROCESSUS DE FRAGMENTATION

Sur les crêtes des vagues produites par l'instabilité primaire, une nouvelle instabilité peut se développer à cause de l'accélération locale produite par le courant du fluide environnant. Ces perturbations secondaires sont dans la plupart des cas perpendiculaires aux instabilités primaires et produisent la rupture des vagues en plusieurs ligaments (Figure 2-4). Cette instabilité est associée à celle du type Rayleigh-Taylor dans le cas de jets co-courant. La longueur d'onde caractéristique du mode le plus instable de l'instabilité de Rayleigh-Taylor est donné par :

$$\lambda_{RT} = 2\pi\sqrt{\frac{3\sigma}{\rho_d a}}$$

Où a est l'accéleration du film liquide. Cette instabilité transversale nait à partir de l'instabilité primaire du type KH. Pour déterminer l'accélération de la crête, le principe fondamental de la dynamique est appliqué en supposant que la force qui agit sur la vague primaire est la trainée exercée par le fluide environnant :

$$F = m * a = \frac{1}{2} C_d \rho_c (\Delta V_{dc})^2 A_d$$

Finalement, la longueur d'onde de l'instabilité de Rayleigh-Taylor détermine la taille caractéristique de ligaments :

Eq. 2-4 $$\boldsymbol{\lambda_{RT} = 2\pi \left(\frac{6\sigma\alpha_d\delta_c C_{KH}}{\rho_c C_d}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\rho_d}{\rho_c}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{(\Delta V_{dc})}}$$

Une fois les ligaments formés sur les vagues de la déstabilisation primaire, ceux-ci seront fragmentés en fonction des conditions hydrodynamiques locales. La taille des ligaments a tendance à diminuer au fur et à mesure que la vitesse du fluide environnant augmente (Marmottant, 2001). Si nous regardons la dynamique des ligaments produits, la bibliographie révèle que les ligaments subissent une dynamique à un régime plutôt à basse vitesse (faible gradient de vitesse). Le nombre de Weber des ligaments évalués dans les simulations DNS effectuées par Shinjo et Umemura (Shinjo and Umemura, 2011, 2010), s'avèrent être plus petits que 10, même pour des vitesses relatives d'injection assez élevées (Figure 2-9). En effet, les ligaments ont des nombres de Weber compris entre 0.1 et 10, sans que la vitesse d'injection ait un impact direct sur cette valeur[12]. Les ligaments subissent alors une fragmentation plutôt pilotée par des effets capillaires et non hydrodynamiques.

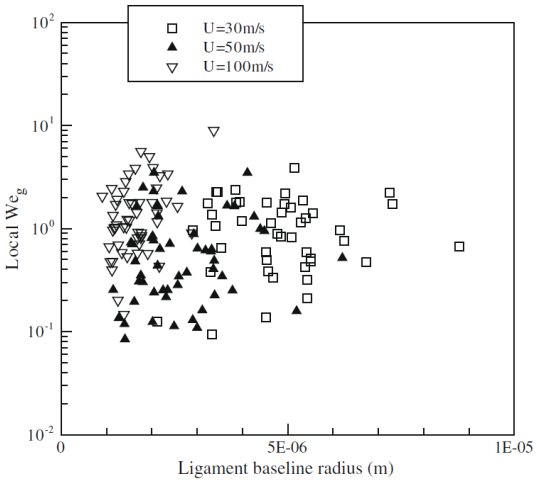


Figure 2-9 : Nombre de Weber local de ligaments issus de la déstabilisation primaire et secondaire. D'après les données de simulation directe de la fragmentation des jets (Shinjo and Umemura, 2010)

La fragmentation des ligaments produit des gouttes de diverses tailles, certaines du même ordre de grandeur que le diamètre du ligament et d'autres, dites satellites, de plus petite taille. Pour analyser la distribution en taille de ces ligaments, (Marmottant, 2001) propose de normaliser la taille des gouttes produites par une goutte de volume équivalente à celui du ligament. La distribution en taille des gouttes issues de ligaments est présentée en Figure 2-10 pour différentes vitesses du gaz. Les auteurs constatent que la forme de la distribution de taille de particules, normalisé par le diamètre initial est invariante par rapport à la vitesse relative entre le jet et le fluide environnant.

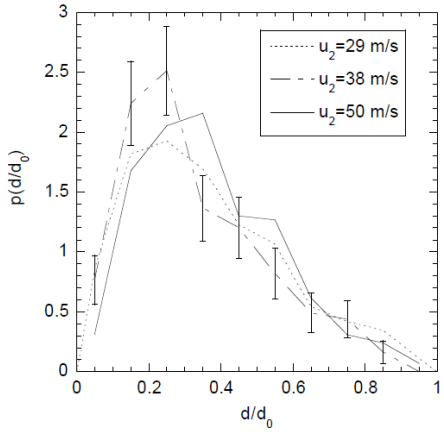


Figure 2-10 : Distributions expérimentales de tailles de gouttes rapportées à la taille d_0 du ligament pour plusieurs vitesses d'air. Barre d'erreurs pour la distribution la moins convergée (Marmottant, 2001)

Pour obtenir la distribution de taille de particules issues de la fragmentation du jet, il faut considérer la distribution de taille des ligaments (produits par la déstabilisation transversale) et la distribution de gouttes issues de la fragmentation de ligaments. Le résultat final est une distribution de tailles de

[12] La vitesse d'injection du jet joue directement sur le rayon de base du ligament et sur sa vitesse. Plus la vitesse d'injection est élevée, plus le rayon de base est petit et plus la vitesse du ligament est grande. Ces deux effets sont cachés par le nombre du Weber du ligament $We_{ligament} = \frac{\rho_c D_{lig} \Delta V_{lig-c}^2}{\sigma}$

particules comprenant le processus de déstabilisation primaire, de déstabilisation secondaire et de rupture de ligaments. Pour Villermaux, la distribution prend une forme de loi gamma (Villermaux, 2007). Les modèles existants de fragmentation du jet comme celui proposée par Jouanguy et Gorokhovski (Gorokhovski et al., 2006; Jouanguy, 2007) basée sur une fragmentation en cascade résultent, quant à eux, en un distribution log-normale. En Figure 2-11, plusieurs distributions de tailles de particules issues de la fragmentation de jets de métaux liquide sont affichées. Nous constatons un écart entre les données expérimentales et les lois log-normale calculées en fonction du diamètre de Sauter.

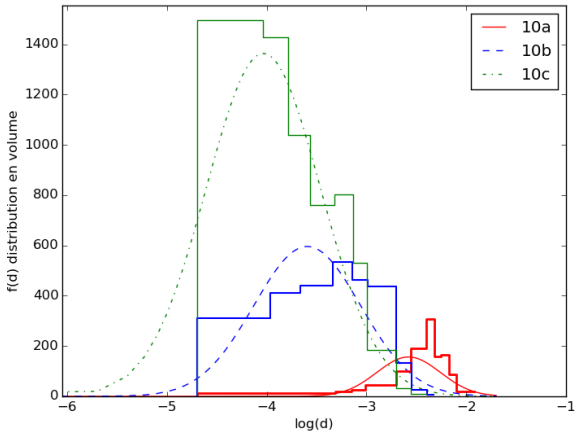


Figure 2-11 : Comparaison de distributions de taille de particules pour différentes vitesses d'injection du jet 10a) $V_{melt\,jet} = 2.10\ m/s$, $SMD = 3.67\ mm$; 10b) $V_{melt\,jet} = 3.92\ m/s$, $SMD = 0.53\ mm$; 10c) $V_{melt\,jet} = 5.0\ m/s$, $SMD = 0.21\ mm$. Distributions reconstruites à partir des données de (Abe et al., 2006)

Nous pouvons simplifier la comparaison de distributions de tailles produites à l'aide des diamètres représentatives de la distribution, notamment le diamètre de Sauter moyen et le diamètre médian (voir annexe 8.1). Si nous regardons la variation de ces diamètres en fonction de la vitesse d'injection, nous constatons que le rapport entre le diamètre médian et le diamètre de Sauter reste compris entre 1 et 1.5, dans le cas des essais de fragmentation des jets de métaux liquide à bas point de fusion dans l'eau (voir annexe 8.3). Ceci peut confirmer que la forme de la distribution de taille de particules est invariante vis-à-vis de la vitesse d'injection des fluides. Les travaux sur les jets turbulents et non turbulents effectués par (Wu et al., 1991; Wu and Faeth, 1993) montrent que la distribution de taille de particules suit une loi racine-normale universelle proposé par Simmons (Simmons, 1977a, 1977b) avec un rapport $D_{0,50}/SMD = 1.2$. Nous considérons donc, pour notre modèle de fragmentation, que la fragmentation primaire donne lieu à une distribution du type log-normale avec un écart type constant. Cet écart type est donne par le rapport entre le diamètre médian ($D_{0,50}$) et le diamètre de Sauter (SMD).

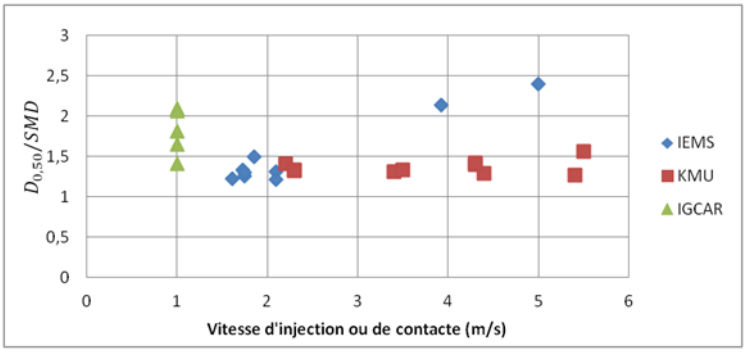


Figure 2-12 : Rapport entre le $D_{0,50}$ et le Diamètre de Sauter moyen pour divers essai de fragmentation des jets de métaux liquide à bas point de fusion. Les données IEMS sont issues de (Abe et al., 2006) et (Matsuo et al., 2008) ; KMU de (Bang et al., 2003) et les résultats IGCAR de (Narayanan et al., 2006)

Cependant, le diamètre représentatif de la distribution de taille de particules varie, notamment en fonction de la vitesse d'injection ($SMD = f_{(\Delta V_{dc})}$). Le diamètre (SMD) peut être relié par une loi de puissance avec le gradient de vitesse $\Delta V_{dc}^{-\beta}$ avec β (Marmottant and Villermaux, 2004):

$\beta \approx 1$: pour (Lasheras and Villermaux, E. Hopfinger, 1998)

$\beta = 2$: Pour les résultats de l'instabilité de Kelvin-Helmholtz

$\beta = 1$: Pour l'instabilité du type Rayleigh-Taylor seule

$\beta = 1.31$: Pour les instabilités Rayleigh-Taylor plus turbulence (Rimbert and Castanet, 2011)

Pour les essais de fragmentation des jets à bas point de fusion, la distribution en taille de gouttes est obtenue en analysant les débris solides qui se déposent au fond du réservoir. Cependant, cette information ne permet pas d'obtenir des informations précises de la nature de la fragmentation (primaire ou secondaire). La Figure 2-13 fournit le diamètre médian ($D_{0,50}$) des fragments recueillis pour diverses expériences en fonction de la vitesse du jet au moment du contact avec le réfrigérant.

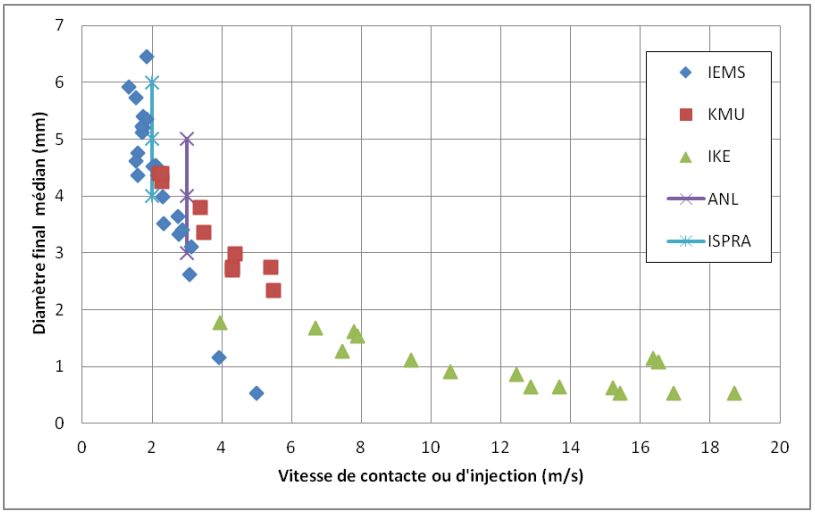


Figure 2-13 : Diamètre médian ($D_{0,50}$) des fragments pour divers essais en métaux liquides. Les résultats IKE, ANL et ISPRA sont issus de (Burger et al., 1995). Dans cette référence les auteurs ne spécifient pas la nature du diamètre mesuré. Les données IEMS sont issues de (Abe et al., 2006) et (Matsuo et al., 2008). KMU de (Bang et al., 2003) ; Pour IEMS et KMU le diamètre affiché correspond au diamètre médian.

Ces résultats montrent une tendance générale de diminution nette de la taille des particules avec la vitesse du contact jet-réfrigérant. Nous remarquons cependant deux points notablement divergents, correspondant à des résultats d'Abe et al. (IEMS,(Abe et al., 2006)) à plus haute vitesse (4 et $5\,m/s$). Ceux-ci indiquent une pulvérisation très fine, non reproduite dans les tests de KMU ou IKE.

2.2.3 MODELISATION DE LA FRAGMENTATION DU JET

Dans les codes spécialisés pour l'ICR à deux champs pour la description de corium, la fragmentation du jet de corium (passage d'un jet continue vers des particules dispersées) est calculée par des modèles spécifiques de transfert de masse entre constituants. Ces modèles de fragmentation fournissent des fonctions permettant de calculer les diverses grandeurs caractéristiques de la fragmentation telle que la quantité de masse qui sera transféré du champ jet vers le champ de gouttes. La modélisation doit calculer :

- Taux de fragmentation
- Taille de gouttes
- Vitesse de gouttes produites

Nous avons montré que la fragmentation du jet est un processus complexe qui implique plusieurs échelles spatiales et différents types d'instabilité. La description du processus de fragmentation s'avère très complexe et les modèles implémentés dans les codes requièrent une simplification du phénomène. Il s'avère que l'hypothèse d'un jet droit conique perturbé à sa surface par le cisaillement avec l'écoulement externe peut sembler loin de la réalité de la fragmentation mais est toutefois appliquée dans les modèles numériques ICR (Meignen and Magallon, 2005). La fragmentation du jet est considérée selon le schéma suivant :

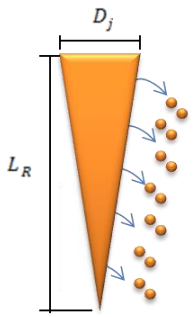


Figure 2-14 : Schéma conceptuel du mécanisme de fragmentation continue le long de la colonne du jet

Dans le modèle PREMEL standard du code MC3D, de la même manière que pour les autres codes similaires (JEMI-3D de l'université de Stuttgart, par exemple), il est fait l'hypothèse que le taux de fragmentation, la taille de particules et leur vitesse peuvent être décrites via un unique mécanisme d'instabilité/fragmentation. Nous parlerons d'une approche intégrale. Ces modèles préconisent un taux de fragmentation constant et indépendant des conditions locales calculées de l'écoulement (du jet et du fluide environnant). Ces taux de fragmentation sont basés, d'une part sur des corrélations faites à partir de résultats expérimentaux, d'autre part sur des corrélations issues des modèles analytiques de fragmentation du jet (présentées en section 1.4.1). Quelques expressions pour le taux de fragmentation et pour la taille de particules utilisées dans les codes sont présentées dans le Tableau 4.

Il faut se rappeler que le taux de fragmentation Γ_{frag} ou vitesse d'érosion V_e est relié à la longueur de rupture du jet par l'expression suivante :

$$\frac{L_R}{D_j} = \frac{V_j}{2\,\Gamma_{frag}} = \frac{V_j}{2\Gamma_{frag}}$$

Auteur/nom du modèle	Description
Saïto (Saito, 1988)	La corrélation de Saïto est une corrélation basée sur la longueur de rupture d'un jet en conditions d'ébullition : $\frac{L_R}{D_j} = 2.1\sqrt{\frac{\rho_j}{\rho_c}}F_r^{\frac{1}{2}}$ Avec Fr le nombre de Froude $F_r = \frac{V_j^2}{gD_j}$ Cette corrélation ne donne aucune information concernant le processus de fragmentation. Le diamètre de gouttes générées ainsi que leur vitesse d'éjection sont fixés par l'utilisateur.
Meignen (Meignen and Berthoud, 1995)	Ce modèle a été rapidement expliqué en paragraphe 1.4.1. Ce modèle est basé sur l'équation d'Orr-Sommerfeld complète. Il intègre même, des effets supplémentaires comme les gradients de viscosité, qui jouent a priori un rôle important, profils de vitesse, entre autres. Cette corrélation est applicable pour les interactions corium-réfrigérant avec des jets à haute température et de grand diamètre Le taux de fragmentation est calculé en comparaison avec un cas standard (sous-indice 0) : $\Gamma_{frag} = \Gamma_0\left(\frac{T_0}{T_j}\right)^{0.75}\sqrt{\frac{\mu_c}{\mu_{c,0}}\Big\vert_{p\,=\,1\,bar}\frac{\sigma_0}{\sigma_j}\left(\frac{\rho_0}{\rho_j}\right)^{0.5}}$ Le cas de référence et les propriétés du corium sont choisis par rapport aux essais FARO à $T = 3000\,K$ $T_0 = 3000\,K$, $\mu_{c,0} = 10^{-3}Pa*s$, $\rho_0 = 8000\,kg/m^3$, $\sigma_0 = 0.5\,N/m$ Les travaux de Meignen ne fournissent pas une corrélation simple pour la taille de particules. Celle-ci reste pour l'instant un paramètre utilisateur.

<table>
<tr>
<td>Namiech (Namiech et al., 2004)</td>
<td>
Les études menées par Namiech concernent le développement d'un modèle d'instabilité à la surface du jet, basé sur une équation d'Orr-Sommerfeld, similaire à celui développé par Meignen. Le modèle inclus la présence de particules dans le réfrigérant.

A l'issue de la comparaison entre les données expérimentales et les résultats du modèle développé, l'auteur propose diverses corrélations statistiques pour les grandeurs caractéristiques de la fragmentation du jet :

Longueur de rupture
$$\frac{L_R}{D_j} = f_0 \left(\frac{P}{P_0}\right)^{f_1} \left(\frac{\rho_{vj}}{\rho_j}\right)^{f_2} \left(1 - \frac{T_s - T_L}{T_j - T_s}\right)^{f_3} \left(\frac{U_j}{U_{j0}}\right)^{f_4} \left(\frac{U_{j0}}{U_{M0}}\right)^{f_5} \left(\frac{U_{M0} D_j}{\nu_{vj}}\right)^{f_6} \left(\frac{\sigma}{\rho_j D_j U_{M0}^2}\right)^{f_7}$$
Avec :
<table>
<tr><td>$f_0 = 0.474$</td><td>$f_1 = -0.971$</td><td>$f_2 = 0.121$</td><td>$f_3 = 0.27$</td></tr>
<tr><td>$f_4 = 0.512$</td><td>$f_5 = 3.791$</td><td>$f_6 = 0.069$</td><td>$f_7 = -0.979$</td></tr>
</table>

Diamètre de fragments
$$\frac{D_p}{D_j} = g_0 \left(\frac{P}{P_0}\right)^{g_1} \left(\frac{\rho_{vj}}{\rho_j}\right)^{g_2} \left(1 - \frac{T_s - T_L}{T_j - T_s}\right)^{g_3} \left(\frac{U_j}{U_{j0}}\right)^{g_4} \left(\frac{U_j}{U_{M0}}\right)^{g_5} \left(\frac{U_{M0} D_j}{\nu_{vj}}\right)^{g_6} \left(\frac{\sigma}{\rho_j D_j U_{M0}^2}\right)^{g_7}$$
Avec :
<table>
<tr><td>$g_0 = 33.272$</td><td>$g_1 = -0.958$</td><td>$g_2 = 0.0009307$</td><td>$g_3 = 0.484$</td></tr>
<tr><td>$g_4 = -1.485$</td><td>$g_5 = 1.591$</td><td>$g_6 = -0.035$</td><td>$g_7 = 0.065$</td></tr>
</table>
Les variables correspondent à :
U_{M0} = échelle de vitesse
P_0 = Pression de référence
ρ_{vj} = masse volumique de la vapeur proche du jet
T_s = Température de saturation de l'eau
T_L = température de l'eau
U_{j0} = échelle de vitesse du jet
ν_{vj} = viscosité de la vapeur proche du jet
</td>
</tr>
<tr>
<td>Modèle global de Bürger</td>
<td>Ce modèle suppose un taux de fragmentation constant de $0.15 \frac{m^3}{m^2 s}$. Ce taux de fragmentation est utilisé couramment dans les calculs ICR effectués avec MC3D et IKEMIX pour simuler les</td>
</tr>
</table>

	essais FARO L-28, L-31 et L-33. Ce modèle considère que le jet a une forme de cône avec une longueur de rupture de $\frac{L_R}{D_j} \approx 20$: $$\Gamma_{frag} \approx 0.15 \frac{m^3}{m^2 s}$$

Tableau 4 : Compilation des corrélations utilisées pour le calcul du taux de fragmentation du jet de corium (Meignen, 2005)

Pour une description plus complète, la fragmentation doit être entièrement couplée avec l'écoulement local environnant. Ceci est réalisé actuellement dans MC3D avec un modèle de fragmentation du jet basé sur les conditions locales de l'écoulement (vitesse et taux de vide principalement) en utilisant un modèle dérivant du modèle d'instabilité de Kelvin-Helmholtz, dit KHF. Dans le Tableau 5 nous présentons quelques modèles utilisés dans les codes spécialisés ICR pour la modélisation de la fragmentation du jet en prenant compte de l'hydrodynamique de l'écoulement environnant.

Auteur/nom du modèle	Description
Modèle de fragmentation local de MC3D	Cette modélisation a été incorporée dans le code MC3D afin de calculer des situations ICR qui ne sont pas nécessairement similaires aux essais FARO. Ce modèle est une extension du modèle d'instabilité de Kelvin-Helmholtz pour les écoulements multiphasiques. Ce modèle sera décrit plus en détail dans le chapitre 4. Il utilise une méthode additionnelle au modèle de KH classique afin de moyenner les propriétés physiques de l'écoulement multiphasique et limiter l'impact du maillage.
Modèle de fragmentation local de Bürger	Ce modèle de fragmentation est basé sur les instabilités du type Kelvin-Helmholtz qui se développent à l'interface du jet. La pression hydrostatique du réfrigérant sur le jet dépende de la distance entre le point local (où nous calculons le taux de fragmentation) et le front du jet. L'écoulement de vapeur qui remonte le long de l'interface du jet est piloté par cette pression hydrostatique donnant une vitesse locale relative entre le jet et l'écoulement de vapeur. $$\Delta V_{dc} = \zeta \sqrt{\frac{2\rho_d}{\rho_c} g z'} - V_{j_{(z')}}$$ Avec ζ, un coefficient d'ajustement prenant en compte les effets de profil de vitesse. z' est la distance entre le point local et le front du jet et ρ_c la masse volumique de la vapeur d'eau. Le taux de fragmentation est dicté par le maximum du taux de croissance. $$\Gamma_{frag} = frac\ N_f\ c_i$$ Avec $c_i = \sqrt{\frac{\rho_c}{3\rho_d}}$, $frac$ indique la fraction de la longueur d'onde à partir de laquelle la fragmentation se produise. N_f relie l'amplitude de l'onde avec sa longueur d'onde.
Modèle de fragmentation pour VESUVIUS	Ce modèle considère un film de vapeur autour du jet. Le modèle d'instabilité utilisé est celui de Epstein (Epstein and Hauser, 1980) à trois phases basé sur l'instabilité de KH. Le modèle résulte en deux corrélations, une pour l'hypothèse de film mince et l'autre pour un film épais. Ce modèle n'a pas de corrélation globale car le taux de fragmentation est calculé localement avec un modèle du film séparé. Le diamètre de particules est un paramètre utilisateur.

Tableau 5 : Compilation de modèles de fragmentation du jet qui prennent en compte la dynamique du milieu environnant

D'autres modélisations de la fragmentation du jet sont utilisées par divers codes dans l'industrie, notamment dans la modélisation des sprays de combustible ou les jets en co-courant (liquide-gaz). La plupart de modélisations utilisent une approche eulérienne pour la phase continue (gaz) et une approche lagrangien pour la phase dispersée. Dans ces situations, la phase gazeuse turbulente est souvent modélisée par une approche du type LES (Large Eddy Simulation). Nous trouvons dans la littérature un certain nombre de codes numériques et des publications qui proposent une fragmentation multi-échelle (à deux étapes) (Gorokhovski et al., 2006; Herrmann, 2010, 2008; Jouanguy, 2007; Tomar et al., 2010) principalement pour des régimes d'atomisation à un nombre de Weber et de Reynolds élevés.

L'approche adoptée par (Gorokhovski et al., 2006; Jouanguy, 2007) est basée sur les processus stochastique de la fragmentation et par un scenario de symétrie d'échelle. Dans cette modélisation, la fragmentation de jet en cascade est utilisée, similaire à celle proposée par Kolmogorov (Kolmogorov, 1941) pour la fragmentation d'une particule solide. Kolmogorov prédit qu'après un certain nombre élevé d'événements de fragmentation, les tailles de particules suivent une distribution log-normale. Les auteurs considèrent que la cascade de fragmentation est pilotée par l'arrachement du liquide à la surface du jet, piloté par le mécanisme de Rayleigh-Taylor produit sur les vagues générés par le mécanisme de Kelvin-Helmholtz. La cascade de fragmentation s'effectue d'une échelle λ_{KH} vers une échelle λ_{RT} . Le rapport entre ces deux longueurs d'onde caractéristiques est donné par :

$$\textbf{Eq. 2-5} \qquad \frac{\lambda_{RT}}{\lambda_{KH}} = 2\pi\left(\frac{6}{C_d C_{KH}}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{\rho_d}{\rho_c}\right)^{-\frac{1}{4}}\left(\frac{V_d}{V_c}\right)^{\frac{1}{2}} We_{\delta_c}^{-\frac{1}{2}}$$

L'approche proposé par Herrmann (Herrmann, 2003) pour le calcul de la fragmentation primaire des jets turbulents consiste en deux principes. Le premier considère que la dynamique de l'interface avec une échelle plus large que la taille locale du maillage est correctement calculée par la méthode de suivi d'interface. Le deuxième principe considère que la dynamique de l'interface avec une taille caractéristique inférieure à la taille locale du maillage est calculé par un modèle sous-maille. Herrmann propose le modèle de grandes structures de surface ou LSS (Large Surface Structure). Ce modèle sous maille doit décrire de manière précise la vitesse de la fragmentation primaire (taux de fragmentation), la distribution de taille de particules et un terme de tension de surface à l'échelle sous-maille, lequel décrit les effets de la dynamique de l'interface dans l'écoulement moyen et les échelles résolues. Ce modèle doit aussi discerner entre l'interface fragmentée du fluide et effectuer le transfert de la masse associée dans un champ dispersé. D'un autre côté, la modélisation proposée par Vallet (Vallet and Borghi, 1999) utilise une équation d'aire interfaciale du jet par unité de volume :

$$densité\ d'aire\ interfaciale = diffusion + production - destruction$$

Dans cette équation, la production d'aire interfaciale est donnée grâce à l'effet macroscopique du fluide moyen (instabilité de Kelvin-Helmholtz) et à l'effet microscopique lié à la turbulence (décrite par l'échelle de Kolmogorov). Ce modèle permet de décrire la zone d'atomisation du jet, cependant, il doit être couplé à une méthode de suivi lagrangien-eulérien pour les zones plus diluées du spray. Finalement, nous trouvons dans la littérature les simulations numériques directes de la fragmentation des jets comme celle présenté par (Shinjo and Umemura, 2011, 2010). Les moyens de calcul actuels limitent l'utilisation de la simulation numérique directe avec une résolution précise de tous les processus physiques de la fragmentation des jets dans des conditions réels (Gorokhovski and Cedex, 2008; Herrmann, 2010; Shinjo and Umemura, 2011, 2010). Seulement certains cas académiques peuvent être résolus à l'aide de cette technique.

2.3 FRAGMENTATION SECONDAIRE

Les gouttes générées par la fragmentation primaire sont dispersées dans le milieu environnant et sous certaines conditions peuvent se fragmenter à nouveau. Nous avons exposé les caractéristiques de la fragmentation secondaire pendant l'ICR dans la section 1.3.6. Nous parlerons ici plus approfondie de la physique de ce processus. Comme nous l'avons précisé dans le chapitre 1, **nous supposons que la fragmentation de gouttes est de caractère hydrodynamique et nous négligeons le mécanisme de fragmentation thermique**. L'intérêt principal de cette section est de caractériser les différents régimes connus de fragmentation et leurs caractéristiques instantanées et moyennes dans le temps.

La fragmentation hydrodynamique est le résultat des perturbations produites par la vitesse relative entre les gouttes et le fluide environnant. Le fluide environnant exerce deux types de contraintes mécaniques susceptibles de produire la rupture de la goutte :

- Contraintes visqueuses
- Contraintes à cause du gradient de pression dynamique

A contrario, nous notons deux types de forces stabilisantes :

- Tension de surface
- Contraintes visqueuses à cause de la viscosité de la goutte

2.3.1 MECANISMES DE STABILISATION, IMPACT DE LA SOLIDIFICATION

Les relations entre les contraintes exercées sur la goutte et les contraintes stabilisantes sont décrites par les nombres adimensionnels de Weber, de Reynolds et d'Ohnesorge. En fonction de l'intensité des perturbations hydrodynamiques, les gouttes peuvent se fragmenter selon divers régimes. Ceux-ci ont été identifiés grâce aux techniques de visualisation (ombroscopie) pour les systèmes liquide-gaz (Gelfand, 1996; Guildenbecher et al., 2009; Hsiang and Faeth, 1995; Pilch and Erdman, 1987); Par contre, pour les systèmes liquide/liquide, les régimes de fragmentation sont moins bien identifiés, en particulier pour les bas nombres de Weber. La transition entre ces régimes de fragmentation dépend principalement du nombre de Weber hydrodynamique mais également du nombre d'Ohnesorge (Hsiang and Faeth, 1995). Ce nombre d'Ohnesorge est défini à partir des temps caractéristiques de capillarité et de viscosité (t_{cap} et t_{vis}) définis comme suit (Villermaux, 2012):

$$t_{cap} \approx \sqrt{\frac{\rho_d D_0^3}{\sigma}},\ t_{vis} \approx \frac{\eta_d D_0}{\sigma} \text{ avec } Oh = \frac{t_{vis}}{t_{cap}} = \frac{\eta_d}{\sqrt{\rho_d D_0 \sigma}}$$

Quand la tension de surface et l'inertie sont prépondérantes, la fragmentation est pilotée par le temps capillaire. Si les forces visqueuses sont prédominantes sur l'inertie, le processus est piloté par le temps visqueux (plus lent que le temps capillaire). Si le nombre d'Ohnesorge est petit $(Oh < 0.1)$, l'effet stabilisant de la viscosité est considéré comme négligeable devant les effets de tension de surface.

Dans un cas typique ICR, le nombre d'Ohnesorge est de l'ordre de $1\ x\ 10^{-3}$ (en supposant une viscosité du corium de l'ordre de $1\ x\ 10^{-2}\ Pa.s$) ; ainsi la viscosité ne devrait pas intervenir lors de processus de fragmentation. Cependant, il faut noter qu'une solidification partielle se manifeste comme une forte viscosité. Ainsi, pour une goutte de taille centimétrique, une viscosité équivalente supérieure à $1\ Pa.s$ jouera un rôle d'atténuation de la fragmentation.

Nous notons que, dans le cas d'une solidification uniforme, nous pouvons utiliser des expression de viscosité équivalente en fonction du taux de phase liquide dans le corium (α_l) (voir par exemple Eq. 2-6). Dans ce cas, la valeur de $\mu \approx 1\ Pa.s$ est atteinte pour un taux de 50 % de liquide. Cette valeur est proche du taux de 35 % de liquide (65 % de fraction solide) menant à une viscosité infinie.

Eq. 2-6 $$\boldsymbol{\mu = \mu_0 \left(1 + \frac{3}{4}\left(\frac{\frac{1-\alpha_l}{1-0.35}}{1-\frac{1-\alpha_l}{1-0.35}}\right)\right)^2}$$ Variation de la viscosité en fonction de la fraction liquide

Il parait difficile de rechercher un critère suffisamment précis par ce biais, d'autant que la solidification n'est a priori pas uniforme dans la goutte. Classiquement, une goutte totalement liquide peut se fragmenter si les perturbations hydrodynamiques exercées par l'écoulement externe sont suffisamment importantes pour dépasser les forces stabilisantes de tension de surface et de viscosité. Ce rapport est caractérisé par le nombre de Weber critique (couramment pris égal à 12), lequel détermine la plus grande taille qu'une goutte stable[13] peut avoir dans un écoulement. La corrélation de Brodkey permet de calculer la variation du nombre de Weber critique prenant en compte la viscosité. Sur la Figure 2-15, nous voyons que l'effet de la viscosité ne devient notable que pour des nombres d'Ohnesorge de l'ordre de l'unité.

$$We_{cr} = 12\ (1 + 1.077\ Oh^{1.6})$$ ((Pilch and Erdman, 1987), corrélation de Brodkey)

[13] Goutte stable : Nous nous référons à une goutte stable quand elle ne se fragmente pas. Cependant elle peut se déformer et osciller

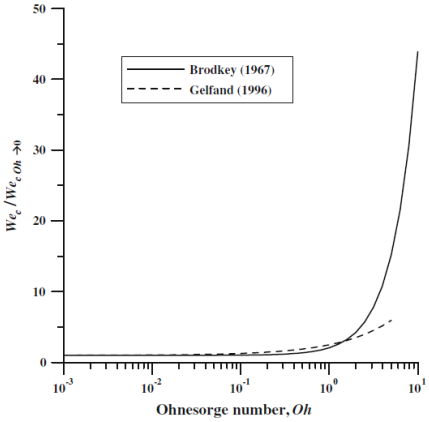


Figure 2-15 : Dépendance du nombre de Weber critique en fonction du nombre d'Ohnesorge (Guildenbecher et al., 2009)

2.3.2 ASPECT DYNAMIQUE DE LA FRAGMENTATION SECONDAIRE

Si le nombre de Weber de la goutte est supérieur au nombre de Weber critique, elle subira un processus de fragmentation suivant les deux étapes suivantes :

1. Déformation : changement de la topologie de la goutte initiale
2. Fragmentation : formation de gouttes filles et génération d'une polydispersion de gouttes.

Ces deux étapes de fragmentation peuvent être analysés temporellement en faisant intervenir un temps caractéristique de fragmentation (τ_d) suivant Ranger et Nicholls (Ranger and Nicholls, 1972). Ce temps est donné par l'expression suivante:

Eq. 2-7 $$\tau_d = \frac{D_d}{\Delta V_{dc}}\sqrt{\frac{\rho_d}{\rho_c}}$$

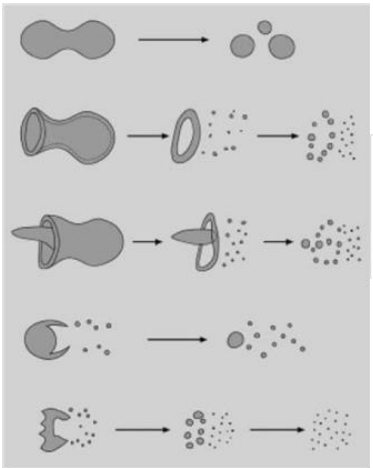
Où D_d est le diamètre initial de la goutte, ΔV_{dc} est la vitesse relative entre la goutte et le fluide environnant et ρ_d/ρ_c (ρ^*) le rapport de densités entre les fluides. Nous pouvons exprimer le temps réel de fragmentation de la forme suivante :

$$t_f = t^*\tau_d$$

Où t^* est le temps adimensionnel de fragmentation.

2.3.3 REGIMES DE FRAGMENTATION

En fonction de l'intensité de perturbations hydrodynamiques (quantifiés par le nombre de Weber), la goutte peut se fragmenter selon différents régimes ou modes. Identifier ces différents régimes dans les systèmes liquide/liquide (gallium/eau) est l'un de nos objectifs de thèse. Dans la vaste littérature concernant la fragmentation de gouttes liquides dans du gaz, divers modes de fragmentation ont été répertoriés (voir Figure 2-16).



Vibrational	$0 < We < \sim 11$
Bag	$\sim 11 < We < \sim 35$
Multimode	$\sim 35 < We < \sim 80$
Sheet-thinning	$\sim 80 < We < \sim 350$
Catastrophic	$We > \sim 350$

Figure 2-16 : Morphologie de la fragmentation de gouttes newtoniennes en configuration liquide/gaz (Guildenbecher et al., 2009)

Ces différents modes peuvent être observés dans des configurations de laboratoire (chute gravitaire ou onde de choc). Les valeurs de Weber de transition entre ces régimes sont données à titre indicatif. Malgré les nombreuses études sur la fragmentation, des caractéristiques importantes comme la taille des fragments générés, le nombre de fragments et les mécanismes précis de rupture ne sont pas complètement compris. Aux faibles perturbations, nous trouvons un régime d'oscillation compris entre un nombre de Weber zéro (absence des perturbations) jusqu'au Weber où la première rupture de la goutte apparait ($We > We_{cr}$, nous dépassons la limite de stabilité). Dans ce régime, la goutte se déforme en deux états (déformation selon la direction perpendiculaire et parallèle à l'écoulement externe) avec une fréquence d'oscillation qui diminue au fur et à mesure que le nombre de Weber augmente. Au contraire de la fréquence d'oscillation, l'amplitude de ces oscillations augmente avec le nombre de Weber. Quand le Weber est plus grand que la valeur du Weber critique, la déformation de la goutte est telle que les forces de tension superficielles n'arrivent plus à garder la cohérence de celle-ci et elle finit par se fragmenter en plusieurs morceaux.

Le régime de fragmentation en sac a été observé pour des nombre des Weber faiblement supérieurs au Weber critique. De nombreuses images sont maintenant disponibles sur ce phénomène particulièrement étonnant et complexe. Ce mode serait dû à des effets d'instabilité de type Rayleigh-Taylor (RT) où le gaz se trouve enfermé dans une poche au lieu de contourner la goutte, jusqu'à ce que la poche rompe. Plusieurs variantes de la formation en sac ont été aussi constatées lors des essais, tel est le cas du régime « bag and stamen » ou « multimode » selon la Figure 2-16. Un régime de fragmentation par arrachement de couche limite est observé pour des vitesses du fluide environnant relativement élevées. Dans ce régime, les gouttes filles sont arrachées de la périphérie de la goutte. Pour des nombres de Weber encore plus élevés, nous trouvons le régime dit "catastrophique" où l'arrachement de gouttes filles de la périphérie de la goutte mère est accompagné de la désintégration de la goutte mère à cause des instabilités du type Rayleigh-Taylor.

La plupart des études sur la transition entre les régimes de fragmentation sont effectués pour des rapports de densité $\left(\frac{\rho_d}{\rho_c} > 500\right)$. Cependant, lors de l'ICR, nous devons considérer également une configuration liquide/liquide avec un rapport de densité aux alentours de $\frac{\rho_d}{\rho_c} \approx 10$ (2,7 dans le cas des expériences avec de l'alumine). Dans cette configuration, la transition entre les régimes ainsi que le critère de stabilité des gouttes semblent être aussi déterminés par le nombre de Weber (Gelfand, 1996). A cause du nombre limité d'études sur le sujet, les limites de transition ne sont pas bien comprises, cependant, il s'avère que ces limites sont différentes entre les configurations liquide/liquide et liquide/gaz. Concernant le nombre de Weber critique, certaines études (Gelfand, 1996) rapportent une valeur aux alentours de $We_{cr} \approx 20$ [14]. De même, lors des études effectuées par Kim (Kim, 1983), les régimes de fragmentation à bas nombre de Weber (constatés lors des configurations liquide/gaz) ne sont pas observés pour une configuration liquide-liquide. Il s'agit en particulier de la configuration dite « bag breakup » ou « fragmentation en sac » en français (Figure 2-16). En effet, le phénomène de « bag breakup » n'a jamais été identifié pour des gouttes liquides dans un environnement liquide. Il semble que la fragmentation se produit directement dans un mode dit d'arrachement (stripping), c'est-à-dire de pelage par arrachage des couches superficielles (Figure 2-17), à partir d'un nombre de Weber de 30. Dans ce cas de figure, pendant les premiers instants de l'interaction, la goutte est déformée en un disque qui se courbe dans la direction de l'écoulement. Une nappe de liquide est ainsi formée, laquelle est instable et se désintègre en plusieurs morceaux (Gelfand, 1996). A plus haut régime de Weber, la fragmentation semble se faire par une combinaison d'arrachage de la couche limite (petite échelle) et des instabilités de type Rayleigh-Taylor. Ces modes de fragmentation sont présentés dans les études de Gelfand et de Kim (Gelfand, 1996; Kim, 1983) en utilisant une goutte de métal liquide à bas point de fusion dans l'eau. Les nombres de Weber utilisés sont élevés, allant jusqu'au 3600. L'absence de modes intermédiaires de rupture dans les configurations liquide/liquide est due principalement au rapport de masses volumiques qui affecte directement l'entrainement de la goutte et aux perturbations hydrodynamiques qui agissent plus rapidement sur la goutte à cause de l'incompressibilité du fluide environnant. Nous reviendrons plus en détail sur la dynamique de la fragmentation secondaire en chapitre 6.

[14] Le nombre de Weber critique dépend aussi de la méthode utilisé pour produire la fragmentation de la goutte, (onde de choc ou chute gravitaire)

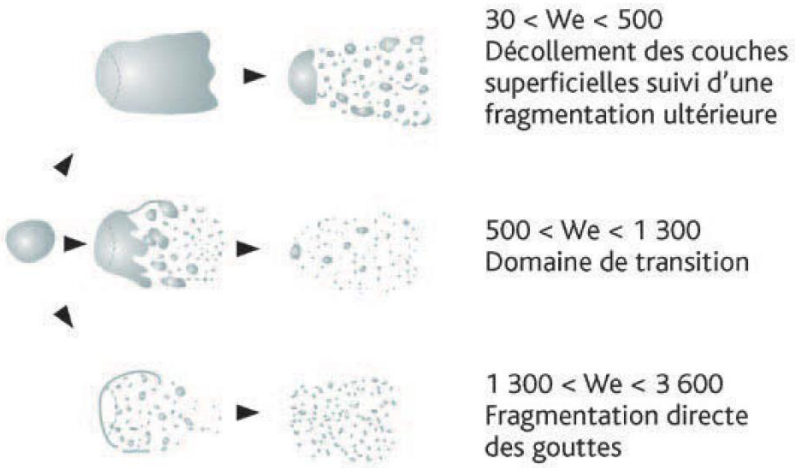


Figure 2-17 : Mécanismes de fragmentation dans une configuration liquide-liquide en fonction du nombre de Weber (Gelfand, 1996). **Figure prise du** (Jacquemain, 2013)

Malgré les remarquables différences entre les configurations liquide/gaz et liquide/liquide, l'analyse temporelle de la fragmentation montre que les temps de déformation et de fragmentation sont très similaires. Dans la plupart des situations, en particulier à bas nombre d'Ohnesorge, l'étape de déformation (avant rupture) est d'environ 1 à 2 fois le temps caractéristique τ_d $(1 < t^* < 2)$ et la fragmentation totale de la goutte dure de 4 à 6 τ_d $(4 < t^* < 6)$. Il est ainsi trouvé expérimentalement (cas liquide/gaz) que le temps total de fragmentation est peu dépendant des divers régimes de fragmentation (Hinze, 1955; Hsiang and Faeth, 1992). Nous pouvons considérer une valeur moyenne de $5{,}5\ \tau_d$ $(t^* = 5.5\ )$ pour les cas pratiques. Cependant, Il faut tenir compte que définir avec précision ce temps de fragmentation est difficile à cause des ambigüités sur le moment de fin de la fragmentation. Par ailleurs, nous constatons aussi une augmentation du temps de rupture pour des nombres d'Ohnesorge élevés $(Oh > 0.1)$ (Gelfand, 1996; Hsiang and Faeth, 1995; Pilch and Erdman, 1987).

Bien que nous ayons une idée sur les modes de fragmentation en liquide/liquide ainsi que sur le temps de fragmentation, la modélisation est confrontée à la méconnaissance de certaines quantités physiques. La tension de surface constitue un des plus importants paramètres physiques car le nombre de Weber y est inversement proportionnel. Cependant, la valeur de la tension de surface pour la plupart des configurations liquide/liquide qui nous intéressent (métaux liquides, oxydes divers, corium) n'est pas bien connue. Celle-ci est toutefois déterminante pour la plupart modèles de calcul de la taille de gouttes filles, comme nous le verrons dans la section suivante.

2.3.4 TAILLE DE GOUTTES

Pour ce qui concerne la taille des gouttes générées lors de la fragmentation secondaire, la situation est malheureusement encore plus confuse et très peu de données sont disponibles dans la bibliographie. Deux séries de résultats expérimentaux pour les systèmes liquide-gaz (L/G) et liquide-liquide (L/L) sont répertoriées dans la Figure 2-18. Les essais utilisent la méthode de fragmentation secondaire par une onde de choc. L'avantage de cette méthode est que la vitesse de la phase continue est presque constante pendant tout le processus de fragmentation. Dans le cas liquide/liquide, elle peut cependant induire une mise en vitesse quasi-instantanée de la goutte au passage de l'onde de choc, ce qui perturbe donc l'analyse. Dans (Wolfe and Andersen, 1964), les gouttes d'un composant liquide appelé BIS (bis(fluorosulfonyl)) de taille de l'ordre de $2.7\ mm$ sont utilisées. La vitesse de la phase continue (air) varie entre 40 et $120\ m/s$ pour de nombres de Weber compris entre 100 et 1300. Les propriétés du BIS à $298\ K$ sont :

$$\sigma = 0.0276\ N/m, \mu_d = 5.97{*}10^{-3}\text{Pa*s et } \rho_d = 915\ kg/m^3.$$

Pour les systèmes L/L, Gelfand (Gelfand, 1996; Kim, 1983) a reporté des essais effectués par l'institut allemand IKE. Dans ces essais, des gouttes de gallium d'environ $4\ mm$ sont utilisées. Le nombre de Weber initial varie entre 120 et 3500. Les propriétés du gallium à $370\ K$ sont les suivantes :

$$\sigma = 0.704\ N/m,\ \mu_d = 1.6 * 10^{-3}\ Pa * s \text{ et } \rho_d = 6073.24\ kg/m^3$$

Les données métal de Field's - eau sont issues des essais GALAD (Hadj-Achour et al., 2015) effectués au LEMTA dans le cadre du projet ICE. Ces essais consistent en la chute gravitaire d'une goutte de métal de Field's dans une piscine d'eau. Les fragments sont mesurés visuellement par analyse d'image (images obtenues par ombroscopie) et par tamisage. Le nombre de Weber de gouttes varie entre 40 et 90 (la

vitesse relative est calculé comme la vitesse théorique de chute de la goutte avant qu'elle impacte la piscine d'eau. Le ralentissement de la goutte par l'impacte est susceptible de modifier la valeur du Weber. Pour l'instant ceci n'a pas été quantifié). Les propriétés physiques du métal de Field's sont les suivantes :

$$\sigma = 0.5\ N/m,\ \mu_d = 1.0 * 10^{-2}\ Pa * s \text{ et } \rho_d = 8000\ kg/m^3$$

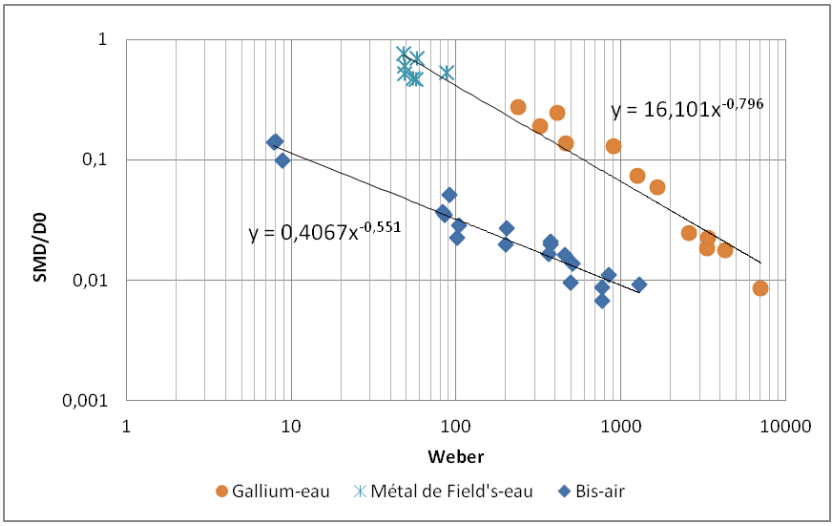


Figure 2-18 : Taille de fragments pour les systèmes Gallium-eau (Gelfand, 1996; Kim, 1983) et BIS-air (Wolfe and Andersen, 1964) à différents nombres de Weber. Les résultats Métal de Field's-eau correspondent aux essais GALAD effectués au LEMTA (Hadj-Achour et al., 2015)

Sur la Figure 2-18, nous constatons une différence sur les diamètres adimensionnels obtenus entre les systèmes L/G et L/L pour les mêmes nombres de Weber, les premiers donnant des gouttes plus petites d'environ un ordre de grandeur que les seconds. Il est important de souligner que le nombre de Weber est fonction des paramètres hydrodynamiques avant la fragmentation secondaire et que celui-ci change au cours de la fragmentation puisque la vitesse relative entre les gouttes et le milieu environnant varie, du fait de l'entrainement des gouttes. Cet effet est bien plus important pour les systèmes L/L, où le milieu ambiant génère une trainée plus importante sur les gouttes. Par conséquent, la vitesse relative entre les gouttes et la phase continue est rapidement réduite, ce qui a pour effet une augmentation de la taille moyenne des fragments générées.

2.3.5 REVUE DES MODELES LES PLUS COURANTS

Différents modèles et corrélations ont été proposés pour calculer le diamètre final des fragments après la fragmentation secondaire (Castrillon Escobar et al., 2013). Nous notons que ces divers modèles sont couramment utilisés dans les modèles de spray, mais, sont très peu documentés. La plupart de ces modèles ne sont donc associés à une validation connue ou référencée. Nous avons donc voulu dans un premier temps procéder à une étape de validation générale des modèles avant de les utiliser. Nous utilisons généralement la notion de Weber caractéristique pour les gouttes filles générées. La vitesse relative utilisée est celle obtenue entre la vitesse de la goutte mère et le milieu environnant aux premières instants de l'interaction. Par l'intermédiaire du nombre de Weber caractéristique, le diamètre des fragments est calculé selon l'expression suivante:

$$d_{fille} = \frac{We_{ch}\sigma}{\rho_c(\Delta V_{dc})^2} = \frac{We_{ch}\ D_0}{We_0}$$

We_0 étant le Weber de la goutte mère, We_{ch} le weber caractéristique de gouttes filles et d_{fille} le diamètre caractéristique (moyen) des gouttes filles lorsqu'elles sont générées.

- <u>Weber caractéristique constant</u>

Le choix le plus simple est bien sûr de considérer que la taille de gouttes de gouttes filles générées est limitée par la limite de stabilité dans l'écoulement donné (gradient de vitesse pris au début de la fragmentation). En conséquence, le nombre de Weber des gouttes filles générées (We_{ch}) doit être inférieur ou égal au nombre de Weber critique :

$$We_{ch} \leq We_{cr} = Cte$$

$$\frac{d_{filles}}{D_0} = \frac{Cte}{We_0}$$

Cependant, le nombre de Weber critique est une limite de stabilité donnant le diamètre le plus grand de gouttes stables dans l'écoulement et ne tient pas compte que les gouttes issues de la fragmentation ont des tailles très diverses, inclusive, plus petites que ce diamètre critique. En conséquence, un Weber caractéristique (Weber moyen) pourrait être inférieur au Weber critique. Il est d'usage de considérer que ce Weber caractéristique est de quelques unités. Par ailleurs, il est connu que le phénomène de fragmentation en sac conduit à des gouttes bien plus petites, dont la taille n'est pas pilotée par des effets hydrodynamiques. Nous attendons d'ores et déjà une déficience de ce modèle dans le régime des bas nombres de Weber.

Ce modèle est utilisé dans l'application EXPLO_FF[15] du code MC3D pour estimer la taille des fragments créés pendant l'explosion. Nous soulignons cependant une difficulté rencontrée par le fait qu'un nombre de Weber caractéristique important, de plusieurs dizaines, est nécessaire pour retrouver les résultats expérimentaux. Ceci parait conforme aux résultats de Kim (voir Figure 2-20) mais parait à ce stade difficile à justifier.

- <u>Arrachement de la couche limite (boundary layer stripping)</u>

Ce modèle plus élaboré est basé sur l'arrachement de gouttes à partir de la couche limite qui se forme dans la goutte sous l'effet du cisaillement imposé par l'écoulement environnant (Ranger and Nicholls, 1972). La taille des fragments est supposée proportionnelle à l'épaisseur de la couche limite qui se développe dans la goutte liquide (voir par exemple la Figure 2-19). Sur ce même principe, Hsiang et Faeth (Hsiang and Faeth, 1992) ont proposé une corrélation qui permet de calculer facilement le Weber caractéristique :

$$We_{ch} = C_s \left(\frac{\rho_d}{\rho_c}\right)^{\frac{1}{4}} \left[\frac{\mu_d}{\rho_d D_d \Delta V_{dc}}\right]^{\frac{1}{2}} We_0 \quad \text{avec} \quad We_0 = \frac{\rho_c D_0 (\Delta V_{dc})^2}{\sigma}$$

Ceci peut se réarranger pour avoir :

$$\frac{d_{fille}}{D_0} = C_s \left(\frac{\rho_d}{\rho_c}\right)^{\frac{1}{4}} \left[\frac{\mu_d}{\rho_d D_d \Delta V_{dc}}\right]^{\frac{1}{2}} = C_s \left(\frac{\rho_d}{\rho_c}\right)^{\frac{1}{4}} \mathrm{Re}_d^{\ -\frac{1}{2}}$$

Où C_s est un paramètre d'ajustement ; les auteurs proposent $C_s = 6.2$. Nous constatons que ce modèle propose donc une variation de la taille de gouttes générées dépendante du nombre de Reynolds (avec propriétés de la goutte), donc indépendante de la tension superficielle, ce qui est assez étonnant. Comparativement à la formulation précédente, nous passons également d'une influence en inverse du carré de la vitesse à une influence en inverse de la racine carrée, donc radicalement différente.

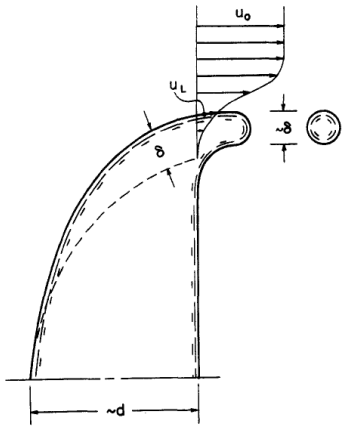


Figure 2-19 : Schéma du principe de fragmentation secondaire par arrachement de la couche limite (Hsiang and Faeth, 1992)

[15] Application d'explosion de MC3D où deux champs sont utilisés pour la phase dispersée. Un champ contient les gouttes qui sont susceptibles de se fragmenter et l'autre, les gouttes filles issues de la fragmentation secondaire ainsi que les fragments solidifiés.

- Modèle Kelvin-Helmholtz

Le modèle de Kelvin-Helmholtz, bien que développé pour des surfaces planes, peut être utilisé pour décrire approximativement la fragmentation des gouttes. Dans ce cas, une relation directe est établie entre la longueur d'onde de la perturbation la plus instable qui peut se développer à l'interface et la taille finale de gouttes générées par la fragmentation secondaire.

$$k = \frac{2}{3}\ \frac{(\Delta V_{dc})^2 \rho_d \rho_c}{\sigma(\rho_d+\rho_c)}, \quad \text{où} \quad \lambda = \frac{2\pi}{k} \quad \text{et} \quad d_{fille} = C_0\lambda$$

Où C_0 est une constante. Avec l'approximation $\rho_d \gg \rho_c$, ce modèle est très similaire au critère de Weber constant.

- Modèle de Boiko et al. (Boiko and Poplavski, 2012)

Boiko & Poplavski (Boiko and Poplavski, 2012) ont proposé une formulation différente, faisant intervenir la viscosité. Dans ce modèle, la fragmentation des gouttes est due au mécanisme d'arrachage de gouttes à cause des instabilités hydrodynamiques qui se développent à l'interface de la goutte (instabilités du type KH). Les gouttes sont donc arrachées des crêtes des ondes. Ce modèle a été proposé initialement par Mayer (Mayer, 1961).

$$\lambda = 9\pi\sqrt[3]{16}\mu_d^{\frac{2}{3}}\sigma^{\frac{1}{3}}\rho_d^{-\frac{1}{3}}\left(\frac{\rho_c(\Delta V_{dc})^2}{2}\right)^{-\frac{2}{3}} \quad \text{et} \quad d_{fille} = C_1\lambda,$$

C_1 vaut de 0,2 à 0,5 (dans la Figure 2-20, nous utilisons 0,2 pour le système liquide-gaz et 0,5 pour le système liquide-liquide). En réarrangeant, nous obtenons :

$$\frac{d_{fille}}{D_0} = \frac{C_2\left(\frac{\mu_d \Delta V_{dc}}{\sigma}\right)^{\frac{2}{3}}\left(\frac{\rho_c}{\rho_d}\right)^{\frac{1}{3}}}{We_0}, \quad \text{avec } C_2 = 113\ C_1$$

- Reitz (Reitz and Diwakar, 1987), «wave model»

Ce modèle est un des plus couramment utilisés dans les études de sprays liquides. Il est basé sur les instabilités de cisaillement qui peuvent se développer à l'interface de la goutte. Le modèle est similaire à celui de Kelvin-Helmholtz mais prend en compte la viscosité. Les corrélations ont été obtenues par des études d'instabilité en faisant varier les propriétés physiques des fluides. De même que pour le modèle Kelvin-Helmholtz, la taille de fragments issus de la fragmentation secondaire est proportionnelle à la longueur d'onde de la perturbation la plus instable qui se développe à l'interface.

$$\lambda = \frac{9.02\ D_0\left(1 + 0.45\sqrt{Oh}\right)(1 + 0.4\ \mathrm{T}^{0.7})}{(1 + 0.865\ We^{1.67})^{0.6}} \quad \text{avec} \quad T = Oh\sqrt{We}$$

$$d_{fille} = 2B_0\lambda$$

Selon Reitz, $B_0 = 0.61$

Avec les valeurs courantes de viscosité de notre problème (sans prise en compte de la solidification), cette formulation est en fait équivalente au modèle de KH classique ou au Weber caractéristique constant.

- Ishii et Kataoka (Ishii and Kataoka, 1982; Saito et al., 2014)

Ce modèle est issu des travaux d'Ishii et Kataoka (Ishii and Kataoka, 1982) sur les écoulements diphasiques liquide-gaz du type annulaire en conduite. Il prend en compte la viscosité des deux fluides :

$$We_{ch} = C'\left[Re_c^{\frac{2}{3}}\left(\frac{\rho_c}{\rho_d}\right)^{-\frac{1}{3}}\left(\frac{\mu_c}{\mu_d}\right)^{\frac{2}{3}}\right]$$

Avec $Re_c = \frac{\rho_c \Delta V_{dc} D_d}{\mu_c}$ et $C' = 0.0953$ (modification effectuée par Saito et al. (Saito et al., 2014))

- Corrélation basé sur les résultats expérimentaux

Nous pouvons toutefois analyser les résultats expérimentaux disponibles et proposer une corrélation qui s'adapte aux différentes configurations de fragmentation secondaire. Nous trouvons la corrélation suivante :

$$\mathrm{We_{ch}} = \mathrm{C_s}\left(\frac{\rho_c}{\rho_d}\right)^{0.4}[\mathrm{Re_c}]^{\frac{1}{4}}[We]^{-\frac{3}{4}} \quad \text{avec } C_s = 2.5,\ Re_c = \frac{\rho_c D_0 \Delta V_{dc}}{\mu_c}$$

Cette corrélation fait intervenir le nombre de Reynolds (viscosité du fluide environnant), le nombre de Weber (tension de surface) ainsi que le rapport de masses volumiques (goutte – réfrigérant). Elle est donc supposée valable en liquide-liquide et en gaz-liquide bien que les pentes de la Figure 2-18 soient différentes. Nous remarquons que la dépendance en vitesse obtenue conduit à une loi de puissance d'exposant $\beta = 1{,}25$ non loin de la valeur 1,31 trouvée dans (Rimbert and Castanet, 2011).

2.3.5.1 Comparaison avec les données expérimentales

L'évaluation de différentes expressions pour la taille de gouttes permet de discerner la pertinence de différents modèles pour évaluer la taille des fragments générés pour les systèmes L/G ainsi que pour les systèmes L/L. Les valeurs obtenues par ces expressions sont comparées aux données des essais expérimentaux présentés précédemment dans la Figure 2-20. Il est important de noter au préalable que nous considérons ici des données globales, sans prise en compte d'effet d'entrainement. Cependant, pour le cas L/G, nous pouvons estimer que l'entrainement est faible.

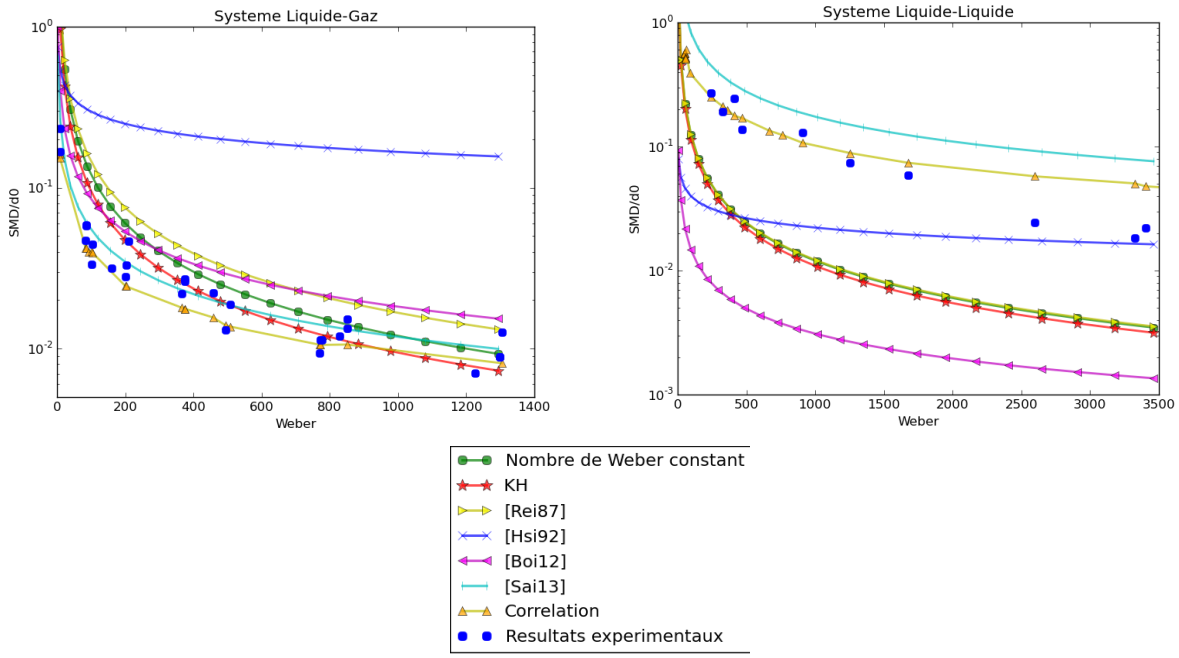


Figure 2-20 : Comparaison de différents modèles de fragmentation par rapport aux données expérimentaux en systèmes L/G (gauche, (Wolfe and Andersen, 1964)**) et L/L (droite,** (Kim, 1983)**)**

Sur cette base, il semble que le modèle de Hsiang et al. (boundary layer stripping) soit à écarter même dans le cas L/G (pourtant développé pour des cas L/G)[16]. Celui de Boiko et al., donne des résultats corrects en L/G mais semble à écarter pour les cas L/L. La corrélation d'Ishii (Saito et al., 2014) donne des résultats excellents en L/G. Les modèles de Weber caractéristique constant, de Kelvin-Helmholtz et de Reitz montrent une bonne concordance avec les données expérimentales pour les systèmes L/G.

La situation pour le système L/L est plus confuse et aucun modèle ne semble satisfaisant. Comme nous l'avons dit, cela peut être dû pour une bonne part à l'effet d'entrainement de la goutte mère. Cependant, la forme générale obtenue par les modèles de Hsiang et Boiko ne parait pas cohérente. Le modèle d'Ishii, excellent en L/G, prédit déjà de gouttes trop grandes sans prendre en compte l'entrainement, qui va conduire à un accroissement de la taille finale de gouttes filles. Il nous faut donc écarter ce modèle en L/L. Les autres modèles donnent des résultats très similaires et pourraient être acceptables une fois pris en compte les effets d'entrainement.

2.3.6 DISTRIBUTION DE TAILLE DE PARTICULES

Nous disposons de très peu de résultats concernant la distribution de taille de particules après la fragmentation secondaire. Nous pouvons toutefois citer les résultats de Wolfe et Andersen (Wolfe and Andersen, 1964). La Figure 2-21 montre deux distributions de taille à deux Weber différents.

---

[16] Nous attribuons cet écart aux données expérimentales utilisées pour la validation du modèle. Nous n'avons pas accès aux données utilisées par (Hsiang and Faeth, 1992) afin de les exploiter et comparer avec les autres corrélations

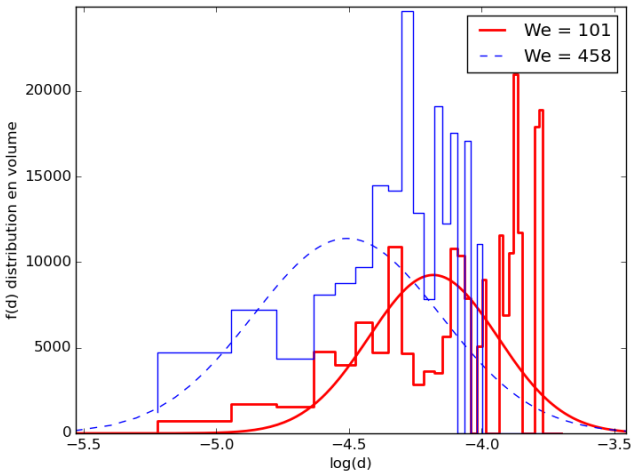


Figure 2-21 : Distribution de taille de particules pour différents nombres de Weber (Wolfe and Andersen, 1964)

Selon les études effectues par Hsiang et Faeth (Hsiang and Faeth, 1992), la distribution de taille de gouttes satisfait une loi racine-normale universelle proposé par Simmons (Simmons, 1977a, 1977b) pour toutes les régimes de fragmentation (en configuration L/G)[17]. De même que pour la fragmentation primaire, nous pouvons analyser globalement la distribution en utilisant le rapport entre le diamètre de Sauter (SMD) et le diamètre médian ($D_{0,50}$). Hsiang et al. trouvent des valeurs très proches de 1.2 pour les trois régimes analysées (fragmentation en sac, multimode et par arrachement). Nous ne disposons d'aucune information concernant la distribution de taille de particules issues de la fragmentation secondaire pour les systèmes liquide/liquide. Nous y reviendrons en chapitre 6.

2.3.1 COEFFICIENT DE TRAINÉE

Pendant le processus de fragmentation, l'augmentation de la surface perpendiculaire à l'écoulement à cause de la déformation de la goutte est considérable, agissant directement sur l'entrainement de celle-ci. Lors de la modélisation de la fragmentation, il convient de prendre en compte cet entrainement modifié qui se traduit par l'augmentation du coefficient de trainée (classiquement considère comme celui d'une sphère solide). Il est cependant, difficile de faire une formulation pour le coefficient de trainée car celui-ci varie temporellement lors du processus de fragmentation, fonction de la déformation et de la fragmentation. (Khare and Yang, 2013) proposent de calculer le coefficient de trainée instantanée de la goutte en utilisant l'expression suivante :

Eq. 2-8 $$C_d(t) = \frac{\frac{d}{dt}(m\Delta V_{dc})}{\frac{1}{2}\rho_c \Delta V_{dc}^2 A_{frontal}(t)}$$

Où $A_{frontal}(t) = \pi D_{(t)}^2$. ΔV_{dc} correspond à la différence de vitesse entre la goutte mère et le fluide environnant. La vitesse de la goutte est calculée en fonction du déplacement du centre de masse.

Khare et Yang (Khare and Yang, 2013) ont effectué des simulations numériques directes de la fragmentation de gouttes dans une large intervalle de nombres de Weber et de Reynolds avec un rapport de densité de 8.29. Les auteurs constatent une augmentation du coefficient de trainée causé par la déformation de la goutte dans le sens perpendiculaire à l'écoulement externe, suivi d'une diminution de celui-ci à cause de la fragmentation de la goutte mère déformé. Dans la Figure 2-22 nous trouvons un exemple de la variation temporelle[18] du coefficient de trainée pour le régime de fragmentation multimodale. Celle-ci commence par une valeur de $C_d = 0.45$ correspondant au coefficient de trainée d'une sphère solide.

---

[17] Cette distribution est construite à partir des gouttes filles en fin d'interaction. Si la fragmentation de la goutte mère n'est pas complète, celle-ci ne sera pas prise en compte dans la distribution.

[18] Les auteurs font une normalisation du temps en fonction du $D_d/\Delta V_{dc}$, sans prendre en compte la racine carrée de rapport de masses volumiques

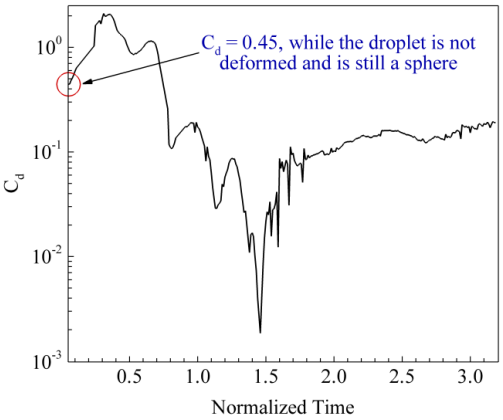


Figure 2-22 : Variation temporelle du coefficient de trainée pour une fragmentation en régime multimodale

D'un point de vu pratique (pour les codes de simulation numérique CFD), la force de trainée qui agisse sur la goutte est calculée par l'utilisation d'une moyenne temporelle du coefficient de trainée. Ce coefficient de trainée moyen est calculé grâce à l'Eq. 2-8, en prenant comme référence $t^* = 0$ (état initiale avant fragmentation) et $t^* = t_f/\tau_d$ où t_f est le temps total de fragmentation. D'après les simulation numériques effectués par (Khare and Yang, 2013), le coefficient de trainée moyen est donné comme une fonction du nombre de Weber selon l'expression :

$$\frac{C_d}{C_{d,0}} = \frac{7}{4} We^{-0.175}$$

Avec $C_{d,0} = 0.45$ (coefficient de trainée d'une sphère solide) et valable pour $We > 20$ et $10^3 < Re < 10^5$.

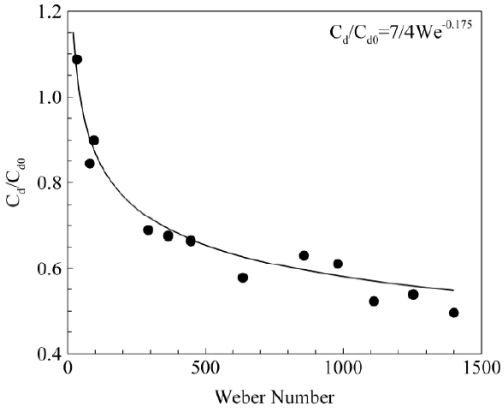


Figure 2-23 : Variation de coefficient de trainée moyen en fonction du nombre de Weber (Khare and Yang, 2013)

La Figure 2-23 montre que le coefficient de trainée moyen diminue au fur et à mesure que le nombre de Weber augmente. Les auteurs expliquent ce comportement à cause d'une plus large déformation pour les bas nombres de Weber, accompagnée d'une dynamique plus lente. Au contraire, pour les régimes à haut nombre de Weber, la dynamique de la fragmentation est plus rapide avec des coefficients de trainée moins importants. Les auteurs affirment aussi que le maximum du coefficient de trainée pour les simulations effectuées diminue en fonction du nombre de Weber. Gelfand (Gelfand, 1996) propose aussi une variation du coefficient de trainée moyen qui diminue en fonction du Reynolds. L'auteur propose trois C_d moyens :

$$C_d = \begin{cases} 5{,}6\ pour\ 2 \times 10^4 < Re < 5 \times 10^4 \\ 3{,}5\ pour\ 5 \times 10^4 < Re < 10^5 \\ 1{,}4\ pour\ 10^5 < Re < 2 \times 10^5 \end{cases}$$

Nous notons (d'après la littérature) que le rapport de masses volumiques a peu d'effet sur le coefficient de trainée et que la recirculation à l'intérieur de la goutte ne joue pas un rôle prépondérant car celle-ci a très peu de temps pour se développer.

2.3.2 SOLIDIFICATION ET STABILITE DE GOUTTES

Dans une situation ICR, la solidification de gouttes peut jouer un rôle important lors de processus de fragmentation, au point même de l'empêcher ou l'arrêter prématurément. Certaines études supposent que la solidification partielle de la goutte se manifeste à la surface de la goutte par la formation d'une croûte d'une certaine épaisseur. Cet épaisseur dépendra du temps de séjour de la goutte dans le réfrigérant et des transferts thermiques. Nous pouvons citer à ce sujet les travaux réalisées par Haraldsson (Haraldsson et al., 2001) et par l'équipe au Jozef Stefan Institute, Slovénie (Uršič et al., 2011). Ils considèrent que la croûte joue un rôle d'inhibition de la fragmentation modifiant directement le nombre de Weber critique. Pour inclure cet effet, les auteurs utilisent une analyse de stabilité de l'écoulement du type Kelvin-Helmholtz proposé par Epstein (Epstein, 1977). Dans ce modèle, la croute est considérée comme une couche mince déformable de manière élastique dont nous devons rechercher ses conditions de stabilité. La surface de la goutte est considéré infiniment plate de manière à effectuer une analyse en deux dimensions en coordonnées cartésiennes (voir Figure 2-24). L'épaisseur de la croûte est supposée être nulle (sauf pour le calcul de stabilité), son inertie est négligée et les perturbations sont de faible amplitude afin de rester dans le domaine linéaire.

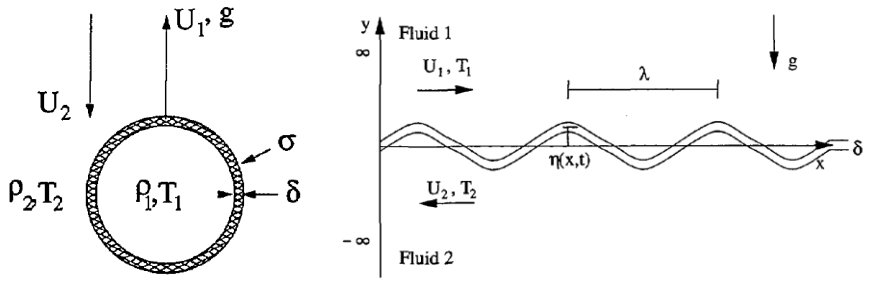


Figure 2-24 : Gauche : Schéma de la formation d'une croûte solide à la surface de la goutte de corium ; Droite : Modélisation de l'instabilités à la surface de la goutte avec la présence de la croûte (Haraldsson et al., 2001)

Les contraintes qui s'exercent sur la croûte sont calculées en utilisant la théorie des poutres. Les contraintes générées par le gradient de température dans la croûte sont négligées. D'après les calculs, un nombre adimensionnel dit aéro-élastique modifié est défini comme suit :

$$Ae_* = 12\,\frac{D_d^3 \rho_d (\Delta V_{dc})^2}{E\delta_s^3}\,(1-\epsilon^2)$$

Avec E égale au module d'élasticité de Young et ϵ le coefficient de Poisson. Ce nombre aéro-élastique caractérise le rapport entre les perturbations hydrodynamiques et les forces stabilisantes par la présence de la croute solide. Ce nombre adimensionnel conjugué avec le nombre de Weber permettent de caractériser la fragmentation de gouttes dans les régimes contrôles par la fragmentation (piloté par le nombre de Weber, faible impact de la croute) et par le refroidissement (piloté par le nombre aero-élastique, fort impact de la croute)

Dans cette modélisation, une goutte sera instable et pourrait se fragmenter si le nombre de Weber est supérieur au nombre de Weber critique et si le nombre aéro-élastique est supérieur à une valeur critique. A partir de ses observations expérimentales, Haraldsson propose un nombre aéro-élastique critique $Ae_{*,critique} \approx 2 * 10^4$. Dans ces expériences, des gouttes d'un alliage de Pb-Bi à différentes compositions[19] pénètrent dans l'eau liquide et se solidifient en se refroidissement et se fragmentant, de sorte qu'une compétition d'effet s'installe. Un de principaux inconvénients de ce critère est qu'il nécessite le calcul de l'épaisseur de la croute, lequel dépend des transferts thermiques et de l'histoire de la goutte dans le réfrigérant. En fait, le critère lui-même est basé sur une estimation de l'épaisseur de croute, avec donc un certain nombre d'hypothèses.

Ursic (Uršič et al., 2011) a développé dans le logiciel MC3D une modélisation de l'impact de la solidification de gouttes sur la fragmentation, avec un principe similaire. Il propose pour cela un suivi eulérien de la rigidité de la goutte et de l'énergie emmagasinée dans la croûte. Ce modèle reste pour l'instant assez complexe et très hypothétique. D'ailleurs, il n'est pas utilisé dans le code MC3D pour les calculs de sûreté de réacteurs.

---

[19] Composition eutectique (44.5% Pb - 55.5% Bi) et non-eutectique (20% Pb – 80% Bi)

2.3.3 MODÉLISATION DE LA FRAGMENTATION SECONDAIRE

Dans les codes qui décrivent le jet comme un train de particules, les mécanismes de fragmentation secondaire actent comme un processus principal de fragmentation du corium. Pour les autres codes, décrivant plus explicitement le jet continu et les gouttes, la fragmentation secondaire est un modèle optionnel de fragmentation à plus petite échelle. Nous faisons une compilation de quelques modèles de fragmentation secondaire dans le Tableau 6. Ces divers modèles sont issus de résultats expérimentaux et théoriques.

Auteur/nom du modèle	Description
Corrélation de Pilch (Pilch and Erdman, 1987)	Ce modèle décrit la fragmentation de gouttes suivant le mécanisme d'instabilité de Rayleigh-Taylor. Il est conçu pour de nombres de Weber supérieurs à 350. La formulation générale de la variation du diamètre de la goutte est : $$\frac{dD}{dt} = -C_0\sqrt{\frac{\rho_c}{\rho_d}}\Delta V_{dc} \text{ avec } C_0 \approx 0.245$$ Pour le code MC3D, cette corrélation est utilisée aussi pour de nombres de Weber inférieurs à 350, en introduisant de fonctions d'amortissement ($f_{1_{(We)}}$ et $f_{2_{(We)}}$) pour les nombres de Weber entre $12 < We < 350$. La formulation générale pour MC3D en termes d'aire interfaciale de gouttes est : $$\frac{dA}{dt} = C_0\frac{A}{D}\sqrt{\frac{\rho_c}{\rho_d}}\Delta V_{dc} f_{1_{(We)}} f_{2_{(We)}} \quad \text{avec} \quad 0.245 < C_0 < 0.29$$ Voir annexe 8.5 pour plus d'informations sur cette modélisation
Corrélation de Chu et Corradini	Dans le code spécialisé TEXAS, la fragmentation du front du jet provient du mécanisme d'instabilité de Rayleigh-Taylor. Le modèle développé par Chu et Corradini donne une expression similaire à celle de Pilch et Erdman : $$\frac{dD}{dt} = -f_0\sqrt{\frac{\rho_c}{\rho_d}}\Delta V_{dc} \text{ avec } f_0 = \left(0.1093 - 0.078\sqrt{\frac{\rho_c}{\rho_d}}\right)We^{0.246}$$
Modèle pour JASMINE et MATTINA	Ces codes utilisent une variante de la corrélation de Pilch et Erdman (Pilch and Erdman, 1987), laquelle prend compte différentes régimes de fragmentation (fonction du nombre de Weber). Cette corrélation n'utilise pas les variables locales instantanées sinon qu'elle se sert de conditions initiales avant le processus de fragmentation. La variation temporelle de la goutte est donnée par les expressions suivantes :

	$$\frac{dD_p}{dt} = \frac{d_{smx} - D_p}{\tau_{brk}}.$$ $$d_{smx} = \frac{We_c \sigma_d}{\rho_c v_0^2}\left(1 - \frac{v^*}{v_0}\right)^{-2}$$ $$\tau_{brk} = \tau^* \frac{d_0}{v_0 \epsilon^{0.5}}$$ $$v^* = v_0 \epsilon^{0.5}\left(\frac{0.75 C_d \tau^*}{1 + 0.75 C_d \epsilon^{0.5} \tau^*}\right)$$ $$\tau^* = \begin{cases} 6(We-12)^{-0.25} & (12 \le We < 18) \\ 2.45(We-12)^{0.25} & (18 \le We < 45) \\ 14.1(We-12)^{-0.25} & (45 \le We < 351) \\ 0.766(We-12)^{0.25} & (351 \le We < 2670) \\ 5.5 & (2670 \le We) \end{cases}$$ $$C_d = \begin{cases} 5.6 & (Re < 4 \times 10^4) \\ 3.3 & (4 \times 10^4 \le Re < 10^5) \\ 1.4 & (10^5 \le Re) \end{cases}$$

Tableau 6 : Compilation de quelques modèles de fragmentation secondaire utilisés dans les codes spécialisés ICR (Meignen, 2005)

Ces divers modèles de fragmentation secondaire ne sont pas adaptés pour la fragmentation de gouttes à bas nombre de Weber. Dans la plupart de codes, le processus de fragmentation primaire donne de diamètres de gouttes proche de diamètres finaux, donc, l'impact de la fragmentation secondaire est limité.

Nous trouvons dans la littérature deux autre modélisations de la fragmentation secondaire, notamment utilisées pour les codes avec suivi lagrangien de la phase dispersé. Le premier est le modèle TAB (Taylor Analogy Breakup) proposé par O'Rourke (O'Rourke and Amsden, 1987) et le deuxième est la modélisation DDB (Droplet Deformation and Breakup) proposé par Ibrahim (Ibrahim et al., 1993).

La modélisation TAB compare l'oscillation d'une goutte (due aux effets hydrodynamiques) à un système oscillatoire forcé et amortie. La rupture de la goutte est donnée quand l'amplitude d'oscillation dépasse une certaine limite déterminée principalement par les forces de cohésion de la tension de surface. La force externe représente les forces hydrodynamiques sur la goutte, la tension surface représente le ressort et la viscosité l'amortissement. (Zeoli and Gu, 2006) montrent que ce modèle a trois différentes constantes à déterminer par comparaison aux résultats expérimentales. Les divers résultats expérimentaux en liquide/gaz et liquide/liquide montrent que le nombre critique de Weber ainsi que les constantes du modèle dépendront de la configuration étudié. La modélisation DDB considère que la goutte est dans écoulement potentiel. La goutte change sa morphologie initiale de sphère vers un sphéroïde « oblate » avec le semi-axe majeur dans le sens perpendiculaire à l'écoulement et le semi-axe mineur dans le sens de l'écoulement. La dynamique de la déformation de la goutte est calculée avec un bilan d'énergie cinétique et potentiel de la goutte. La goutte est complètement déformée quand l'amplitude de déformation soit égale à deux fois le rayon de la goutte.

2.3.4 FRAGMENTATION EN MILIEU DIPHASIQUE

La fragmentation de jets et de gouttes dans une situation ICR se produit dans un milieu diphasique constitué du réfrigérant en phase vapeur et liquide. Les codes de simulation doivent gérer l'impact de ce milieu diphasique dans la fragmentation. Il faut tenir en compte que pour aucun code, la configuration de l'écoulement n'a pas un suivi particulier, c'est-à-dire, elle est évaluée localement (par maille) en fonction des taux volumiques et de la carte d'écoulement choisie pour chaque code. Aucune équation de transport de configuration où d'analyse des mailles environnants la maille de calcul est effectué. En fonction de la fraction massique de réfrigérant sous forme vapeur et liquide, nous pouvons définir les configurations suivantes :

- Ecoulement à bulles : le réfrigérant est liquide et continue avec des bulles dispersées. Les gouttes de corium sont en contact avec du réfrigérant liquide (en ébullition en film)
- Ecoulement à gouttes : le réfrigérant est dans l'état vapeur avec des gouttes liquides dispersées. Les gouttes de corium sont prioritairement en contact avec la vapeur. (la fraction massique d'eau peut cependant influencer la fragmentation)

- Ecoulement de transition : en plusieurs codes, il y a une zone de transition entre l'écoulement à bulles et à gouttes. Une première approche considère une fraction comme un écoulement à bulles et une autre fraction comme un écoulement à gouttes. Ceci est fonction de la fraction volumique. Un seconde approche, considère une zone de transition d'écoulement à poche de vapeur, en effet, tout la vapeur contribué à former une grande slug de vapeur (voir Figure 2-25).

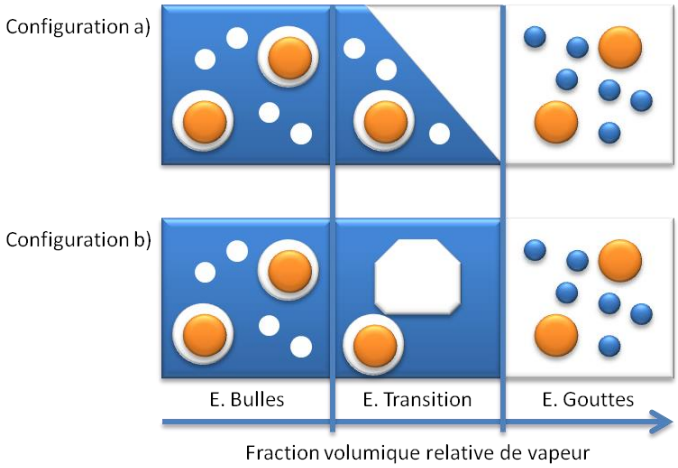


Figure 2-25 : Carte des écoulements : bleu = réfrigérant en phase liquide, blanc = vapeur + gaz, orange = gouttes de combustible

Cette carte d'écoulement pilote plusieurs modèles et lois constitutives des codes ICR, tel que les transferts thermiques et les lois de fragmentation. Concernant la fragmentation, nous constatons un manque de connaissances précises sur l'influence d'un mélange diphasique sur la fragmentation. De ce fait, plusieurs propositions pour calculer le taux effectif de fragmentation et les caractéristiques de gouttes et fragments générées peuvent être utilisées :

- Les valeurs caractéristiques de la fragmentation sont interpolées en fonction des taux calculées dans chaque configuration séparément.
- Le fluide environnant (mélange diphasique) est considéré comme un fluide moyenné.
- Les valeurs caractéristiques de la fragmentation sont calculées indépendamment pour chacune des configurations puis, ses contributions sont additionnées.

En effet, il est constaté que la plupart des codes utilisent les mêmes lois physiques, cependant, c'est la transposition en écoulements multiphasiques qui fait la différence entre eux (Meignen and Magallon, 2005). Nous constatons que les lois ne sont pas conçues spécifiquement pour une configuration ou une autre (liquide-liquide ou liquide-gaz). Le type de configuration est pris en compte à travers les propriétés physiques du fluide environnant. En effet, le problème réside dans la morphologie de chaque configuration. Par exemple, pour une configuration à gouttes, l'impact du réfrigérant liquide dispersé n'est pas le même qu'un réfrigérant continu. Ceci s'avère problématique car la présence du réfrigérant liquide a un impact significatif sur la fragmentation. Ceci est accentué par le fait que le réfrigérant liquide dispersé se déplace à hautes vitesses à cause de l'entrainement effectué par la phase vapeur. La même situation arrive en considérant un fluide moyen à cause de l'importante masse volumique du réfrigérant liquide comparé avec la vapeur.

Dans ce type de formulation, la présence d'un film de vapeur autour de gouttes de corium qui se trouvent dans l'eau n'a aucun impact sur la fragmentation. En effet, le film de vapeur est seulement calculé pour contribuer à la fraction volumique de gaz dans la maille. Aucune modélisation de la fragmentation et aucun essai expérimental n'a mis en évidence l'impact exact de la présence du film de vapeur. Les modèles implémentées dans les codes ne prennent pas en compte sa présence et des systèmes purement diphasiques (liquide-liquide ou liquide-gaz) sont considérés, spécialement pour la fragmentation de gouttes.

3 CHAPITRE 3 : OBJECTIFS ET TRAVAUX DE THESE

Dans les deux chapitres précédents nous avons donné une vue générale sur l'ICR et la fragmentation des jets liquides à haute température et isothermes. Nous allons présenter ici une synthèse rapide de l'ICR et détailler les grandes orientations prises pour la thèse.

Pendant le déroulement d'un accident grave dans un réacteur nucléaire, le corium formé (combustible fondu) à cause de l'absence prolongée de refroidissement du cœur, peut interagir énergétiquement avec de l'eau dans la cuve où, si celle-ci vient à rompre, dans le puits de cuve. Le jet de corium formé se fragmente au contact du réfrigérant liquide. Cette fragmentation est initiée, en premier lieu, par un processus de déstabilisation primaire à cause des grandes échelles de l'écoulement. Cette déstabilisation primaire conduit d'une part à des grandes déformations du jet et à la formation de gouttes de grande taille (i.e. fragmentation primaire). Ces gouttes sont éjectées de la surface du jet vers le réfrigérant. Les transferts thermiques du corium ($T \approx 3000\ K$) vers le réfrigérant entrainent une ébullition intense mais dépendante de la température initiale du réfrigérant (soit sous-refroidi ou à saturation). La génération du vide (vapeur d'eau) provoque la formation d'un film de vapeur épais autour du jet et les poches de vapeur qui remontent le long de la zone de mélange vont à leur tour perturber l'écoulement autour des grandes gouttes générées par la déstabilisation primaire. Cette perturbation, principalement d'origine hydrodynamique produit la fragmentation secondaire de gouttes. Cette fragmentation secondaire peut intervenir dans le cadre de la phase de prémélange ainsi que pendant la phase d'explosion. La fragmentation de gouttes peut être également accompagnée d'une fragmentation thermique issue, semble-t-il, de contacts locaux entre le corium et l'eau liquide. Nos calculs d'ordre de grandeur avec le logiciel MC3D, nous ont permis de déterminer que, pendant le prémélange, le nombre de Weber des gouttes est relativement bas ($We < 300$) par rapport aux estimations initiales. Pendant leur fragmentation, les gouttes sont fortement ralenties à cause de leur déformation, qui se traduit par une augmentation de leur coefficient de trainée. Ces gouttes perdent de l'énergie (diminution de leur température) à cause des échanges de chaleur corium-réfrigérant et leur solidification peut intervenir pendant la fragmentation ou après que celle-ci se soit produit.

Cette phase de prémélange conditionne donc les possibles conséquences de l'accident. Dans certains cas, une explosion de vapeur peut se déclencher si les conditions de mélange sont adéquates. L'explosion dépend principalement du taux du vide et de la masse de particules liquides qui se trouvent entourées du réfrigérant susceptible de se vaporiser. Dans le cas où une explosion de vapeur ne se produit pas, les fragments formés pendant le prémélange formeront un lit de débris, dont le refroidissement dépendra de ses caractéristiques (porosité et perméabilité) qui elles-mêmes dépendent des caractéristiques morphologiques et thermiques des fragments créées. Rappelons que l'oxydation peut intervenir pendant la phase de prémélange si le corium n'est pas complètement oxydé avant l'ICR. Cette réaction chimique dégage de l'hydrogène susceptible de modifier le taux de vide de la zone de mélange. De même, l'oxydation est une réaction exothermique qui pourrait ralentir la solidification des gouttes.

Une des idées principales à retenir des chapitres bibliographiques est que les conséquences de l'ICR dépendent fortement des caractéristiques de la fragmentation du jet. Ces caractéristiques comme la longueur de pénétration, la taille des particules générées, les régimes de fragmentation, entre autres, pilotent globalement les divers processus physiques de l'interaction (ébullition, solidification et oxydation). Il convient donc d'améliorer la compréhension des mécanismes responsables de la fragmentation, tant des gouttes que des jets liquides dans l'eau.

Les diverses études expérimentales, théoriques et numériques présentées dans les chapitres précédents nous amènent à proposer un certain nombre d'hypothèses pour notre étude et notre modélisation sur la fragmentation de jets de corium :

- Nous considérons donc la fragmentation comme un processus multi-échelle comportant deux phases, déstabilisation primaire et secondaire.
- Ces déstabilisations dépendent des grandes échelles et petites échelles de l'écoulement, respectivement.
- La déstabilisation primaire serait responsable de la quantité de masse de corium qui est arrachée de la surface du jet, tandis que la déstabilisation secondaire piloterait la taille finale de fragments (voir Figure 3-1).

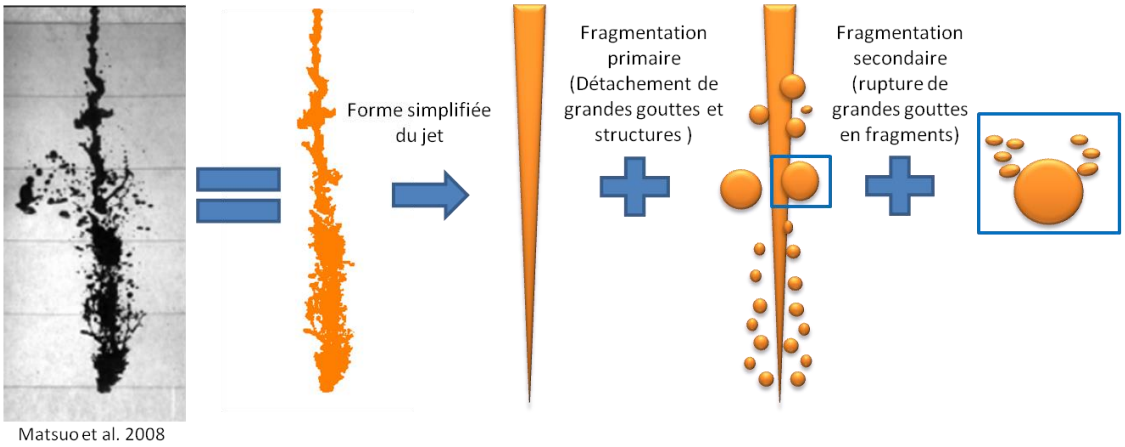


Figure 3-1 : Schéma de principe du traitement de la fragmentation du jet (approche adopté en MC3D), découplant fragmentation primaire de grande échelle et fragmentation secondaire locale

Concernant la zone de mélange, nous considérons au premier instant que le jet est entouré d'un film de vapeur épais et que la déstabilisation primaire agit principalement le long de la colonne du jet. Les apports dus à la fragmentation d'une possible boule de vortex en tête du jet sont jugés négligeables.

Les deux déstabilisations sont principalement dues à des effets hydrodynamiques. Les perturbations sont générés par le gradient de vitesse entre le corium et le réfrigérant. Du côté de la modélisation, la configuration de la fragmentation du corium avec le réfrigérant (liquide + vapeur) est considéré comme la somme de deux cas diphasiques : liquide-gaz (goutte – réfrigérant vapeur) et liquide-liquide (goutte – réfrigérant liquide). En effet, nous ne disposons pas d'informations expérimentales ni théorique qui nous permettent de comprendre l'impact d'un mélange diphasique (vapeur + liquide) pendant le processus de fragmentation. Nous considérons que la fragmentation du corium est prépondérante dans la configuration liquide-liquide. En effet, lorsque les gouttes se trouvent dans le gaz, elles sont dans un régime oscillatoire à faible nombre de Weber (pas de fragmentation). Concernant le film de vapeur autour des gouttes et du jet, certains essais expérimentaux montrent un faible impact de celui-ci pendant la fragmentation. Pour nous, le film de vapeur joue principalement un rôle d'inhibiteur des contacts corium–réfrigérant liquide, empêchant la fragmentation thermique. Cependant, une compréhension plus approfondie de son impact semble nécessaire.

La fragmentation thermique est autre effet que nous avons supposé négligeable pendant la fragmentation. Malgré l'apparition de ce phénomène dans la phase de prémélange, son caractère local et son apparition stochastique n'en font pas un phénomène prépondérant. Le manque des données expérimentales spécifiques à ce type de fragmentation dans les conditions de prémélange nous empêche d'en proposer une modélisation dans le cadre de cette thèse. Nous supposons que les effets liées à la fragmentation thermique sont négligeables devant les effets de fragmentation hydrodynamique, tant pour la fragmentation du jet que pour celle de gouttes.

Nous avons écarté aussi l'effet de la solidification du métal liquide pendant la fragmentation. Il est difficile de juger dans les conditions liées au prémélange l'influence de la solidification du métal pendant la fragmentation du jet et des gouttes. Cet effet de solidification est sans doute présent mais difficile à prédire et à modéliser. Il faut prendre en compte que la solidification des gouttes intervient principalement sur des structures de corium déformées à cause des perturbations hydrodynamiques produites par le milieu environnant. Nous ne développerons pas de modèle spécifique à la solidification dans cette thèse, cependant, nous discuterons cet aspect sur la nouvelle modélisation de MC3D pour la phase dispersée (MUDROPS). L'objectif de cette modélisation a été, dans un premier temps, de prédire plus précisément les transferts thermiques et la solidification associée à une population de gouttes polydispersée.

Nous avons volontairement écarté l'effet de l'oxydation qui intervient de manière secondaire (indirecte) dans le processus en limitant la solidification (par la chaleur de réaction) et en augmentant le taux de vapeur. Pour l'heure, les données expérimentales sont de toutes manières insuffisantes. Les tests avec oxydation (CCM et FARO L-11), ne mettent pas en évidence d'impact particulier de l'oxydation (mais l'oxydation avec l'acier est peu énergétique et donc peu susceptible de modifier fortement l'état du corium).

L'objectif général de la présente thèse est la modélisation de la fragmentation des jets de corium. Il faut décrire les mécanismes qui pilotent le passage d'un état de jet cohérent vers un état de gouttes stables dispersées dans le réfrigérant (Figure 0-3).

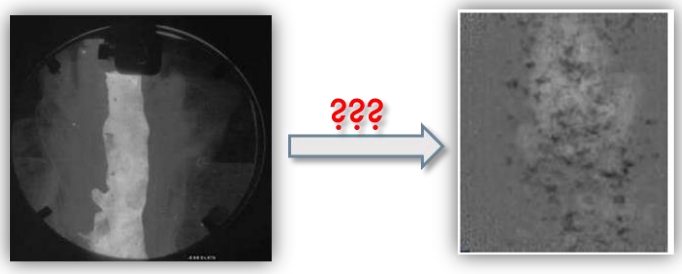


Figure 3-2 : Problème de la fragmentation du corium (passage d'une configuration de jet continu vers des gouttes et fragments)

Dans notre proposition de découplage d'échelle, la modélisation de la fragmentation primaire vise à prendre en compte les effets des structures de grande échelle sur les instabilités qui se développent à la surface du jet. Le principal mécanisme d'instabilité est celui de Kelvin-Helmholtz que **nous proposons comme la base de notre modélisation**. Nous reprendrons la méthode utilisée dans MC3D pour calculer les propriétés moyennes autour de l'interface du jet, ce qui est nécessaire pour les calculs de l'instabilité. En prenant comme base les études de fragmentation isotherme et les études de fragmentation de jets liquides par des courants gazeux, nous allons considérer que la fragmentation primaire génère une distribution de taille de particules du type log-normale. Pour ce faire, nous utiliserons la modélisation de type MUSIG (Multi-Size Group Approach) pour la description de la phase dispersée. Nous appellerons par la suite ce modèle multi-champs MUDROPS. Les paramètres de la distribution seront reliés aux grandeurs caractéristiques de l'instabilité Kelvin-Helmholtz.

La fragmentation secondaire des gouttes issues de la fragmentation primaire est prise en compte à travers un modèle sous-maille dans MUDROPS. Initialement, le modèle MUDROPS homogène (un seul champ de vitesse pour la phase dispersé) a été utilisé. Nous constatons lors de nos calculs, que la surface de gouttes pilote tant les transferts thermiques que l'entrainement des gouttes. Pendant la fragmentation de gouttes, la surface d'échange croit très rapidement, principalement à cause de la présence de gouttes de petite taille. Cette augmentation de la surface de gouttes produit un entrainement plus rapide de la masse du liquide (grandes et petites gouttes confondues). Cet entrainement impacte fortement la fragmentation des gouttes car le gradient de vitesse entre les gouttes et le fluide environnant décroit plus rapidement que prévu. Pour pallier à ce problème, nous proposons une modélisation du champ de gouttes dispersées selon une méthodologie du type MUDROPS hétérogène. Cette modélisation comporte plusieurs champs de vitesse pour la phase dispersée, ce qui permet de mieux modéliser la dynamique de la fragmentation. Dans cette hypothèse, la fragmentation primaire n'est pas modifiée ; le modèle MUDROPS hétérogène vise seulement à améliorer la fragmentation secondaire (Figure 3-3).

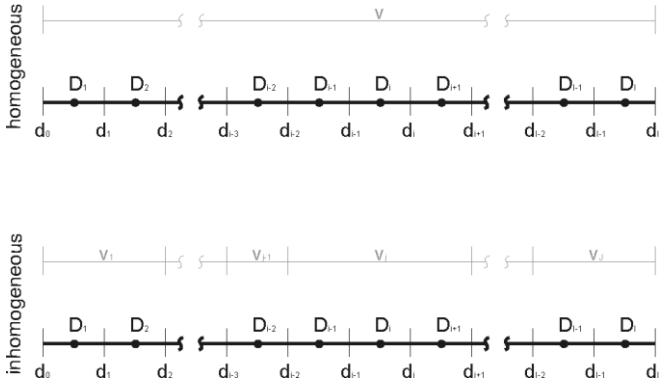


Figure 3-3 : Méthode MUSIG homogène (haut) et hétérogène (bas)

Bien que la méthode hétérogène semble plus juste pour la modélisation de la fragmentation secondaire, nous constatons lors de nos calculs, que nous avons une compréhension limitée du phénomène, surtout pour les configurations liquide-liquide. Ceci est mis en évidence par les choix de paramètres de calcul et les diverses hypothèses prises pour la construction du modèle.

De manière à recueillir les informations manquantes sur les mécanismes de fragmentation secondaire, nous avons décidé **d'effectuer de simulations numériques** de la fragmentation de gouttes de métal liquide dans l'eau. Cette modélisation a été effectuée à l'aide du code de simulation numérique CFD Gerris. Nous avons choisi ce code car ses caractéristiques permettent d'effectuer des simulations bien résolues spatialement et temporellement avec un temps de calcul raisonnable. L'intérêt principal de ces

simulations est de fournir des éléments supplémentaires pour la compréhension de la fragmentation de gouttes à faible nombre de Weber. Même dans ces conditions isothermes et à bas Weber, les simulations numériques montrent la complexité du phénomène. Nous avons essayé de comprendre plus en détail les différents régimes de fragmentation, en proposant une nouvelle classification liquide-liquide. Ce travail nous semble assez novateur, motif pour lequel nous y avons consacré la totalité du chapitre 6. Nous nous sommes servis des résultats de la simulation de gouttes de manière à corroborer nos résultats de simulation MC3D et proposer de nouvelles corrélations qui peuvent s'implémenter dans MC3D.

4 CHAPITRE 4 : METHODOLOGIE ET MODELISATION DE LA FRAGMENTATION DES JETS DE CORIUM DANS LE LOGICIEL MC3D

Dans ce chapitre nous allons exposer les principales caractéristiques de la modélisation MUDROPS pour le champ dispersé de gouttes (voir annexe 8.5 pour les caractéristiques de la modélisation PREMEL). Nous présenterons l'équation de conservation de masse pour MUDROPS où les termes sources de fragmentation interviennent. Une nouvelle discrétisation de l'intervalle de diamètres de particules est présenté et comparé à l'ancienne méthodologie implémentée dans le code.

4.1 MODÉLISATION MUDROPS

La récente application de MC3D dénommée MUDROPS est basée sur la méthodologie MUSIG « Multi-Size Group approach » proposée initialement par Lo (Lo, 1996). Cette application utilise un large spectre de taille de particules grâce à l'utilisation de plusieurs champs ou groupes de gouttes. Le modèle MUDROPS utilise différents champs numériques de masse (plusieurs constituants) pour décrire les gouttes de corium avec leur propre mélange d'énergie (voir Figure 4-1). Ces constituants sont regroupés dans un seul mélange de vitesse pour l'implémentation MUDROPS homogène. Pour éviter une augmentation considérable du temps de calcul, l'énergie des gouttes est décrite de manière explicite, c'est-à-dire, calculée à la fin du pas de temps. De même, un diamètre représentatif est imposé pour chaque classe de gouttes (Meignen et al., 2014a).

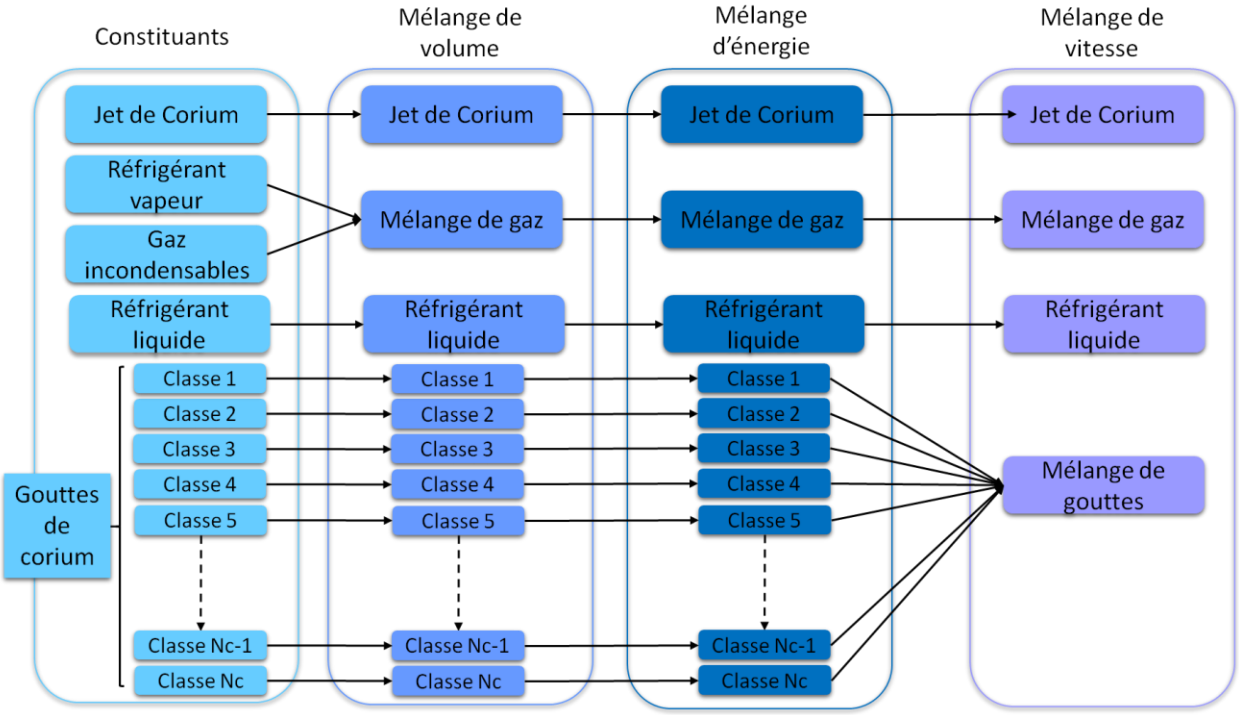


Figure 4-1 : Architecture de l'application MUDROPS homogène de MC3D

L'architecture de l'application MUDROPS présentée en Figure 4-1 ne comprend qu'un seul mélange de vitesse pour les diverses classes de gouttes. Dans ce type de modélisation les gouttes sont advectées avec un seul champ de vitesse indépendamment de leur diamètre ou de leur température. L'entrainement effectif est calculé à partir de la surface totale de gouttes $Aire_{totale}$ calculée via le diamètre de sauter d'une goutte représentative (même rapport volume/surface que la distribution de gouttes). Cette méthodologie s'avère juste quand les vitesses de glissement entre particules sont indépendantes de la taille des particules et leur temps de relaxation est suffisamment petit par rapport à l'échelle de temps inertielle (Lucas and Krepper, 2007). Cette situation correspond aux distributions de tailles de particules concentrées sur une gamme restreinte de diamètres. Nous avons constaté lors de notre analyse bibliographique que la taille des particules issues de la fragmentation de jets de métaux liquide est très large (trois ordres de grandeurs entre le plus petit diamètre et le plus grand diamètre). Comme nous allons le démontrer dans le chapitre suivant, l'application complète du modèle avec fragmentation secondaire nécessite une description plus précise de la dynamique entre les gouttes de divers diamètres. La modélisation homogène ne sera donc pas adaptée pour décrire de manière précise

la phase dispersée de particules quand le mouvement relatif entre les particules est important. Nous avons développé une méthode dite « hétérogène » dans laquelle nous effectuons des regroupements de classes au sein de trois champs de vitesse différents (voir Figure 4-2). Ces groupements de vitesses permettent de calculer des dynamiques différentes pour les grosses et petites particules tout en assurant un temps de calcul raisonnable.

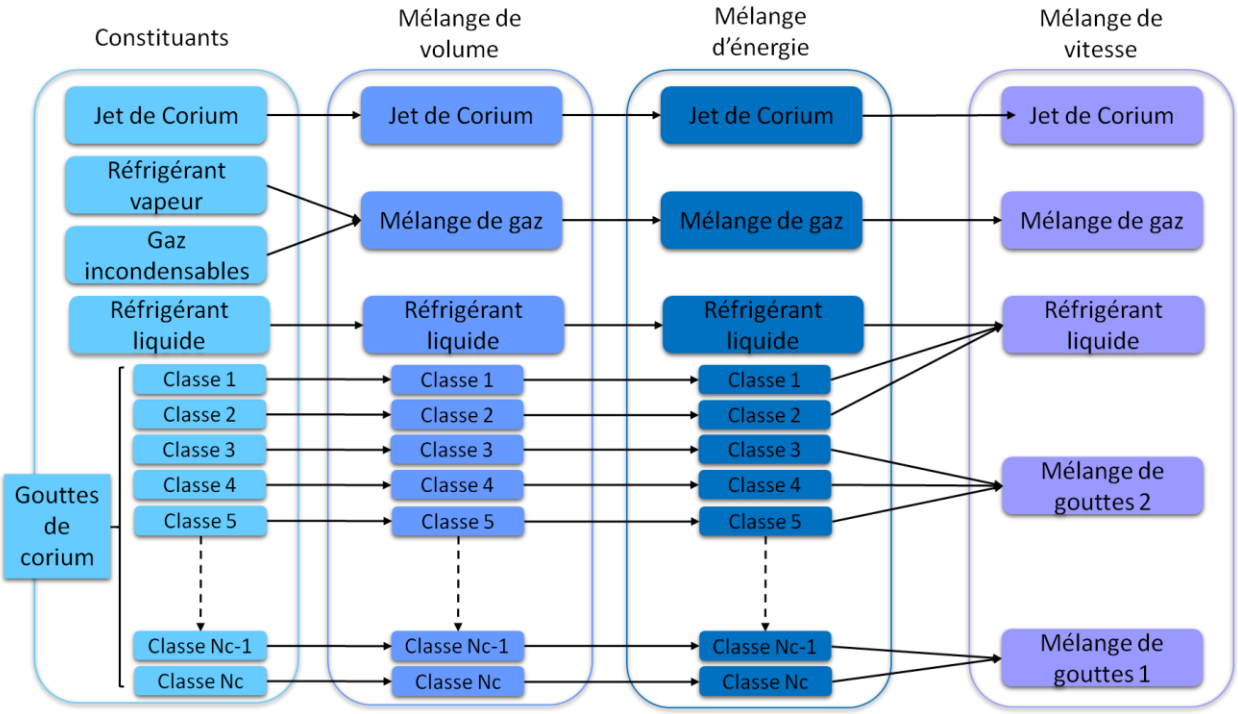


Figure 4-2 : Architecture de l'application MUDROPS inhomogène/hétérogène de MC3D

L'utilisation du modèle hétérogène est préférable car la fragmentation induit un accroissement important d'aire interfaciale et donc un plus fort couplage gouttes/eau (dépendant de la taille de particules). Le modèle hétérogène permet, pour le cas de la modélisation multi-échelle, de découpler dynamiquement les grosses gouttes (non encore fragmentées) des petites (produites par la fragmentation). Ce même type de modélisation est utilisé pour les écoulements à bulles dispersées, où deux ou trois groupes de vitesses semblent être suffisants pour capturer les phénomènes fondamentaux en écoulements à bulles ou à poches de type « slug flow » (Lucas and Krepper, 2007). Il est cependant difficile de faire un groupement précis de classes en fonction de la physique du mouvement de gouttes dans une situation ICR. Nous proposons une modélisation MUDROPS hétérogène avec trois champs de vitesse, dont le troisième champ de gouttes est en équilibre dynamique avec le mélange du réfrigérant liquide. Les classes de gouttes contenues dans ce dernier champ de vitesse sont supposées être de petite taille et suivre l'écoulement du liquide porteur.

Concernant la fragmentation primaire et secondaire, nous proposons une modélisation de la fragmentation primaire par transfert de masse entre le jet et les diverses classes de gouttes. Pour la rupture secondaire nous proposons des termes sources de transfert entre les classes. Les termes sources de masse à cause de la fragmentation primaire et secondaire sont pris en compte à travers de l'équation de conservation de la masse de chacune des classes (Eq. 4-1 et Eq. 4-2) :

Eq. 4-1
$$\frac{\partial \alpha_{d,i}\rho_d}{\partial t} + div\left(\alpha_{d,i}\rho_d \overrightarrow{V_{d,J}}\right) = \Gamma_{source}$$

Où

Eq. 4-2
$$\Gamma_{source} = \Gamma_{frag^+,jet\to drop_i} + \Gamma_{frag^+,drop_k\to drop_i} + \Gamma_{frag^-,drop_i\to drop_k} + \Gamma_{coal,drop_i\to jet}$$

Avec :

- $\Gamma_{frag^+,jet\to drop_i}$: Gain de masse à cause de la fragmentation primaire
- $\Gamma_{frag^+,drop_k\to drop_i}$: Gain de masse à cause de la fragmentation de grosses gouttes k vers les gouttes de la classe i
- $\Gamma_{frag^-,drop_i\to drop_k}$: Perte de masse à cause de la fragmentation de gouttes de la classe i vers la classe k

- $\Gamma_{coal,drop_i \rightarrow jet}$: Coalescence des gouttes de la classe i dans le champ jet (comporte aussi la coalescence sur des structures)

Les termes sources relatives à la fragmentation seront décrits plus en détail dans le paragraphe 4.2.

4.1.1 DISCRÉTISATION DE LA DISTRIBUTION

La précision avec laquelle la distribution de taille de gouttes est résolue numériquement, dépend de la méthode et du nombre de classes utilisées. D'après notre étude bibliographique présentée en chapitre 1 et 2, les tailles de gouttes issues de la fragmentation du jet peuvent varier de plusieurs ordre de grandeur (de $100\ \mu m$ jusqu'au $1\ cm$). Cet écart entre les plus petites et les plus grosses gouttes (3 ordres de grandeur) est dû au caractère multi-échelle de la fragmentation. Dans le logiciel MC3D, deux paramètres définissant l'intervalle de taille de gouttes de la distribution qui sera considéré doivent être prédéfinies :

- DDRMIN : Estimation du plus petit diamètre de gouttes pendant la simulation
- DMAX : Estimation du plus grand diamètre de gouttes pendant la simulation

En regardant les différents essais de fragmentation de jets de métal liquide, nous trouvons qu'une valeur de $DDRMIN \approx 0.1\ mm$ semble être assez pratique. Les essais de fragmentation avec des métaux liquides à bas point de fusion montrent qu'environ 3% de la masse totale de débris ont un diamètre inférieur à $0.1\ mm$ (sauf le test IEMS à $5\ m/s$ (voir Figure 2-13) où 10% de la masse de gouttes ont un diamètre plus petit que $0.1\ mm$). Le plus petit diamètre dans (Burger et al., 1995) est de $0.5\ mm$. Concernant les essais à haute température ICR sans explosion, la masse de débris ayant un diamètre inférieur à $0.3\ mm$ est faible (inférieur à 5%) pour la plupart des tests. En effet, le plus petit diamètre est compris entre $0.2\ mm$ et $0.5\ mm$. Concernant le plus grand diamètre des gouttes, les valeurs de diamètres relevées d'après les essais CCM se trouvent entre $20\ mm$ et $30\ mm$. Nous considèrons un diamètre de $50\ mm$ pour être prudent. Les diamètres minimum et maximum considérés seront les suivants :

- $DDRMIN = 1.0e-4\ m$
- $DMAX = 0.05\ m$

La méthode implémentée dans MC3D consiste à supposer des classes définies par les bornes inférieures et supérieures ainsi que par un diamètre représentatif imposé lors de la phase d'initialisation du calcul (voir Figure 4-3). Ces diamètres seront constants pendant toute la durée du calcul.

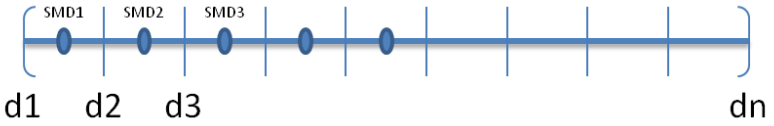


Figure 4-3 : Schéma de la discrétisation de l'intervalle de diamètres de gouttes compris entre d_1 et d_{nc}. Les diamètres d_i représentent les bornes des classes tandis que les diamètres SMD_i correspondent aux diamètres représentatifs de chaque classe

La précision avec laquelle une distribution de taille de gouttes est discrétisée dépendra du nombre de classes choisi ainsi que des bornes qui déterminent la position de chaque classe. Plusieurs manières de calculer les bornes des classes sont possibles. Cependant, dans le cadre des présents travaux, seulement deux manières différentes pour déterminer les bornes ont été implémentées dans MC3D. En choisissant une discrétisation régulière avec une progression linéaire ou avec une progression logarithmique. Numériquement pour effectuer la discrétisation de l'intervalle de taille de gouttes, nous devons définir les paramètres suivants :

- Donnée utilisateur : Estimation des diamètres minimum et maximum de tailles de gouttes
- Donnée utilisateur : Nombre de classes
- Donnée calculée : Bornes inférieures et supérieures de chacune des classes (diamètres d_i de la Figure 4-3)
- Donnée calculée : Diamètre représentatif de chacune de classes (diamètre SMD_i de la Figure 4-3)

4.1.1.1 <u>Calcul de bornes inférieur et supérieur de classes</u>

La première étape de discrétisation consiste à découper l'intervalle de diamètres en fonction du nombre de classes définies par l'utilisateur (N_c). Chaque classe i aura donc une borne inférieure dénotée d_i et une borne supérieure dénotée d_{i+1}. La borne supérieure de la classe i correspondra à la borne inférieure de la classe $i+1$. Nous avons évalué deux types de discrétisation, linéaire et logarithmique. La première

considère une taille de classes $(d_{i+1} - d_i)$ constante. La deuxième considère une discrétisation dite logarithmique où la taille de la classe varie le long de l'intervalle de tailles. Les équations qui déterminent la position des bornes inférieures (d_i) et supérieures (d_{i+1}) pour un nombre de classes N_c sont les suivantes :

⇨ Discrétisation linéaire :

$$d_{i,i\neq 1} = DDRMIN + \left(i - \frac{3}{2}\right)\frac{DMAX - DDRMIN}{(N_C - 1)}$$

$$d_{i+1,i<ND} = DDRMIN + \left(i - \frac{1}{2}\right)\frac{(DMAX - DDRMIN)}{(N_C - 1)}$$

Si $i = 1,\ d_i = 0.0$ et si $i = N_C,\ d_{i+1} = 2 * DMAX$[20]

⇨ Discrétisation logarithmique :

$$d_{i,i\neq 1} = 0.5 * DDRMIN * \left(1.0 + exp\left(\frac{ln\left(\frac{DMAX}{DDRMIN}\right)}{(N_C - 1)}\right)\right) * exp\left(\frac{(i-1) * ln\left(\frac{DMAX}{DDRMIN}\right)}{(N_C - 1)}\right),$$

$$d_{i+1,i<N_c} = 0.5 * DDRMIN * \left(1.0 + exp\left(\frac{ln\left(\frac{DMAX}{DDRMIN}\right)}{(N_C - 1)}\right)\right) * exp\left(\frac{i * ln\left(\frac{DMAX}{DDRMIN}\right)}{(N_C - 1)}\right)$$

avec $DDRMIN \neq 0.0$

si $i = 1,\ d_i = DDRMIN/10$ et si $i = N_C,\ d_{i+1} = 2 * DMAX$

Dans la Figure 4-4 nous comparons les deux méthodes de discrétisation pour un intervalle de taille de gouttes donnée par $DDRMIN = 1.0e - 4\,m$ et $DMAX = 0.05\,m$. Nous calculons la discrétisation d'une fonction de densité de probabilité du type log-normale ayant pour paramètres $SMD = 2.5\,mm$ et $D_{0,50} = 3.1\,mm$. Nous constatons qualitativement que les deux discrétisations reproduisent bien la fonction de densité de probabilité, cependant, la résolution de gouttes comprises avant le maximum de la fonction est meilleur pour la discrétisation logarithmique. Il faut se rappeler que les petites gouttes, ayant une surface d'échange importante, sont responsables des échanges (de quantité de mouvement et de chaleur) entre les gouttes et le milieu environnant. Concernant les grosses gouttes, la discrétisation linéaire présente une meilleure concordance par rapport à la courbe théorique. Cependant, nous jugeons que l'impact des grosses gouttes pour les échanges thermiques conduisant à la vaporisation du fluide réfrigérant est du deuxième ordre.

[20] La borne inférieur de la première classe d_1 ainsi que la borne supérieure de la dernière classe d_{N_c+1} sont choisis de manière à couvrir la totalité de petites et grosses gouttes générées pendant le calcul

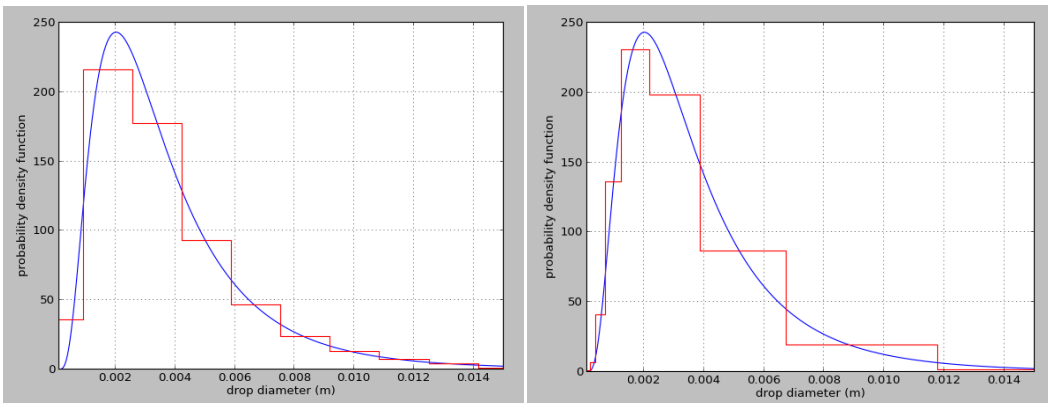


Figure 4-4 : Distribution du type log-normale déterminé par $SMD = 2.5\ mm, D_{0,50} = 3.1\ mm$ $(Ratio = 1.24)$. Nous supposons une discrétisation du type linéaire (gauche) et logarithmique (droite) en 10 classes de l'intervalle des diamètres compris entre $[DDRMIN = 0.1\ mm, DMAX = 5\ cm]$

4.1.1.2 Calcul de diamètre de Sauter représentatif des classes

Les équations qui décrivent le champ dispersé pour la méthodologie MUDROPS sont basés uniquement sur la fraction massique de chacune de classes (α_i). Lors des simulations MC3D, le calcul des échanges thermiques, des termes de frottement, etc., utilisent la surface des gouttes, laquelle est indirectement calculée en MUDROPS avec la fraction massique de la classe α_i et son diamètre de sauter représentatif SMD_i. Indépendamment de la méthode de discrétisation utilisée, l'aire des gouttes et le diamètre de Sauter global d'une distribution quelconque sont calculés à l'aide des expressions suivantes:

Eq. 4-3 $$SMD_{global} = \frac{\sum_{i=1}^{i=NC} \alpha_i}{\sum_{i=1}^{i=NC} 6 * \frac{\alpha_i}{SMD_i}} \qquad Aire_{totale} = \sum_{i=1}^{i=NC} 6 * \frac{\alpha_i}{SMD_i}$$

Nous n'avons pas implémenté d'équations supplémentaires pour le suivi de la surface ou du diamètre des gouttes, par conséquent, les valeurs de SMD_i de chaque classe doivent rester constantes pendant toute la durée du calcul. Nous avons évalué deux manières différentes pour calculer le diamètre SMD_i. La première méthode est basée sur une fonction de densité de probabilité prédéfinie par l'utilisateur. Cette méthode s'avère précise quand la distribution de taille de particules reste la même partout dans le domaine et pour toute la durée de calcul, telle qu'est effectué avec la modélisation de la fragmentation CONST pour la déstabilisation primaire. Le problème avec ce type de modélisation survient lors de l'utilisation de la modélisation multi-échelles proposée dans cette thèse car la fonction de densité de probabilité ne peut pas être prédite lors de la phase d'initialisation. Il convient donc de définir des diamètres de Sauter représentatifs qui ne dépendent pas d'une distribution quelconque imposée par l'utilisateur. Nous expliquons ci-dessous les deux méthodologies :

- Diamètre de Sauter calculé en fonction d'une distribution définie par l'utilisateur

Chaque classe dispose d'une borne inférieure, d'une borne supérieure et d'un diamètre représentatif (diamètre de Sauter). Le principe de cette méthode est présenté dans la Figure 4-5. Dans le code MC3D, l'utilisateur peut imposer une distribution du type log-normale[21] laquelle sera utilisée pour calculer les diamètres représentatifs de chacune des classes.

[21] L'utilisateur doit fournir additionnement le rapport $\frac{D_{0,50}}{SMD}$ et la valeur du SMD de la distribution.

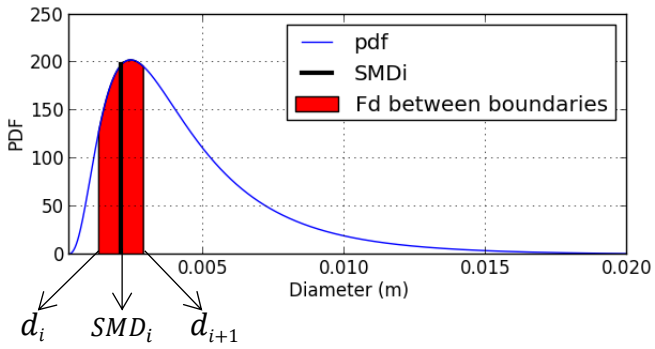


Figure 4-5 : Exemple d'une classe dans une distribution log-normale

Pour calculer la valeur du SMD_i de chacune des classes, la méthode propose de calculer le diamètre de Sauter réel de chaque classe par une intégration numérique de l'aire des gouttes contenues entre les bornes d_i et d_{i+1}. Une fois l'aire des gouttes connue, le diamètre de sauter est équivalent à :

$$\textbf{Eq. 4-4} \qquad \boldsymbol{SMD_i = \frac{6*(F_{(d_{i+1})}-F_{(d_i)})}{Aire_i}}$$

Le numérateur indique le volume des gouttes entre les bornes d_i et d_{i+1} calculé par l'expression suivante :

$$\textbf{Eq. 4-5} \qquad \boldsymbol{F_{(d_{i+1})} - F_{(d_i)} = \frac{1}{2}\left(\mathrm{erf}\left(\frac{\log(d_{i+1})-\mu}{\sigma\sqrt{2}}\right) - \mathrm{erf}\left(\frac{\log(d_i)-\mu}{\sigma\sqrt{2}}\right)\right)}$$

Où la fonction $\mathrm{erf}()$ est la fonction erreur et $\log()$ est le logarithme naturelle. Cette méthode assure que le diamètre de Sauter de chaque classe correspond exactement à la valeur du SMD_i entre les bornes d_i et d_{i+1}, calculé à partir d'une loi log-normale définie par l'utilisateur lors de la phase d'initialisation. Il est évident que cette méthode est valable uniquement si la distribution de taille de gouttes reste fixe pendant tout le calcul.

- Diamètre de Sauter calculé indépendamment d'une quelconque distribution

Nous proposons une deuxième méthode indépendante d'une distribution prédéfinie par l'utilisateur. Dans cette méthode nous supposons plus simplement que la distribution discrétisée est en forme de créneau (dit autrement, la probabilité de présence est constante par morceaux et identique pour tous les diamètres entre les deux bornes de la classe), dont le diamètre caractéristique est le diamètre de Sauter de chaque créneau (voir Figure 4-4) :

$$\textbf{eq. 4-6} \qquad \boldsymbol{SMD_i = \frac{\int_{d_i}^{d_{i+1}} f_v(D)\, dD}{\int_{d_i}^{d_{i+1}} f_v(D)\frac{1}{D} dD}}$$

Pour trouver la valeur du SMD_i correspondant à la classe i, tout d'abord, nous définissons une fonction de densité de probabilité $f_{v_{(d_i,d_{i+1})}}$ qui est constante entre les bornes inférieur d_i et supérieur d_{i+1} de la classe i. La fraction massique de gouttes sera :

$$\alpha_i = f_{v_{(d_i,d_{i+1})}} * (d_{i+1} - d_i)$$

La surface de gouttes de chaque classe[22] peut être calculée selon l'équation suivante :

$$Aire_i = \int_{d_i}^{d_{i+1}} 6 * \frac{f_{v(d_i)}}{D} dD = 6 * f_{v(d_i)} \ln\left(\frac{d_{i+1}}{d_i}\right)$$

Finalement, le diamètre de sauter de la classe i est calculé comme suit :

$$\textbf{Eq. 4-7} \qquad \boldsymbol{SMD_i = \frac{6\alpha_i}{Aire_i} = 6 * \frac{f_{v(d_i)}(d_{i+1}-d_i)}{6*f_{v(d_i)}\ln\left(\frac{d_{i+1}}{d_i}\right)} = \frac{(d_{i+1}-d_i)}{\ln\left(\frac{d_{i+1}}{d_i}\right)}}$$

Nous constatons donc, que le diamètre de Sauter de la classe i est indépendant de la fraction massique de la classe correspondante et par conséquent, indépendante de la distribution de taille des gouttes. La distribution de taille interviendra seulement pour le calcul du diamètre de Sauter global.

---

[22] La surface de gouttes calculée ici est divisée par le volume total de gouttes. Pour avoir la surface réelle de gouttes il faut donc connaitre leur volume total. De même pour la surface totale.

4.2 MODELISATION DE LA FRAGMENTATION DES JETS DE CORIUM DANS LE LOGICIEL MC3D

Nous rappelons ici notre approche multi-échelle pour la fragmentation des jets de corium. Nous recherchons ici un double objectif :

- Proposer une approche plus précise pour la détermination des diamètres caractéristiques, moins dépendante de l'utilisateur et surtout plus conforme à l'analyse de la fragmentation précédemment faite. A savoir que la fragmentation du jet en gouttes est d'abord pilotée par les grandes échelles alors que la dimension des gouttes est finalement pilotée par des échelles plus locales ;
- Initier une approche où la distribution en taille n'est pas présupposée mais directement évaluée.

Le principe proposé est décrit schématiquement dans la Figure 4-6 : le jet est déstabilisé de manière primaire par de grandes déformations (hélicoïdales ou axisymétriques) qui peuvent être assimilées à de grandes gouttes (fragmentation primaire). Ces grandes gouttes sont ensuite sujettes à une fragmentation secondaire, pilotée par des effets locaux de petite échelle.

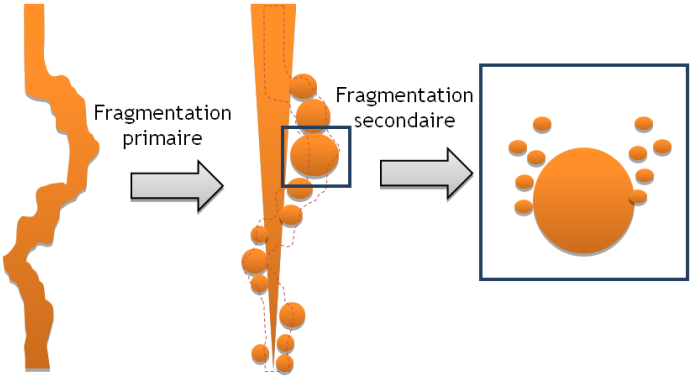


Figure 4-6 : Schéma de principe du traitement de la fragmentation du jet (approche adopté en MC3D), découplant fragmentation primaire de grande échelle et fragmentation secondaire locale.

L'avantage de la méthode proposée réside dans le découplage qui permet d'adopter deux modélisations distinctes. La modélisation secondaire est supposée pilotée par les effets locaux et ne fait pas appel à une notion de filtrage de grande échelle, tel que celui développé pour la modélisation de la fragmentation primaire. Les deux modèles sous maille de fragmentation (primaire et secondaire) doivent décrire trois principales caractéristiques du processus :

- Taux de fragmentation
- Taille de particules générées
- Caractéristiques dynamiques des particules éjectées (vitesse d'éjection)

4.2.1 FRAGMENTATION SECONDAIRE

Rappelons que MUDROPS est la sous-application de PREMEL utilisant le modèle MUSIG homogène déjà discuté précédemment. Nous faisons l'hypothèse que dans une classe i toutes les gouttes ont la même dimension égale au diamètre représentatif de la classe (SMD_i). Ainsi, le changement de diamètre d'une goutte par la fragmentation secondaire se traduit par le déplacement d'une fraction des gouttes d'une classe vers une autre plus petite (représentant le diamètre de gouttes fragmentées). Le principe général du modèle est alors décrit dans la Figure 4-7. Partant d'une goutte mère de grande taille, celle-ci va se fragmenter en produisant des gouttes d'une plus petite taille. La goutte mère perd également de la masse.

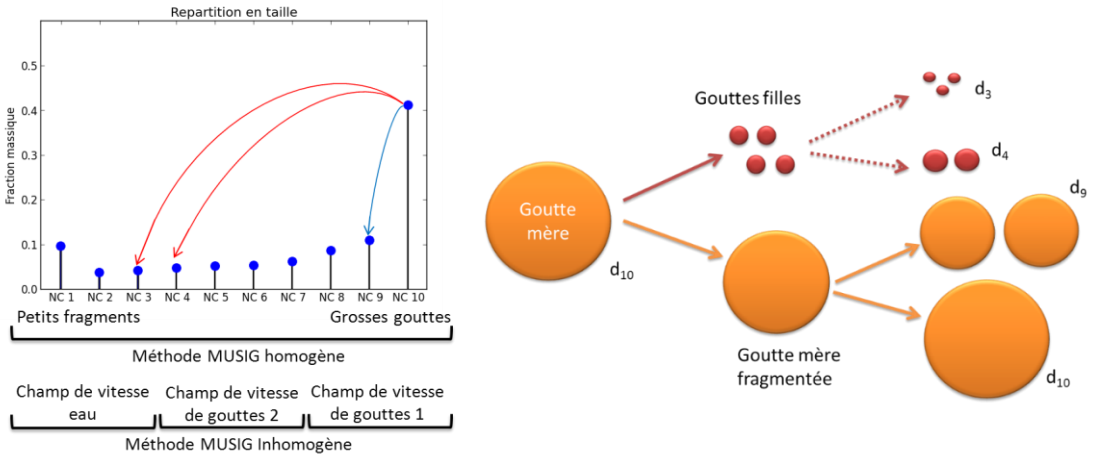


Figure 4-7 : Modèle de fragmentation secondaire dans MUDROPS

Lors de notre étude bibliographique présentée en section 2.3.5, nous avons comparé différents modèles utilisés pour déterminer le diamètre final des gouttes filles. Nous avons conclu qu'il n'y a pas de modèle capable de décrire la fragmentation de gouttes dans un environnement liquide et gazeux sans ajuster les paramètres en fonction du système (L/L ou L/G). La plupart des modèles préconisent que la taille finale des gouttes est déterminée par le nombre de Weber hydrodynamique de la goutte mère (avant fragmentation secondaire) via une formulation plus ou moins complexe. Cependant, les résultats expérimentaux montrent un comportement différent entre les cas liquide-gaz et liquide-liquide à même nombre de Weber. Dans le chapitre 6 nous essaierons d'expliquer cette différence en s'appuyant sur des simulations numériques de fragmentation de gouttes à différents nombres de Weber dans une configuration liquide/liquide.

Malgré la méconnaissance sur les phénomènes physiques qui donnent lieu à des écarts entre les cas liquide-liquide et liquide-gaz, nous notons des points en commun entre ces deux configurations qui permettent d'envisager des modèles quasi-indépendants de la configuration étudiée. Comme c'est décrit dans (Pilch and Erdman, 1987) et dans (Gelfand, 1996), les caractéristiques temporelles de la fragmentation peuvent être mises en forme adimensionnel en considérant le temps caractéristique de Ranger et Nicholls (Ranger and Nicholls, 1972). La phase de déformation de la goutte se développe jusqu'à deux temps caractéristiques de fragmentation. Le temps total de fragmentation est pour la plupart des cas compris entre quatre et six fois le temps caractéristique de Ranger et Nicholls et même peut être considéré comme indépendant du régime de fragmentation. Nous utilisons ces caractéristiques pour définir et valider notre modèle de fragmentation. La structure eulérienne du code MC3D, ne permet pas de faire un suivi lagrangien du processus de fragmentation de chaque goutte et ne permet pas, en l'état, de prendre en compte un processus de déformation préalable à la fragmentation. Nous conservons donc le principe d'un taux de fragmentation de gouttes simplement basé sur la notion du temps caractéristique, où la fragmentation commence dès que la goutte a un nombre de Weber supérieur au nombre de Weber critique. Le taux de fragmentation de gouttes de la classe i ayant une différence de vitesse avec le fluide environnante ΔV_{dc}, procède donc d'une linéarisation du processus de fragmentation et s'écrit :

Eq. 4-8
$$\Gamma_{frag,drop\rightarrow drop} = \frac{1}{t_{frag}} \frac{\alpha_{d,i}\Delta V_{dc}}{D_{d,i}} \sqrt{\rho_d \rho_c} = \alpha_{d,i}\rho_d \frac{\tau_{d,i}}{t_{frag}}$$

Avec $\alpha_{d,i}$, la fraction volumique de la goutte mère appartenant à la classe i. Ce taux de fragmentation représente la quantité de masse par unité de temps qui est arraché de la goutte mère et qui sera transféré vers la classe de gouttes filles. La classe de goutte filles est déterminée selon le diamètre déterminé par une des lois décrites dans la section 2.3. A partir de l'analyse présenté, un nombre de Weber caractéristique constant, la solution la plus simple, semble suffisant. Le modèle de Hsiang a également été implémenté, mais, comme nous pouvions l'anticiper, celui-ci ne donne pas de résultats satisfaisants. Nous verrons cependant que l'hypothèse de Weber caractéristique constant n'est pas entièrement satisfaisante non plus. Le diamètre de gouttes filles est calculé selon l'expression suivante :

Eq. 4-9
$$d_{fille} = \frac{We_{ch}\sigma}{\Delta V_{dc}^2}$$

Dans cette modèle, nous considérons que les gouttes filles, une fois générées seront stables suivant les conditions hydrodynamiques locales et instantanées. Par conséquent, le nombre de Weber caractéristique We_{ch} des gouttes filles sera inférieur ou égale au nombre de Weber critique We_{cr}. Nous avons introduit dans notre modélisation un nombre de Weber caractéristique qui est indépendant des

régimes de fragmentation hydrodynamiques. La valeur de We_{ch} est un paramètre d'ajustement du modèle. Ce paramètre devrait être, en tout théorie, indépendant du fluide environnant. Nous attendons une valeur de quelques unités. L'analyse présentée dans cette thèse montre que c'est effectivement le cas pour la configuration liquide/gaz puisque nous recommandons $We_{ch} = 3$. Cependant, pour le cas liquide/liquide la comparaison du modèle aux données expérimentales disponibles oblige à augmenter considérablement la valeur du Weber caractéristique pour proposer $We_{ch} = 30$. Ce constat a mené à engager une étude spécifique via la simulation numérique, afin de mieux comprendre le processus de fragmentation dans une configuration liquide/liquide. Ce travail est explicité dans le chapitre 6. La différence est probablement à cause d'un entrainement et d'une déformation différente en fonction de la configuration. En l'état des analyses, nous proposons dans notre modélisation un Weber caractéristique fonction de l'environnement de la goutte.

La perte de masse de la goutte mère est calculé en fonction du taux de fragmentation $\boldsymbol{\Gamma_{frag,drop\rightarrow drop}}$ et en considérant un nombre de gouttes constant pendant toute la durée d'un pas de temps. En considérant un simple bilan de masse dans la maille de calcul nous pouvons déterminer le diamètre de gouttes mères à la fin du pas de temps :

$$\textbf{eq. 4-10} \qquad \boldsymbol{m_f = m_0 - \Gamma_{frag,drop\rightarrow drop}\Delta t}$$

L'expression $\boldsymbol{\Gamma_{frag,drop\rightarrow drop}}\Delta t$ correspond à la masse totale arrachée de la goutte mère pendant l'intervalle de temps Δt. En considérant que le nombre de gouttes mères au début du pas de temps est donné par ($N_0 = \frac{6m_0}{\rho_d \pi D_0^3}$) et que à la fin du pas de temps, ce nombre est conservé ($N_f = N_0 = \frac{6m_f}{\rho_d \pi D_f^3}$), nous pouvons exprimer le diamètre final de la goutte mère comme étant :

$$\textbf{Eq. 4-11} \qquad \boldsymbol{D_f = D_0\left(1 - \frac{\Gamma_{frag,drop\rightarrow drop}\Delta t}{\rho_d \alpha_d}\right)^{\frac{1}{3}}}$$

Cette modélisation correspond à la fragmentation de gouttes selon un régime d'arrachement où les gouttes filles sont constamment arrachées de la goutte mère, laquelle diminue progressivement sa masse, tel qui est schématisé en Figure 4-8.

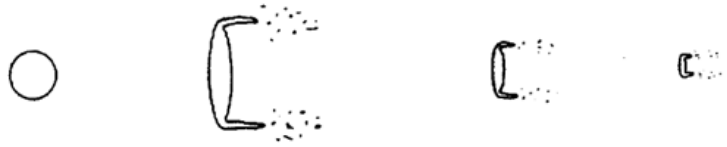


Figure 4-8 : Perte progressive de masse de la goutte mère à cause de l'arrachement de la couche limite. Régime de fragmentation par arrachement

Du coté numérique, la masse de gouttes filles et de gouttes mères doit être correctement distribué dans les classes existantes afin de conserver la masse et la surface (diamètre) calculée par les expressions précédentes. La masse des gouttes filles et la masse résiduelle des gouttes mères créées est distribuée dans les classes correspondantes suivant le schéma présenté dans la Figure 4-7.

Nous rappelons que dans la modélisation MUDROPS, les classes de gouttes ont un diamètre fixe représentatif égale à SMD_i. La masse de fragments est distribué dans les deux classes contigües au diamètre d_{fille} calculé précédemment, ayant pour diamètres SMD_i et SMD_{i+1} (NC3 et NC4 respectivement sur la Figure 4-7, représentée par les lignes rouges) de manière que $SMD_i < d_{filles} < SMD_{i+1}$. La repartition de masse doit veiller à que l'aire interfaciale de gouttes ainsi que la masse de gouttes fragmentées soit conservée et soit égale à celle calculée par le taux de fragmentation et par d_{fille}. Nous distribuons donc la masse de goutte filles générés déterminé par $\boldsymbol{\Gamma_{frag,drop\rightarrow drop}}$ selon les deux expressions suivantes :

$$\Gamma_{D_d\rightarrow SMD_i} = \boldsymbol{\Gamma_{frag,drop\rightarrow drop}}\frac{(SMD_i SMD_{i+1} - SMD_i d_{fille})}{d_{fille}(SMD_{i+1} - SMD_i)} \quad \text{et} \quad \Gamma_{D_d\rightarrow SMD_{i+1}} = \boldsymbol{\Gamma_{frag,drop\rightarrow drop}} - \Gamma_{D_d\rightarrow SMD_i}$$

Où $\Gamma_{D_d\rightarrow SMD_i}$ et $\Gamma_{D_d\rightarrow SMD_{i+1}}$ correspondent à la fraction de masse de gouttes distribuées vers la classe ayant pour diamètre SMD_i et SMD_{i+1}, respectivement. De même, la goutte mère diminuant de diamètre, ceci est simplement pris en compte en déplaçant une fraction de ces gouttes dans la classe de diamètre inférieur, de manière à ce que la moyenne produise le diamètre moyen désiré (ligne bleu sur la Figure 4-7).

Ce modèle a tout d'abord été introduit dans le modèle MUDROPS initialement développé, où toutes les classes sont rassemblées dans le même champ de vitesse (modèle homogène). Cependant, les analyses ont conduit à considérer qu'une telle approche n'est pas satisfaisante. En effet, au fur et à mesure de la fragmentation, des gouttes de petite taille sont générées et augmentent considérablement l'aire

interfaciale et donc les frottements. La loi de frottement utilisé dans MC3D prenne en compte les régimes visqueux, inertielle et déformé. L'expression du C_d est la suivante :

$$\textbf{eq. 4-12} \qquad C_d = \max\left(\min\left(0.5, \frac{2D_0}{3}\sqrt{\frac{g(\rho_d-\rho_c)}{\sigma}}\right), \frac{24}{Re_0}(1+0.1Re_0^{0.75})\right)$$

4.2.1.1 Passage à une modélisation inhomogène en vitesse

La validation effectuée nous a montré que l'implémentation du modèle de fragmentation dans la méthode homogène initialement implémentée (toutes les gouttes sont décrites avec un seul champ de vitesse) n'est pas satisfaisante à cause du fort entrainement de l'ensemble des gouttes (également de la goutte mère), surtout pour les systèmes L/L. En effet, pendant les premières étapes de la fragmentation, les fragments générés incrémentent rapidement la surface totale des gouttes. Or, les frottements prennent en compte l'aire totale des gouttes qui augmente très vite dès que des petites gouttes sont créées. Ainsi, les grosses gouttes (gouttes mères) sont artificiellement entraînées de la même manière que les petits fragments générés. Par conséquent, le processus de fragmentation, dépendante de la différence de vitesse entre les gouttes et le fluide environnant s'arrête prématurément.

La méthode MUSIG a donc été modifiée pour prendre en compte le mouvement relatif entre les grosses gouttes et les petits fragments (MUDROPS inhomogène). Afin de limiter cependant le temps de calcul, nous avons choisi d'une part de n'ajouter qu'un seul champ de vitesse et d'autre part de placer les gouttes les plus petites en équilibre dynamique avec l'eau. Le couplage dynamique avec l'eau se fait de manière très naturelle dans le logiciel MC3D[23]. Au final, les gouttes sont réparties dans trois champs de vitesse, en fonction de leur taille (voir Figure 4-7).

4.2.1.2 Résultats préliminaires

La modélisation de la fragmentation secondaire est validée avec un test de fragmentation de gouttes par onde de choc. Nous avons testé les configurations liquide/gaz et liquide/liquide. Le domaine de calcul est montré en Figure 4-9. Nous plaçons dans ce domaine une goutte de BIS (2,7 mm) ou de gallium (4 mm) soumise à un écoulement d'air ou d'eau, respectivement, de vitesse variable. Nous initialisons les gouttes dans une seule maille du domaine ayant une dimension caractéristique plus grande que le diamètre de gouttes.

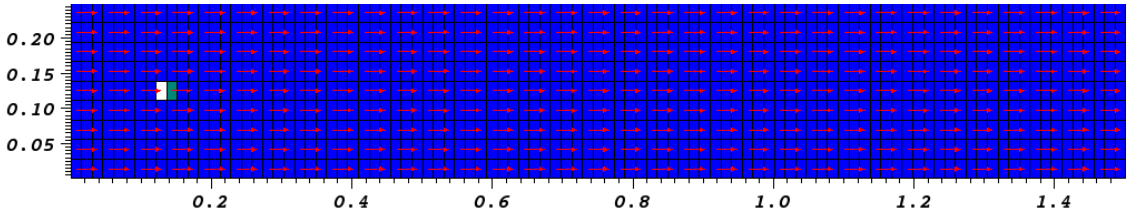


Figure 4-9 : Domaine de calcul utilisé pour la validation du modèle de fragmentation de gouttes dans le cas de la fragmentation par onde de choc. La maille en blanc représente la présence de gouttes.

Les conditions aux limites sont :

- Gauche : Vitesse entrante
- Droite : Pression constante
- Haut : Paroi
- Bas : Paroi

Par la suite, nous allons présenter parallèlement les calculs effectués avec la méthode MUDROPS homogène et MUDROPS inhomogène de manière à évaluer l'impact du découplage en vitesse par la deuxième méthode. Nous considérons dans le cas de base un découpage en dix classes réparties selon une progression logarithmique. Dans le cas inhomogène, le champ de vitesse n°1 comprend les 2 classes avec les plus gros diamètres, le champ n°2 comprend les 5 suivantes, tandis que les 3 classes avec les plus petits diamètres sont en équilibre avec l'eau. Dans le cas présent, 2 champs de vitesse seraient cependant suffisants puisque les petites gouttes générées sont supposées être stables.

La Figure 4-10 montre l'impact du découplage en vitesse dans le cas L/G et L/L. Nous remarquons que la présence de gouttes initiales à la fin du calcul pour le cas homogène est synonyme d'un arrêt

[23] Nous notons que cela peut être réalisé facilement car la température des gouttes est évaluée de manière explicite. Une méthode implicite classique aurait nécessité beaucoup plus de travail.

prématuré de la fragmentation secondaire à cause de l'entrainement trop important par la phase continue (attention, sur les figures, les grands diamètres sont sur la gauche de l'abscisse). En effet, la génération de petits fragments à cause du gradient de vitesse (onde de choc) incrémente la surface de gouttes et par conséquent, dans le cas homogène, augmentent la trainée de toutes les gouttes, incluant les plus grosses gouttes. L'effet est particulièrement fort en L/L. Nous constatons également qu'en inhomogène, l'entrainement de la goutte mère est faible, ce qui induit une faible variation des diamètres des fragments créés et donc un spectre final de diamètre plus étroit sur les petites gouttes. Bien sûr, un choix plus judicieux des caractéristiques des classes de gouttes améliorerait le résultat. Cependant, tous les calculs sont réalisés avec une classification typique pour les études en ICR.

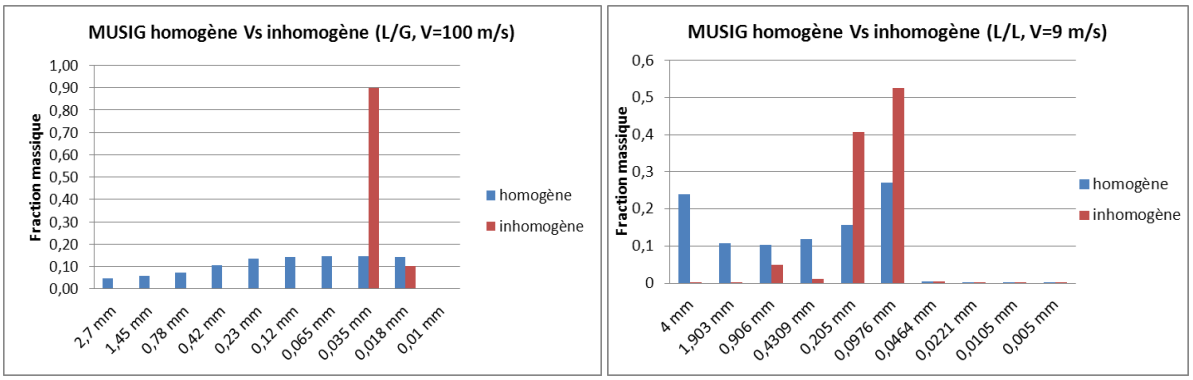


Figure 4-10 : Impact du découplage en vitesse de la méthode inhomogène sur les spectres dans deux calculs typiques ($We_{ch} = 12$ pour L/G ainsi que pour L/L. Calcul avec 10 classes réparties, pour le cas inhomogène en 2, 5 et 3 classes pour respectivement le premier champ, deuxième champs et en équilibre dynamique avec l'eau).

Sur la Figure 4-10, nous constatons un impact plus important du découplage dans les systèmes L/L. en effet, dans ce système, le faible rapport de masses volumiques $\left(\frac{\rho_d}{\rho_c} \approx 6\right)$ fait que les gouttes sont plus facilement entrainées par l'écoulement externe ; l'entrainement plus important dans les systèmes à faible rapport de densité peut-être à l'origine de la disparition du régime de fragmentation en sac 'bag breakup'. Nous pouvons évaluer facilement la surface des gouttes (par rapport au volume total de gouttes) dans ces systèmes L/L à l'aide des équations présentées (Eq. 4-3) et des distributions en taille obtenues d'après les calculs MC3D (Figure 4-11). La différence entre la surface totale de gouttes provient de la présence de gouttes plus grosses dans le cas homogène par rapport au cas inhomogène (Figure 4-10).

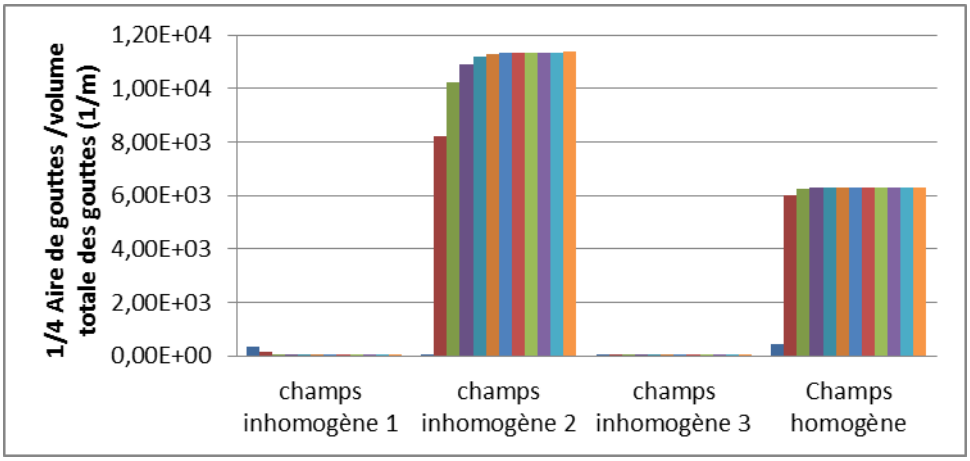


Figure 4-11: Aire de gouttes/volume totale de gouttes pour chaque champs de vitesse employé dans la modélisation MUDROPS inhomogène (3 champs de vitesse) et homogène (1 champ de vitesse). Le champ inhomogène 1 correspond aux grosses gouttes et le champ numéro 3 correspond aux plus petites gouttes.

Ce qu'il faut retenir de la Figure 4-11 est la comparaison entre l'aire transversale de gouttes du premier champ inhomogène (dans lequel est placée la goutte mère) avec l'aire du champ homogène. Nous remarquons donc, un écart très important entre la surface effective pour la trainée de grosses gouttes dans le cas inhomogène par rapport à celle du cas homogène (première et dernière colonne). Ainsi, l'entrainement de gouttes dans le cas homogène aura été calculé avec environ 100 fois plus d'aire interfaciale par rapport à celle calculée pour les gouttes du champ 1 inhomogène. Cette différence d'aire

interfaciale augmente proportionnellement l'entrainement et est à l'origine de l'arrêt prématuré de la fragmentation secondaire.

Le découplage a bien sûr un impact sur le diamètre moyen de Sauter, utilisé pour la comparaison avec des données expérimentales. Il est important de souligner que ce SMD_{global} fait intervenir la totalité des classes utilisées par le calcul, ce qui dans le cas homogène, inclut les grosses gouttes qui n'ont pas pu se fragmenter. La comparaison des diamètres de Sauter seuls peut être donc assez trompeuse puisqu'elle masque, par définition les différences de distribution. En effet, la Figure 4-12 montre la comparaison avec les expériences pour le système L/L concernant les diamètres de Sauter en fin de fragmentation (même calculs que la Figure 4-10). Le modèle homogène semble meilleur en moyenne, mais le spectre issu de la fragmentation n'est clairement pas satisfaisant puisque la moitié de la goutte n'est pas fragmentée pour des raisons déjà évoquées. En fait, la forme générale de la dépendance au nombre de Weber est meilleure avec le modèle inhomogène et un simple correctif du nombre de Weber caractéristique est alors envisageable.

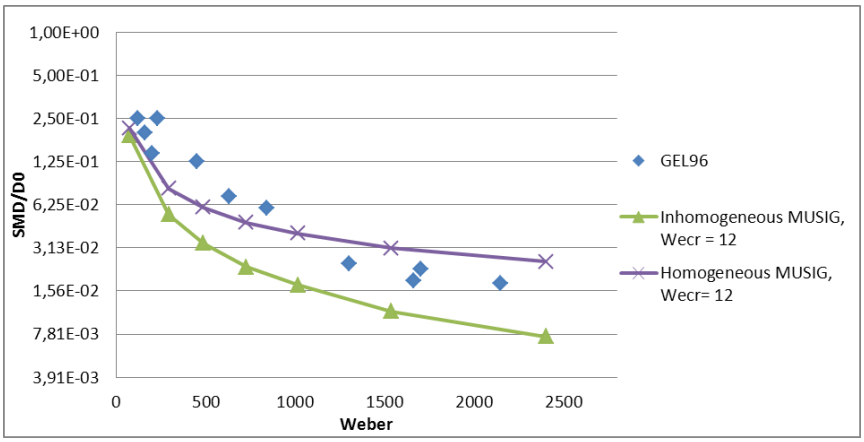


Figure 4-12 : Comparaison de deux calculs en système L/L en modèle homogène et inhomogène.

Nous trouvons que l'hypothèse d'un nombre de Weber caractéristique constant indépendamment du système, fourni les bonnes tendances, mais ne permet pas d'évaluer précisément la taille finale des fragments (Figure 4-12 et Figure 4-13). Nous rappelons que le nombre caractéristique ne doit pas être confondu avec le nombre de Weber critique qui fixe une valeur maximale de stabilité. Le processus de fragmentation produit en général des gouttes de différentes tailles. Dès lors, le Weber moyen des gouttes générées devrait être inférieur au Weber critique. Nous trouvons effectivement que pour le système L/G une valeur de We_{ch} de quelques unités donne de bons résultats.

Pour les systèmes L/L cependant, nous constatons qu'il faut augmenter le nombre de Weber caractéristique. Pour expliquer cette différence de comportement, nous pouvons supposer que la goutte fille, qui est issue d'un processus complexe incluant un entrainement du fluide avant la fragmentation, peut avoir un Weber supérieur au Weber critique du fait que celui-ci est évalué en fonction de l'écart de vitesse entre la goutte mère et le milieu externe au début de l'interaction. Cet effet est bien sûr nettement moins marqué en système L/G. Ces arguments permettent donc de penser que le Weber caractéristique peut-être différent en système L/G et en système L/L, où l'entrainement est important. Pour le système L/L, une valeur de $We_{ch} = 30$ semble être un bon compromis. Nous développerons une justification de cette variation du Weber caractéristique à partir de résultats de simulations numériques de gouttes de métal liquide dans l'eau, présentées au chapitre 6.

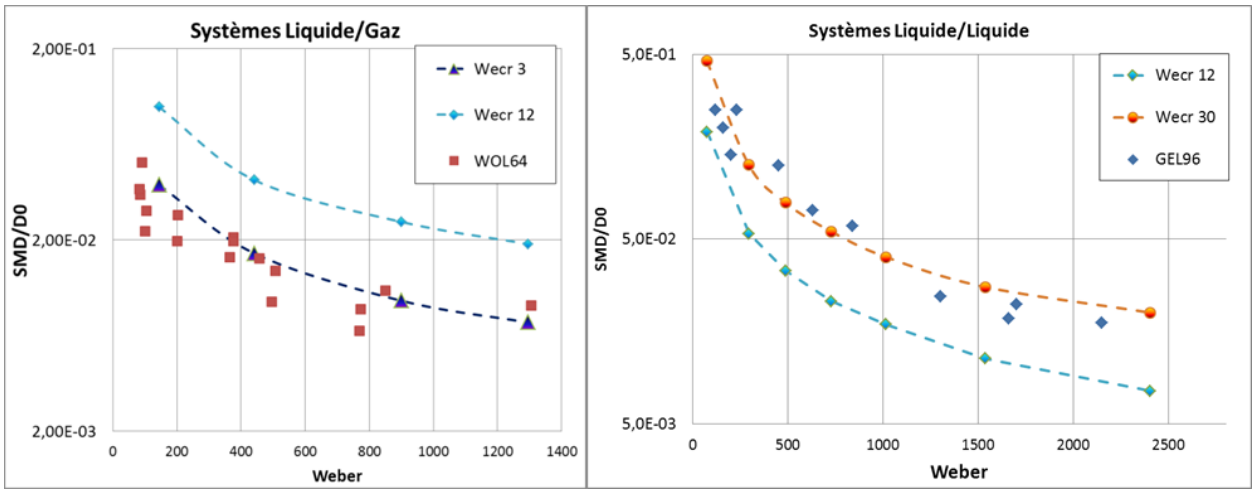


Figure 4-13 : Impact du nombre Weber caractéristique sur le diamètre final adimensionnel (SMD/d_0) à différents nombres de Weber aérodynamique pour le système liquide-gaz (gauche) et le système liquide-liquide (droite). Modèle MUSIG inhomogène avec $N_c = 2 - 5 - 3$

Ce modèle a été validé avec les résultats expérimentaux présentés précédemment. Les résultats sont très satisfaisants dans le cas du modèle inhomogène avec trois différents champs de vitesse pour les gouttes.

4.2.2 FRAGMENTATION PRIMAIRE

La modélisation de la fragmentation primaire dans l'application MUDROPS consiste dans le passage d'une quantité de masse contenue dans le phase continue (jet) vers une phase dispersée (gouttes). Comme nous l'avons décrit précédemment, l'application MUDROPS comporte un certain nombre de classes de gouttes, chacune défini par sa fraction massique et son diamètre représentatif SMD_i. Le modèle de fragmentation primaire doit fournir des informations concernant la quantité de masse transférée à chacune de classes ainsi que le transfert d'énergie et de quantité de mouvement. Le schéma de la fragmentation primaire est présenté dans la Figure 4-14.

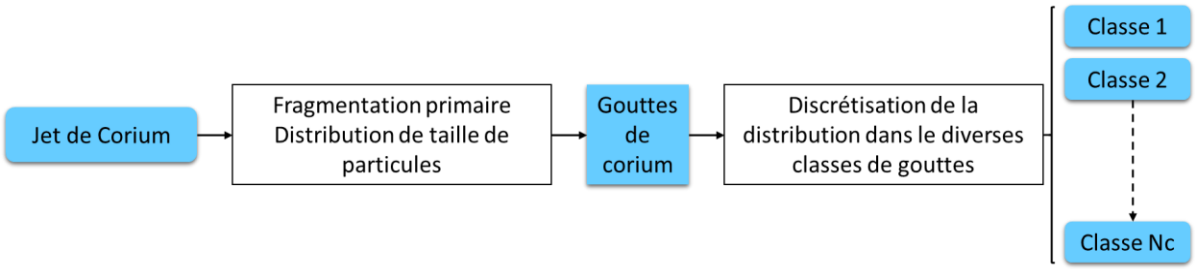


Figure 4-14 : Schéma du modèle sous-maille de fragmentation primaire dans MC3D

Le modèle doit tout d'abord relier les mécanismes d'instabilité et de fragmentation avec les caractéristiques de gouttes générées. Une fois ces gouttes sont créés, il faut prendre en compte la discrétisation numérique utilisé dans la méthode MUSIG, afin de limites les erreurs de discrétisation lors de l'attribution de masse dans chacune de classes. Le terme source de fragmentation primaire peut s'écrire :

$$\Gamma_{jet \to ND_i} = \rho_j A_j F_{n_i} \Gamma_{frag^+, jet \to drop}$$

La fragmentation donne lieu à un transfert de masse entre le jet et les diverses classes de gouttes, chacune ayant pour fraction F_{n_i} (avec $\sum_{i=1}^{NCDROPS} F_{n_i} = 1$). Les valeurs de F_{n_i} seront données par le type de distribution de taille de particules choisi (dans notre cas, une distribution log-normale). A_j correspond à la surface du jet dans la maille. Nous rappelons que dans ce modèle, nous allons considérer le modèle d'instabilité de Kelvin-Helmholtz classique (sans effets de viscosité).

4.2.2.1 Extension du modèle KHF

Il est fait l'hypothèse d'un unique processus d'instabilité et de fragmentation primaire permettant de relier la longueur d'onde avec le diamètre des gouttes et le taux de fragmentation avec la vitesse de croissance de l'onde. Comme son nom l'indique, le modèle fait l'hypothèse d'un processus qui peut être

représenté par le modèle d'instabilité de Kelvin-Helmholtz. Nous rappelons que le modèle fait l'hypothèse que la vitesse est uniforme de part et d'autre de l'interface, avec un saut à l'interface. Dans le code MC3D, la vitesse n'est bien sûr pas uniforme d'une maille à l'autre. Nous sommes donc confrontés à une difficulté qui est relative au choix de la vitesse représentative. Jusqu'assez récemment, le modèle considérait le saut de vitesse dans chaque maille. Cependant, ce choix est très dépendant du maillage et n'était pas satisfaisant. Il a alors été introduit récemment une modification visant à évaluer la vitesse caractéristique via un filtrage (une moyenne) sur une dimension caractéristique du problème (Figure 4-15). Une propriété V moyenne est alors définie par :

$$V_{(x)} = \frac{\int \phi(x-y)*\alpha(y)*V\,dy}{\int \phi(x-y)*\alpha(y)\,dy} \qquad \text{avec} \qquad \phi_{(x-y)} = \begin{cases} 1 & if\ \|x-y\| < R \\ 0 & ailleurs \end{cases}$$

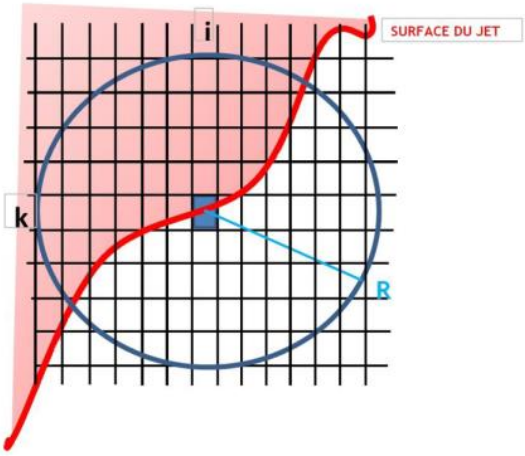


Figure 4-15 : Principe de filtrage pour l'évaluation des propriétés du milieux environnant dans le code MC3D. Il est défini un rayon caractéristique de la couche de mélange définissant un domaine sur lequel les propriétés sont moyennées.

La difficulté est alors de choisir l'étendue du filtrage. Actuellement, ce choix est laissé à l'utilisateur et il est recommandé d'utiliser le diamètre du jet (connu en général par l'utilisateur) comme dimension caractéristique de l'échelle intégrale de la couche de mélange se développant le long du jet. Une autre difficulté de taille est, dans le cas de milieux environnant diphasique, de définir un milieu environnant « caractéristique » pour le modèle KH. Il a été fait le choix dans MC3D de moyenner non pas chaque grandeur individuellement en fonction de son taux de présence, mais de moyenner l'énergie cinétique ρV^2, pour obtenir :

$$\rho_c = \frac{\overline{\alpha_g \rho_g} + \overline{\alpha_l \rho_l}}{\overline{\alpha_g} + \overline{\alpha_l}}$$

$$V_c = \sqrt{\frac{\overline{\alpha_g \rho_g}\left(\Delta \overline{V_g}\right)^2 + \overline{\alpha_l \rho_l}(\Delta \overline{V_l})^2}{\overline{\alpha_g \rho_g} + \overline{\alpha_l \rho_l}}} + \overline{V_j}$$

avec $\Delta \overline{V_g} = \overline{V_g} - \overline{V_j}$ et $\Delta \overline{V_l} = \overline{V_l} - \overline{V_j}$

Avec V_j = vitesse du jet, V_g = vitesse du réfrigérant en phase gazeuse et V_l = vitesse du réfrigérant en phase liquide (pour les autres propriétés, sous indices j= jet, g= réfrigérant en phase gazeuse et l= réfrigérant en phase liquide). Cette approche se justifie assez bien qualitativement, en considérant le modèle KH puisque le terme moteur de l'instabilité est bien ρV^2, traduisant une instabilité liée à la différence de pression à cause de la différence de vitesse. Une moyenne traditionnelle en fonction du taux de présence aboutirait à considérer en général des densités moyennes très élevées (la densité du gaz étant négligeable) et des vitesses également très élevées puisque le gaz va souvent beaucoup plus vite que le liquide.

Le modèle utilise ainsi 4 paramètres (ces paramètres seront justifiés dans les paragraphes 4.2.2.2 et 4.2.2.3):

- le facteur de proportionnalité entre diamètre des gouttes et longueur d'onde, noté N_d (CDIACRE dans le code) ; il est recommandé de prendre N_d de l'ordre de 5 ;

$$D_d = N_d\,\lambda$$

- le facteur de proportionnalité entre taux de fragmentation et vitesse d'instabilité, noté N_f (FRAGNUM dans le code) ; il est recommandé de prendre N_f de l'ordre de 0,15 ;

$$\Gamma_{frag} = N_f\, c_i$$

- le facteur de proportionnalité entre taux de fragmentation et vitesse d'éjection, C_v (CVIT dans le code) ; Nous rappellons que le taux de fragmentation est en fait une vitesse surfacique d'éjection, il semble donc logique de relier les deux vitesses ; il est recommandé de prendre C_v entre 5 et 10 ;

$$V_e = C_v\, \Gamma_{frag}$$

- le rayon de filtrage, qui est pris dans les calculs de validation (et dans les études) comme étant le diamètre du jet.

4.2.2.2 Justification du paramètre de fragmentation.

Rappelons (Epstein and Fauske, 2001) que la dispersion des jets turbulents peut en général être caractérisée par :

$$V_e = E_0 \beta \Delta V_{cj}, \qquad \beta = \sqrt{\frac{\rho_c}{\rho_j}}$$

Où E_0 est un paramètre dit d'entrainement. En situation monophasique, $E_0 \Delta V_{cj}^2$ est représentatif de l'énergie cinétique turbulente et il est couramment considéré qu'en première approximation, celle-ci est de l'ordre d'un dixième de l'énergie cinétique totale, soit $E_0 \approx 0.1$. Le terme β introduit l'impact des densités différentes entre jet et milieux environnant. Reprenant maintenant la modélisation KHF, rappelons que le taux de fragmentation est supposé proportionnel à la vitesse caractéristique de l'instabilité, qui s'écrit, si $\rho_c \ll \rho_j$:

$$C_i = \sqrt{\left(\beta \Delta \mathrm{V_{cj}}\right)^2 - \frac{k}{\rho_j}\sigma}$$

Nous vérifierons que, au maximum du taux de croissance ($\sigma = k\, c_i$), le premier terme sous la racine est en ordre de grandeur égal au second et donc nous pouvons faire l'approximation :

$$C_i \approx \sqrt{\left(\beta \Delta V_{cj}\right)^2} = \beta \Delta V_{cj}$$

Il y a donc une cohérence entre les caractéristiques des jets turbulents classique et le modèle KHF en identifiant taux de fragmentation (volumique) et vitesse d'entrainement et donc entre notre paramètre N_f et le paramètre E_0. Nous attendons ainsi à avoir $N_f \approx E_0 \approx 0.1$

4.2.2.3 Paramètre de taille de gouttes

Le choix d'une valeur de paramètre de taille de gouttes (rapport théorique entre diamètre des gouttes et longueur d'onde) de 5 peut paraître surprenant et même non conforme. Cependant, une justification peut être proposée. En regardant la forme caractéristique du taux de croissance, nous voyons que le maximum est proche en fait du diamètre de coupure ($C_i = 0$) et donc, selon une analyse en ordre de grandeur, nous avons :

$$\left(\beta \Delta V_{cj}\right)^2 \approx \frac{k}{\rho_j}\sigma$$

En réarrangeant cette expression, nous obtenons

$$\frac{\rho_c\left(\Delta V_{cj}{}^2\right)}{k\sigma} \approx 1$$

soit,

$$\frac{\rho_c\left(\Delta V_{cj}{}^2\right)\lambda}{\sigma} = \frac{1}{N_d}\frac{\rho_c\left(\Delta V_{cj}{}^2\right)D_d}{\sigma} = 2\pi$$

Nous reconnaissons dans l'équation ci-dessus le nombre de Weber, soit :

$$N_d = \frac{We}{2\pi}$$

Ce dernier fournit un critère de stabilité couramment accepté, avec une valeur de 12, ce qui nous donnerait une valeur $N_d = 2$. Cependant, en configuration liquide/gaz, il est également connu que le processus de fragmentation amène en général à la création de fragments dont le Weber est largement en dessous du Weber de stabilité (ceci est particulièrement vrai pour le processus de « bag breakup » pour la fragmentation des gouttes, voir par exemple (Pilch and Erdman, 1987)) et des valeurs de l'ordre de 3 sont couramment utilisées pour ce Weber « caractéristique », ce qui nous donne une valeur $N_d = 0.5$. Néanmoins, ainsi que nous le verrons, en configuration liquide/liquide, il semble qu'un nombre de Weber caractéristique de l'ordre de 30 soit à préconiser. Dans cette situation, nous obtenons $N_d = 5$ Nous attendons donc une valeur N_d de quelques unités.

4.2.2.4 Discussion sur le modèle de Kelvin-Helmholtz

Nous noterons que cette approche contredit la vision courante d'un diamètre nettement plus petit que la longueur d'onde. Ceci nous amène donc à penser que, si le modèle de Kelvin-Helmholtz est cohérent avec les résultats expérimentaux classiques, la longueur d'onde qu'il fournit ne peut être considérée comme la longueur réelle des ondes observées en surface des jets. Ainsi, le modèle traduit bien la compétition entre deux forces, de la même manière que le critère de Weber auquel il est finalement équivalent, mais est incapable de représenter finement les processus physiques. Ce constat de faiblesse du modèle n'est bien sûr pas nouveau et a d'ailleurs justifié les nombreux modèles d'instabilités, dont ceux de Miles (Miles, 1957) utilisés en particulier par Meignen (Meignen, 1995) ou Bürger (Burger et al., 1995).

Par sa relative cohérence générale, le modèle semble utilisable dans notre contexte. Il est cependant clair que des modèles plus performants peuvent être recherchés, sans entrer dans des développements mathématiques rédhibitoires d'une part pour une compréhension générale et d'autre part pour une introduction en modèle sous-maille dans un code de type CFD de grande échelle comme MC3D.

4.2.2.5 Choix de la distribution

La distribution de taille de gouttes, qui résulte d'un ensemble de processus de fragmentation primaire et secondaire, prend souvent la forme d'une fonction de densité de probabilité (du type log-normale, gamma, entre autres). Nous considérons dans cette modélisation une loi du type log-normale caractérisée par la donnée du diamètre de Sauter (SMD, moyenne en surface) et du diamètre médian en masse ($D_{0,50}$) :

$$f_{(D)} = \frac{1}{D\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{\ln(D)-\mu}{\sigma}\right)^2}, \quad \mu = \ln\left(D_{0,50}\right) \quad \sigma = \sqrt{2\ln\left(\frac{D_{0,50}}{SMD}\right)}$$

L'intégrale de la distribution entre deux bornes fournit la répartition[24] de la masse dans chaque classe :

$$F_{(D)} = \frac{1}{2}\left(1 + \mathrm{erf}\left(\frac{\ln(D) - \mu}{\sqrt{2}\sigma}\right)\right)$$

Cette intégrale tend, par construction, vers 1 quand D tend vers l'infini.

4.2.3 MODELISATION COUPLEE DE LA FRAGMENTATION DES JETS

Nous utilisons conjointement le modèle de fragmentation primaire précédemment décrit et le modèle de fragmentation secondaire. Cependant, afin de que la fragmentation secondaire soit effective, nous imposons un paramètre de taille de gouttes pour la fragmentation primaire artificiellement grand, de manière à générer des gouttes de grande taille qui sont représentatives des grandes déformations du jet. Après leur création, le modèle sous maille de fragmentation secondaire ajuste la taille finale de gouttes en fonction des conditions hydrodynamiques locales. Pour le cas de la fragmentation de jet de métaux liquides dans l'eau, le meilleur accord entre résultats numériques et données expérimentales est obtenu

[24] Attention à ne pas confondre répartition (proportion de la masse dans une classe donnée) et distribution, qui s'exprime par unité de diamètre. Distribution et répartition convergent à la limite d'un nombre de classe infini et uniformément réparties.

pour des valeurs différentes de celles préconisées précédemment. Même si le paramètre en taille pour la fragmentation primaire est multiplié par 2.5, le diamètre final des fragments est inférieur aux résultats expérimentaux. Ce comportement est dû à une fragmentation secondaire trop importante et un nombre de Weber de coupure trop bas[25].

4.2.3.1 Jet de métal liquide sans ébullition

Le modèle est construit pour être adapté, en principe, à toute configuration. Il est donc nécessaire de le valider de manière générale à partir d'expériences ne mettant en jeu ni ébullition ni solidification. D'éventuelles spécificités relatives à l'ébullition (en particulier la prise de moyenne pour construire un fluide ambiant représentatif) et à la solidification (prise en compte d'une augmentation équivalent de viscosité ou impact d'une croute) doivent être considérées dans études futures.

Les résultats expérimentaux considérés dans le cas présent mettent en jeu de jets de métaux liquides à bas point de fusion dans de l'eau. Les détails sont donnés en annexe 8.3. Il ressort de l'analyse bibliographique associée qu'il existe une assez grande incertitude sur la dimension des gouttes issues de la fragmentation. Il est donc important pour nous de considérer une vérification du modèle en tendance. Pour cela, nous avons considéré dans nos calculs une « expérience » fictive supposée représentative avec un fluide représentatif (de la même manière, en fait, que cela est fait implicitement en comparant des données d'expériences différentes), voir Figure 4-16.

Les conditions de calculs sont les suivantes :

- Injection directement dans l'eau : la vitesse considérée est donc la vitesse d'impact dans l'eau ;
- Un diamètre de jet, à l'impact dans l'eau, de 28 mm (représentatif d'une des expériences) ;
- Les propriétés physiques représentatives du Métal de Wood :
  - densité = 9000 kg/m^3;
  - tension superficielle entre 0,4 et 1 N/m.

Les autres propriétés physiques ne sont pas supposées intervenir dans le calcul car le nombre d'Ohnesorge est inférieur à 0.1. Il existe une très grande incertitude sur la tension superficielle du Métal de Wood (en particulier) qui, selon les auteurs prend des valeurs de 0,4 à 1 N/m. Rappelons qu'en toute logique dans le modèle KH la taille des gouttes est proportionnelle à la tension superficielle.

Les paramètres de calculs concernant le modèle lui-même sont les suivants :

- paramètre de fragmentation : $N_f = 0.25$;
- paramètre de taille de goutte : $N_d = 5$;
- rayon de filtrage pour la prise de moyenne = diamètre du jet = $2{,}8\ cm$;
- rapport $D_{0,50}/SMD = 1{,}2$;

[25] Le nombre de Weber de coupure permet d'arrêter la fragmentation secondaire quand le nombre de Weber de gouttes est plus petit que le Weber critique.

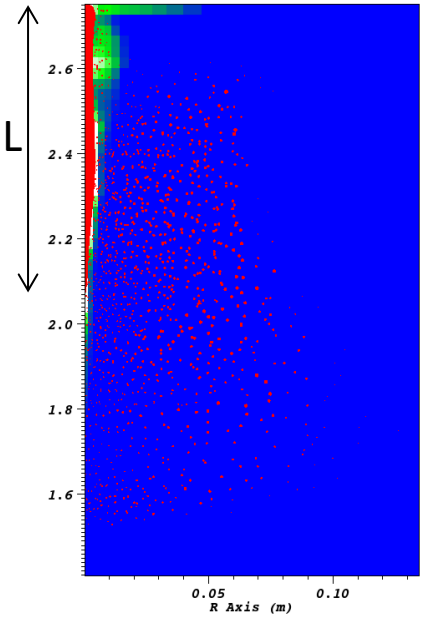


Figure 4-16 : Visualisation du calcul et de la longueur de rupture de la fragmentation du jet de métaux liquide à bas point de fusion

La Figure 4-17 fournit une comparaison de la dimension (SMD, pour IEMS et KMU ; $D_{0,50}$ pour IKE, ANL et ISPRA) de particules retrouvées dans les expériences de jets de métaux liquides sans ébullition avec le SMD de nos calculs. Il faut prendre en compte que dans ce test, seulement la modélisation de la fragmentation primaire a été utilisée. Dans le cas représenté, le nombre de classe de gouttes de corium est $N_c = 10$. Cette figure montre les résultats pour deux valeurs de la tension superficielle supposées encadrer la valeur réelle.

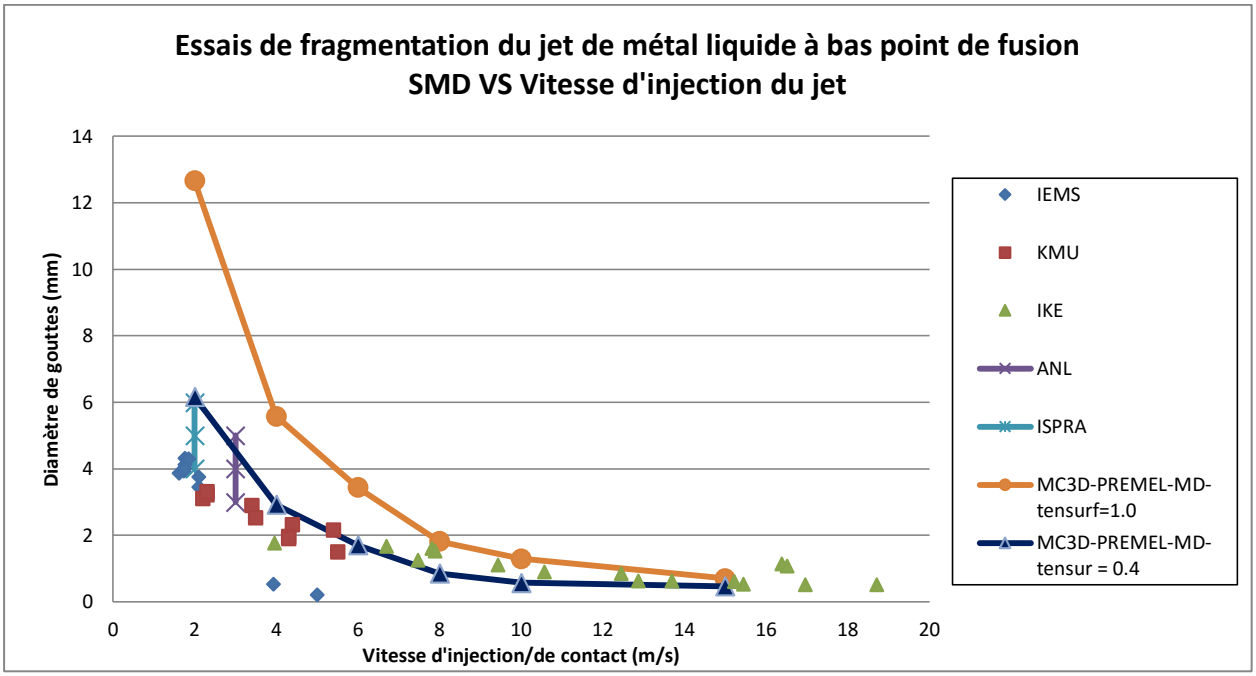


Figure 4-17 : Comparaison de la dimension (SMD, pour IEMS et KMU ; $D_{0,50}$ pour IKE, ANL et ISPRA) des particules retrouvées dans les expériences de jets de métaux liquides sans ébullition avec le diamètre (SMD) de nos calculs. Les calculs sont réalisés avec deux tensions superficielles de $0,4$ et $1\ N/m$. Données expérimentales obtenues de : IEMS (Abe et al., 2006), KMU(Bang et al., 2003), IKE(Burger et al., 1995), ANL(Burger et al., 1995) et ISPRA(Burger et al., 1995)

La Figure 4-17 montre l'impact de la tension de surface sur le SMD final de gouttes, en effet, le SMD de calculs effectués avec une tension superficielle de $1.0\ N/m$ sont approximativement 2 fois le SMD des calculs avec $\sigma = 0.4\ N/m$. Ces résultats sont cohérents avec le modèle KHF où le diamètre des particules D_d est proportionnel à la tension de surface. Les résultats avec $\sigma = 0.4\ N/m$ représentent de manière plus satisfaisante l'influence de la vitesse sur le diamètre final de gouttes générées.

Afin d'exploiter complètement le modèle multi-échelle de fragmentation, le modèle de fragmentation secondaire a été couplé avec un modèle de fragmentation primaire pour pouvoir décrire la fragmentation des jets de métaux liquides. Les paramètres utilisés dans cette modélisation sont basés sur la validation précédemment présentée. Nous avons effectué des calculs avec une modélisation MUDROPS homogène et hétérogène dont les résultats sont présentés dans la Figure 4-18 pour le cas de la fragmentation des jets de métaux liquides à bas point de fusion dans l'eau. Les paramètres sont les suivants :

Fragmentation primaire	Fragmentation secondaire
$N_d = 10$	$C_0 = 1.0$
$N_f = 0.25$	$We_{ch} = 30$

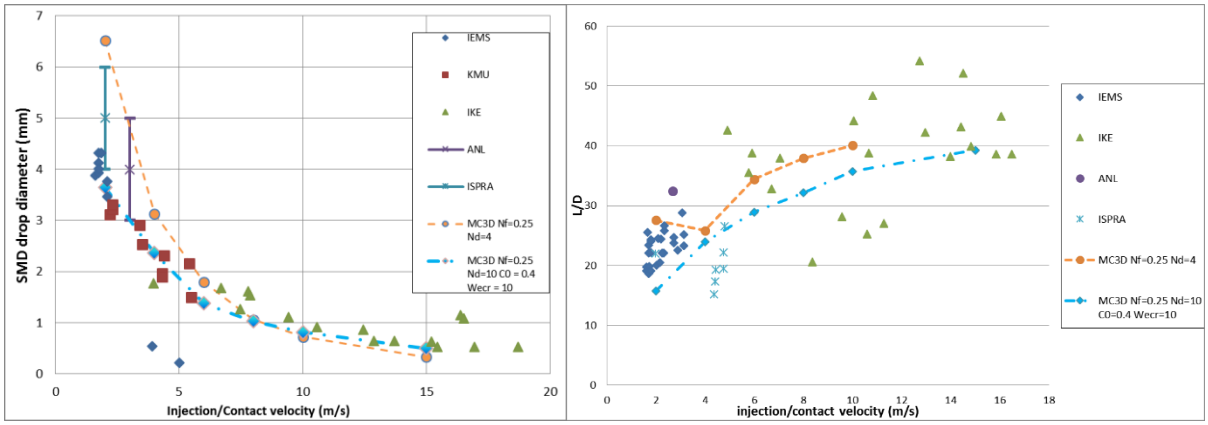


Figure 4-18 : Gauche - Diamètre de Sauter de gouttes filles à différentes vitesses d'injection. Droite - longueur de rupture du jet. Données expérimentales obtenues de : IEMS (Abe et al., 2006), KMU(Bang et al., 2003), IKE(Burger et al., 1995), ANL(Burger et al., 1995) et ISPRA(Burger et al., 1995). Les courbes oranges répresentent le modèle de fragmentation primaire seul et les courbes bleues le modèle couplée de fragmentation (modèle de fragmentation primaire + fragmentation secondaire). Calculs effectuées avec une tension de surface égale à $0.4\ N/m$

Rappelons que les différences entre les modèles homogène et inhomogène sont principalement dues à une augmentation rapide de la surface totale de gouttes à cause de la fragmentation secondaire. Cependant, dans ce cas précis, les résultats avec ces deux modèles sont très similaires et nous montrons seulement les résultats avec le modèle hétérogène. En effet, les gouttes atteignent très rapidement leur diamètre final à cause d'une fragmentation secondaire intense. Nous constatons que la modélisation multi-échelle de la fragmentation reproduit mieux la dynamique de fragmentation pour les différentes vitesses utilisées dans notre étude.

Concernant la modélisation effectuée seulement avec le modèle de fragmentation primaire, malgré une bonne concordance entre les calculs et les résultats expérimentaux, une divergence est à attendre vers des valeurs de vitesse trop faibles. En effet, le modèle de KHF n'a pas en lui-même une coupure du diamètre maximale des gouttes produites, c'est-à-dire, si nous prenons la limite quand ΔV_{jc} tend vers zéro, le diamètre de gouttes générées tend vers l'infini. Cet effet est supposé s'équilibrer avec un taux de fragmentation faible, cependant, le diamètre de gouttes générées tend plus rapidement vers l'infini ($D_d \propto \frac{1}{\Delta V_{jc}^2}$) par rapport à la tendance du taux de fragmentation vers zéro ($\Gamma_{frag} \propto \Delta V_{jc}$). Ceci pourrait donc expliquer une divergence plus marquée entre les résultats de calculs et ceux des expériences pour les régimes à faibles vitesses.

Nous constatons que l'implémentation de notre modélisation couplée permet de simuler avec précision la fragmentation de jets de métaux liquides pour l'intervalle de vitesses étudies. Nous constatons que même, à faibles vitesses d'injection, les données de simulations numériques sont en bon accord avec les résultats expérimentaux. En effet, à faibles vitesses d'injection, la fragmentation secondaire a un rôle important pour déterminer la taille finale de gouttes (ceci est évident par les écarts entre les courbes bleues et oranges de la Figure 4-18). Cas contraire aux vitesses d'injection élevées, où la fragmentation secondaire semble avoir un rôle moins important.

En comparant les graphes de la répartition en masse cumulée obtenus d'après les calculs de fragmentation couplée ($\sigma = 0.4\ N/m$) et celle de résultats expérimentaux (Figure 4-19 et Figure 4-20), nous remarquons une meilleure concordance pour des vitesses plus élevées. Il faut cependant faire

attention aux résultats expérimentaux de IEMS pour les vitesses de 3.92 et $5.0\ m/s$, car ils indiquent des diamètres petits par rapport à la tendance générale du SMD en fonction de la vitesse d'injection.

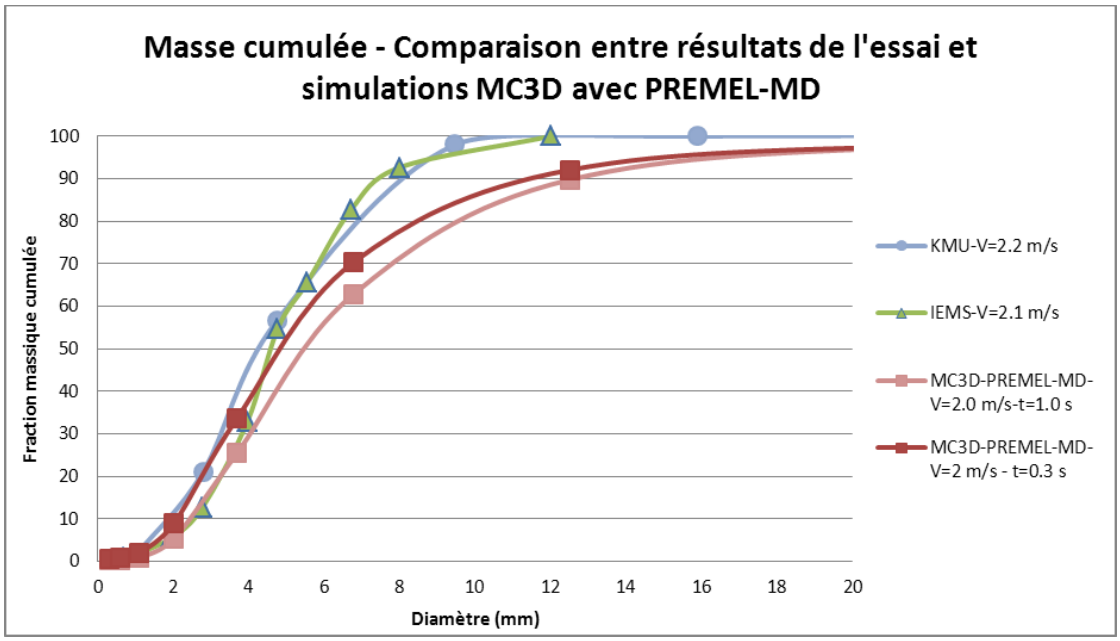


Figure 4-19: Masse cumulée, fragmentation du jet, vitesse V=2.0 m/s, tension de surface $\sigma = 0.4\ N/m$

Sur la Figure 4-19, nous constatons une bonne concordance de la masse cumulée pour les petits diamètres de gouttes (jusqu'à 5 mm), cependant, la présence de grosses gouttes dans les calculs produisent une différence notable avec les résultats expérimentaux. Ces grosses gouttes ont été générées dans les premiers et derniers instants de l'interaction. Quand la vitesse du jet augmente linéairement (de zéro à la vitesse d'injection préconisée), cela génère de grosses gouttes au début du calcul (faible gradient de vitesse). De même, pendant la phase finale d'injection, à cause de l'entrainement de l'écoulement environnant et de la diminution de la vitesse d'injection, des grosses gouttes sont générées. Par contre, les gouttes le plus petites ont été générées quand la vitesse du jet atteint celle imposée dans le jeu de données (régime permanent d'injection), comme le montre le pic de variation de la masse pour la classe de gouttes de 1.1054 mm.

Si nous comparons le graphe de masse cumulée pour deux instants différentes ($t = 0.3\ s$ et $t = 1.0\ s$, Figure 4-19) nous constatons que la répartition en masse à $t = 0.3\ s$ comporte plus de petites gouttes par rapport à celle à $t = 1.0\ s$. Cependant, les gouttes de grandes tailles générées pendant la phase initiale d'injection induisent un écart entre les données expérimentales et les donnés de calculs pour les classes de grand diamètre.

Pour une vitesse d'injection plus importante $V_j = 4.0\ m/s$ nous constatons une très bonne concordance entre les résultats expérimentaux (KMU) et le calcul (MC3D). Nous remarquons une plus faible masse de grosses gouttes (la masse cumulée est très proche de 100% pour les gouttes d'un diamètre plus petit que 12.5 mm).

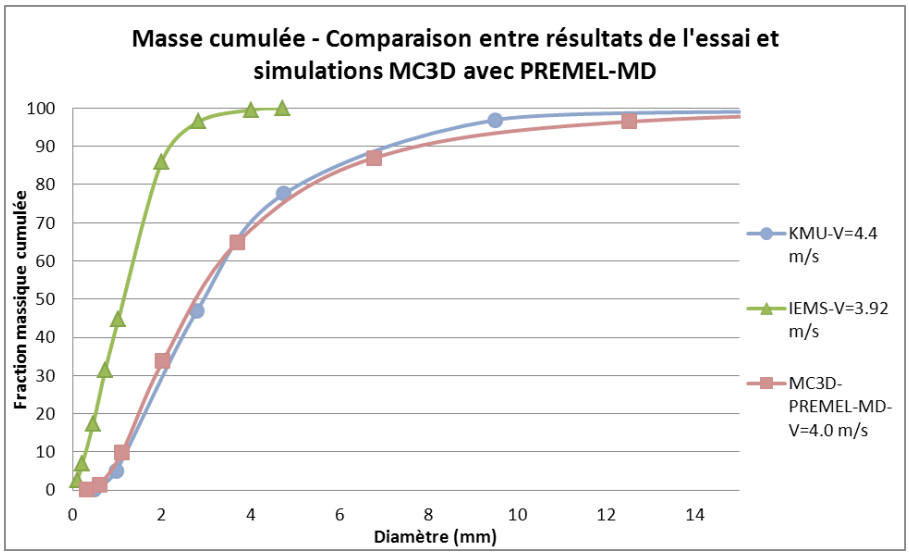


Figure 4-20: Masse cumulée, vitesse $V_j = 4.0\ m/s$

Comme conclusion préliminaire, nous constatons que le modèle de fragmentation multi-échelle implémenté dans l'application MUDROPS reproduit de manière assez satisfaisante les résultats des essais de fragmentation de jets de métaux liquide. Bien que les conditions particulières de chaque essais ne sont pas reproduits par les calculs, une tendance générale par rapport à la taille des particules générées est appréciée (Figure 4-17) avec un bon accord avec celles relevées d'après les données expérimentales. La valeur de la tension de surface du matériau utilisé impacte fortement la taille des fragments produits par les calculs conformément aux équations du modèle KHF. Nous soulignons l'impact de la fragmentation secondaire pour les faibles vitesses d'injection ; Au contraire pour les vitesses d'injection plus élevées, ce type de fragmentation a un faible impact sur la taille finale des gouttes.

Une validation additionnelle doit être réalisée, concernant spécialement le paramètre de vitesse d'éjection de gouttes. Dans les simulations présentées pour le modèle multi-échelle, la valeur de N_c est égale à 10. Ce paramètre N_c semble avoir un faible impact sur la fragmentation dans le cas des jets de métal liquide à bas point de fusion injectés dans l'eau car la dynamique de l'écoulement environnant le jet n'a pas un fort impact sur la dynamique de la fragmentation. Ce résultat devrait être différent dans les configurations ICR, où la dispersion de gouttes affecte directement la génération de la vapeur et les transferts de chaleur. C'est que nous allons voir dans le paragraphe suivant.

4.2.3.2 Calcul FARO L-28

Un test intégral du modèle de fragmentation primaire a été effectué sur la géométrie et les conditions du test FARO-L28. Lors de cet essai, une masse de 175 kg de corium ($80\ \%$ en masse de UO_2 - $20\ \%$ en masse de ZrO_2) a été injectée par un orifice de 5 cm ($D_j = 5\ cm$) dans un bac contenant environ $517\ kg$ d'eau à température de saturation. La hauteur d'eau est d'environ $1.40\ m$. Après l'interaction, le lit de débris résultant était composé de $48\ \%$ en masse du « cake » ($77\ kg$) et de $52\ \%$ de fragments ($84\ kg$). Le diamètre de Sauter de fragments est de 2.5 mm et le diamètre médian est 3.1 mm, $D_{0,50}/SMD\ = 1.24$ (plus de détails de l'essai FARO-L28 sont donnés en annexe 8.6)

La Figure 4-21 nous montre des images d'un calcul typique à différents instants de temps. Le paramétrage du modèle de fragmentation primaire est le même que celui des calculs de jet en métal de Wood. Pendant les premiers instants de l'interaction ($t = 0.5\ s$), nous apercevons une fragmentation du jet ainsi qu'un film de vapeur de faible épaisseur ; à l'instant $t = 1.0\ s$ un film de vapeur épais se forme autour du jet. Nous constatons une remonté de grandes poches de vapeur le long du bac et une augmentation de la fragmentent du jet.

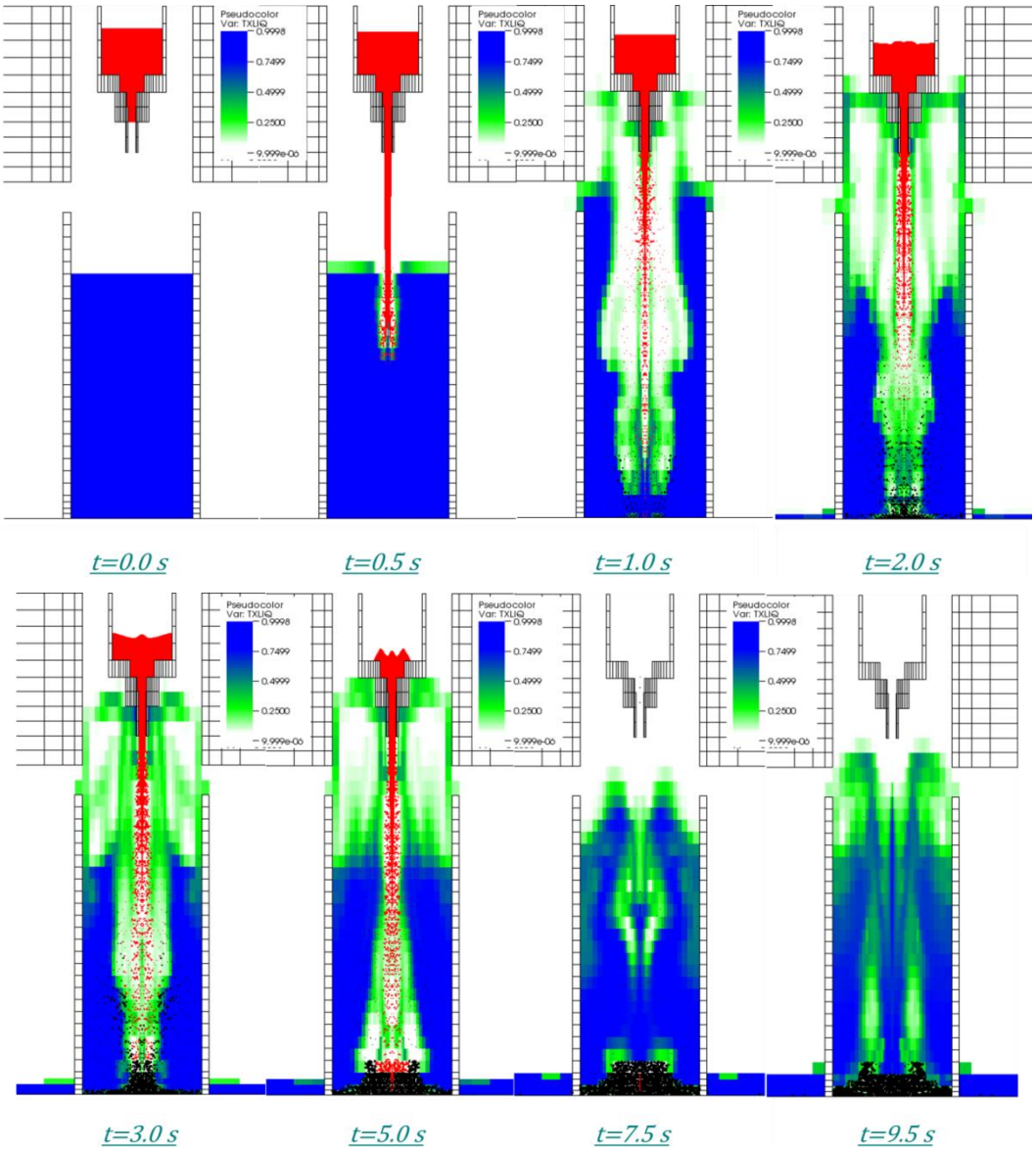


Figure 4-21 : Aperçu du calcul FARO-L-28. MC3D-MUDROPS avec 10 classes pour la phase dispersée (La couleur rouge indique le corium liquide (jet et gouttes). Les fragments solides sont représentés en noir

Aux alentours de $t = 2.0\ s$, nous remarquons la déposition de gouttes solides (en couleur noir) au fond du bac, ce qui indique un fort refroidissement. Ces gouttes continuent à échanger fortement de la chaleur et génèrent de la vapeur (zones vertes autour du lit de débris, t=7.5 s et t=9.5 s). Nous remarquons une fragmentation du jet tout au long de la colonne par de la vapeur d'eau qui remonte. Cette fragmentation peut se produire même dès la sortie de l'injecteur. Cette fragmentation importante empêche le jet de pénétrer profondément dans l'eau.

Notre intérêt principal pour ce type de calculs est de valider l'implémentation du modèle de fragmentation et vérifier l'influence des paramètres. La première étude a porté sur l'influence du nombre de classes de gouttes (NC). Dans cette série de calculs, nous faisons varier $NC = 2, 5, 7, 10$ et 15. Deux calculs standards avec l'application PREMEL de MC3D ont été effectués (PREMEL-CONST et PREMEL-KH). Ces calculs considèrent un seul champ de masse pour décrire la phase dispersée et deux modèles de fragmentation différentes. Le modèle de fragmentation CONST impose un taux de fragmentation constant avec un diamètre de gouttes et une vitesse d'éjection imposés (définis par l'utilisateur); les détails de ce modèle sont expliquées dans (Meignen and Picchi, 2012). Le calcul PREMEL-KH utilise le modèle de fragmentation primaire exposé dans l'annexe 8.5, sans prendre en compte la fragmentation secondaire. D'ailleurs, le modèle utilise un seul champ de gouttes.

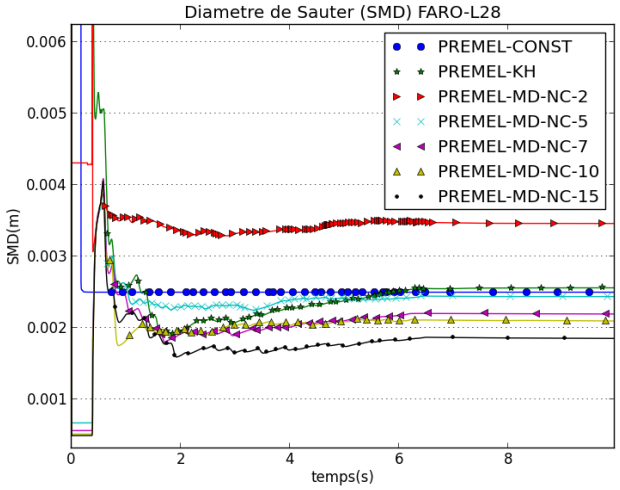


Figure 4-22: SMD pour différentes applications, test FARO L-28

Application	Calcul	$SMD\ (m)$	$D_{0,50}$	$D_{0,50}/SMD$
PREMEL	PREMEL-CONST	0.0025	0.0025	1.0
PREMEL	PREMEL-KH	0.00256	0.00256	1.0
MUDROPS	PREMEL-MD-NC-2	0.00346	-	-
MUDROPS	PREMEL-MD-NC-5	0.00244	0,00385	1.577
MUDROPS	PREMEL-MD-NC-7	0.00219	0,00358	1.635
MUDROPS	PREMEL-MD-NC-10	0.0021	0,00344	1.638
MUDROPS	PREMEL-MD-NC-15	0.00185	0,00322	1.740

Tableau 7 : Diamètre de Sauter et diamètre médian. Le diamètre médian est calculé selon une interpolation linéaire entre les valeurs des classes au tour de 50% en masse cumulé. Pour le calcul PREMEL-MD-NC-2, ce calcul n'est pas juste car la première classe contient plus de 50 % de la masse totale.

Les résultats de calculs effectués avec le modèle MUDROPS montrent que le diamètre de Sauter (SMD) obtenu est plutôt satisfaisant par rapport au résultat de l'essai FARO-L28 (Figure 4-22). Nous constatons que le calcul avec deux classes est très écarté de la valeur espérée et les calculs avec plus de 5 classes sont plutôt cohérents avec la valeur expérimentale. La Figure 4-23 nous montre la fraction massique cumulée en fonction de la taille de particules pour l'essai et les divers calculs MC3D. La courbe théorique fait référence à une loi log-normale (voir section 4.2.2.5) caractérisé par un $SMD = 2.5\ mm$ et un $D_{0,50} = 3.1\ mm$. Nous remarquons la bonne concordance entre les résultats expérimentaux et la courbe théorique (loi log-normale), ce qui nous indique une distribution des débris très similaire à une loi log-normale. Une représentation plus détaillée du spectre est proposée en Figure 4-24. Les fragments les plus petits sont légèrement sous-représentés mais l'impact semble minime.

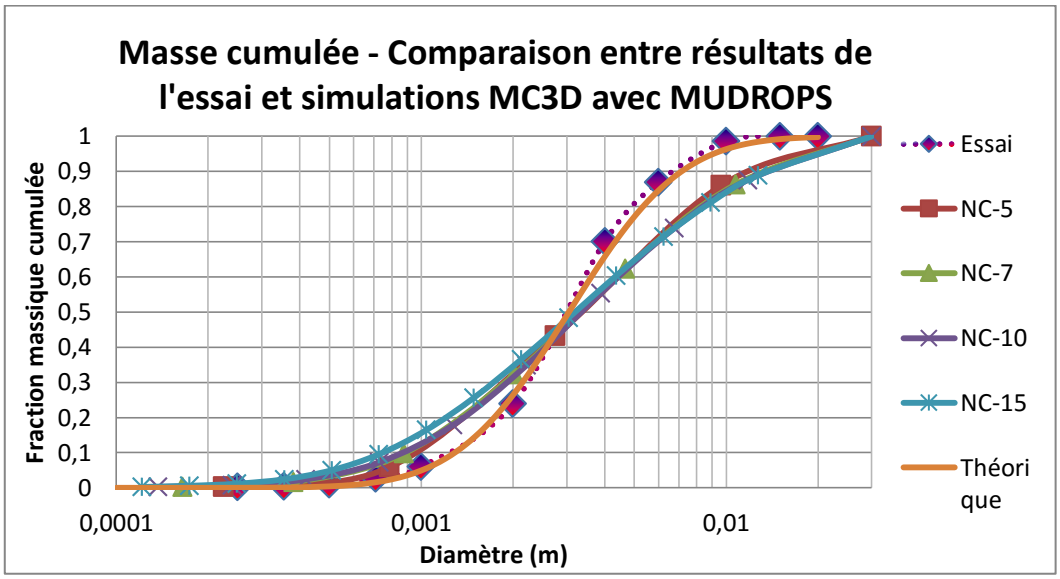


Figure 4-23: Masse cumulée calcul FARO-L28. La courbe théorique fait référence à une distribution log-normale (voir section 4.2.2.5) caractérisé par un $SMD = 2.5\ mm$ et un $D_{0,50} = 3.1\ mm$

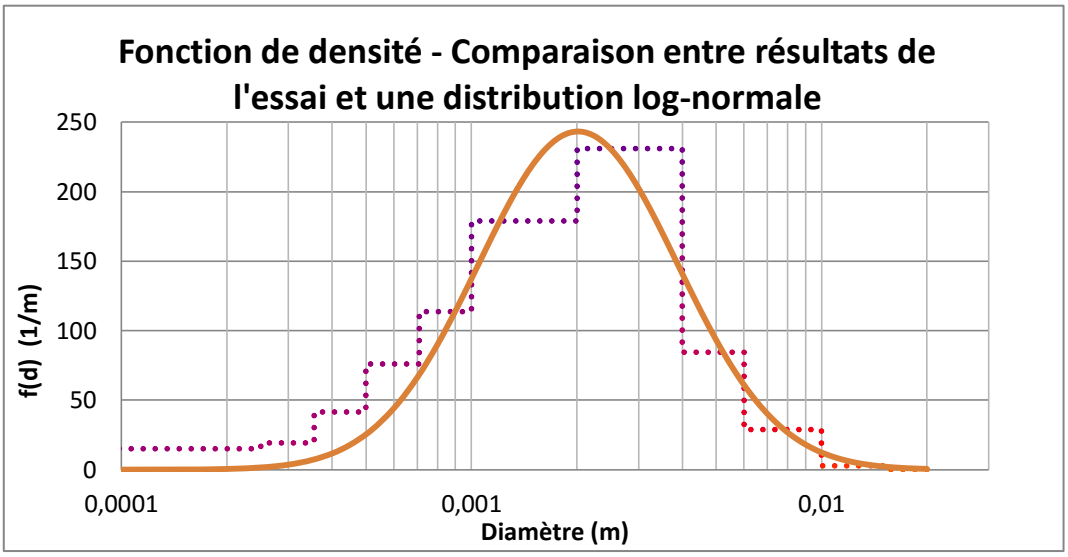


Figure 4-24 : Fonction de densité de probabilité. Comparaison entre les résultats de l'essai FARO-L28 (trait pointillé) et une distribution log-normale caractérisé par un $SMD = 2.5\ mm$ et un $D_{0,50} = 3.1\ mm$ (trait continu)

Pour simplifier la représentation de la fonction de densité de probabilité, nous supposons que l'échelon qui caractérise chaque classe est représenté par des points qui ont pour abscisse la valeur du diamètre de Sauter de la classe et pour ordonnée la valeur de la fonction de densité de probabilité de la classe. Le résultat est présenté Figure 4-25.

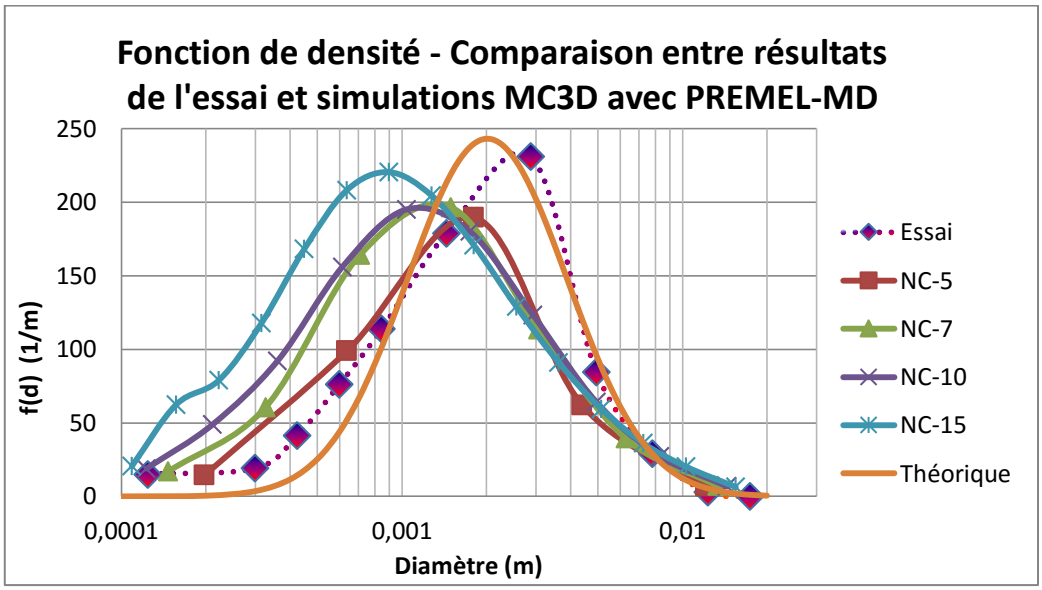


Figure 4-25 : Représentation simplifiée de la fonction de densité de probabilité

Ce graphe nous montre pour les calculs la présence d'une grande quantité de gouttes de petites tailles et un déficit de gouttes de grandes tailles. Nous remarquons également qu'au fur et à mesure que le nombre de classes augmente, la courbe est décalée à gauche ; ce décalage vers les diamètres plus petits n'a pas d'impact significatif sur le $D_{0,50}$, cependant, il impacte fortement le diamètre de Sauter (Figure 4-22).

4.3 CONCLUSIONS DE LA MODELISATION DE LA FRAGMENTATION DE JETS ET DES GOUTTES DANS MC3D

Les modèles décrivant la fragmentation primaire et secondaire dans le cas de la fragmentation de jets de métaux liquide dans le contexte des interactions corium-eau ont été développées et confrontés à diverses données expérimentales. Une extension du modèle d'instabilité de Kelvin-Helmholtz est utilisée pour calculer les échelles caractéristiques nécessaires aux modèles de fragmentation (taux de fragmentation, taille de gouttes et vitesse d'éjection). Un modèle de fragmentation secondaire a été aussi implémenté dans le code MC3D, il est basé principalement sur un régime de fragmentation par arrachement de couche limite et sur la proportionnalité entre le temps total de fragmentation et le temps caractéristique de fragmentation de Ranger et Nicholls.

Bien que les modèles implémentés ne permettent pas de reproduire la dynamique de la fragmentation de manière précise (pas de phase de déformation de la goutte avant la fragmentation), les tailles finales de fragments ainsi que le temps total de fragmentation sont en accord avec les résultats expérimentaux obtenus dans le cas d'une goutte atomisée par une onde de choc. Dans les cas étudiés, la fragmentation d'un jet de métaux liquide est produite par les perturbations hydrodynamiques en négligeant les transferts de chaleur. La modélisation MUDROPS donne aussi d'excellents résultats en termes de taille finale de fragments et de fonction de densité de probabilité. Les résultats montrent l'importance de la fragmentation secondaire pour les faibles vitesses d'injection et son faible impact pour des vitesses d'injection élevées. En effet, pour le régime à haute vitesse, les gouttes sont rapidement en équilibre hydrodynamique avec le milieu environnant.

Les analyses ont mis en évidence un manque de compréhension de la fragmentation secondaire en configuration liquide/liquide, puisqu'il est nécessaire d'utilise des nombre de Weber caractéristiques des gouttes filles étonnamment grands. Ceci a justifié l'étude que nous avons menée sur ce point et dont les résultats sont décrits dans les chapitres suivants. Il est important de noter que les résultats de cette étude seront également utilisés pour la modélisation de la fragmentation fine en explosion. En effet, un modèle similaire développé pour l'application EXPLO (sous-application EXPLO_FF) conduit à la même conclusion. En effet, il est nécessaire d'utiliser des nombres de Weber caractéristiques des gouttes filles du même ordre de grandeur (de 30 à 50) et qu'il est également nécessaire de justifier.

5 CHAPITRE 5 : METHODOLOGIE DE SIMULATION NUMERIQUE DE LA FRAGMENTATION DE GOUTTES

Gerris est un code open source développé par S. Popinet sous le support de NIWA (National Institute of Water and Atmospheric research) et l'institut Jean Le Rond d'Alembert. Ce code est basé sur une méthode de volumes finis. Les méthodes numériques implémentées dans Gerris combinent une discrétisation spatiale de type quadtree ou octree, une méthode de projection et un solveur de poisson multi-niveau (Popinet, 2003). L'utilisation de maillages structurés quad/octree permet l'utilisation d'une technique avancée et puissante pour le raffinement adaptatif du maillage (AMR, i.e « Adaptive Mesh Refinement »). Cette caractéristique de Gerris permet d'obtenir une meilleure résolution spatiale des différentes échelles de l'écoulement dans les endroits requis, permettant ainsi de réduire le temps de calcul comparé aux codes ayant un maillage uniforme. Il est cependant recommandé de travailler avec la forme adimensionnelle des équations de Navier-Stokes, ce qui présente les avantages suivants :

- facilite le changement d'échelle de simulations pour obtenir des grandeurs réelles ;
- évite les approximations à cause du maniement de petits et de grands nombres ;
- permet de comprendre plus facilement l'importance de divers termes dans les équations.

Dans le Tableau 8, nous présentons la mise sous forme adimensionnelle des principales variables du problème. Le système étudié dépend de six variables exprimées en fonction des trois grandeurs fondamentales : masse, longueur et temps :

Variable physique	Paramètre physique	Paramètre adimensionnel	échelle
Distance	$\boldsymbol{x}$	$\tilde{\boldsymbol{x}}$	$\boldsymbol{x} = L \cdot \tilde{\boldsymbol{x}}$
Vecteur vitesse	$\boldsymbol{u}$	$\tilde{\boldsymbol{u}}$	$\boldsymbol{u} = U_0 \cdot \tilde{\boldsymbol{u}}$
Temps	t	$\tilde{t}$	$t = L/U_0 \cdot \tilde{t}$
Masse volumique	ρ	$\tilde{\rho}$	$\rho = \rho_0 \cdot \tilde{\rho}$
Viscosité	μ	$\tilde{\mu}$	$\mu = \mu_0 \cdot \tilde{\mu}$
Tension de surface	σ	$\tilde{\sigma}$	$\sigma = \sigma_0 \cdot \tilde{\sigma}$
Acceleration volumique	$\boldsymbol{f}$	$\tilde{\boldsymbol{f}}$	$\boldsymbol{f} = f_0 \cdot \tilde{\boldsymbol{f}}$

Tableau 8 : Mise sous forme adimensionnelle des principales variables pour la simulation numérique des écoulements comportant des interfaces

Considérant ces grandeurs physiques et en introduisant les nombres adimensionnels suivants: $Re = \frac{\rho_0 U_0 L}{\mu_0}, We = \frac{\rho_0 L U_0^2}{\sigma}$ et $Fr = \frac{U_0}{\sqrt{L f_0}}$, les équations de Navier-Stokes incompressibles peuvent être réécrites comme suit :

Eq. 5-1 $$\bar{\nabla} \cdot \tilde{\boldsymbol{u}} = 0$$

Eq. 5-2 $$\frac{D\tilde{\boldsymbol{u}}}{D\tilde{t}} = \frac{1}{\tilde{\rho}}\left[-\bar{\nabla}\tilde{\boldsymbol{p}} + \frac{\tilde{\mu}}{Re}\bar{\nabla} \cdot (\bar{\nabla}\tilde{\boldsymbol{u}} + \bar{\nabla}\tilde{\boldsymbol{u}}^T) + \frac{\tilde{\sigma}}{We} \cdot \tilde{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{\delta}_s\tilde{\boldsymbol{n}}) + \frac{\tilde{f}}{Fr}\right]$$

Eq. 5-3 $$\frac{D\tilde{\boldsymbol{u}}}{D\tilde{t}} = \boldsymbol{alpha}[-\bar{\nabla}\tilde{\boldsymbol{p}} + \boldsymbol{SourceViscosity} \cdot \bar{\nabla} \cdot (\bar{\nabla}\tilde{\boldsymbol{u}} + \bar{\nabla}\tilde{\boldsymbol{u}}^T) + \boldsymbol{SourceTension} \cdot \boldsymbol{VariableCurvature} \cdot (\boldsymbol{\delta}_s\tilde{\boldsymbol{n}}) + \boldsymbol{Source}]$$

Les termes sources en rouge sont introduits à l'aide de mots clés dans le jeu de données Gerris. Ces équations sont définies pour un seul fluide (terme source constants), cependant, dans notre situation nous traitons deux fluides limités par une interface. Pour ce faire, nous introduisons des fonctions qui permettent de différencier les fluides en fonction de la variable T (fonction de couleur) décrivant la fraction volumique des fluides. Ce type de formulation est connu sous le nom de 'one fluid formulation' (Rimbert, 2003) car le même système d'équations est résolu dans tout le domaine.

La fonction couleur T ou tout simplement la fraction volumique, par convenance, vaut 0 dans le fluide le plus léger et 1 dans le fluide plus lourd. La transition à l'interface (de 0 jusqu'au 1) se fait sur quelques

mailles où les forces de tension superficielle interviennent (Brackbill et al., 1992). Nous pouvons proposer les fonctions suivantes pour la masse volumique et la viscosité des fluides (indice d correspondant au fluide plus lourd ($T = 1$, métal) et c correspondant au fluide plus léger ($T = 0$, réfrigérant)) :

Eq. 5-4 $$\tilde{\rho} = \frac{\rho_d}{\rho_0} \cdot T + (1 - T) \cdot \frac{\rho_c}{\rho_0} \quad \text{et} \quad \tilde{\mu} = \frac{\mu_d}{\mu_0} \cdot T + (1 - T) \cdot \frac{\mu_c}{\mu_0}$$

Les valeurs de référence ρ_0 et μ_0 sont prises égales à celles du fluide environnant (réfrigérant, ρ_c et μ_c). Les équations de Navier-Stokes résultantes sont valables dans tout le domaine de calcul pour les deux fluides avec différentes masse volumiques, différentes viscosités et séparés par une interface où agissent les forces de tension de surface.

5.1 DISCRÉTISATION SPATIALE

Le domaine de calcul est discrétisé en utilisant une partition quadtree (octree en trois dimensions) ; un exemple du maillage est donné en Figure 5-1. La racine de l'arbre correspond au niveau zéro de raffinement. Les 'leaf cells' ou 'mailles feuilles', correspondent au niveau de raffinage maximum, c'est-à-dire qu'elles n'ont pas de mailles filles. Différents critères de raffinement peuvent être définis selon les caractéristiques que nous souhaitons calculer et résoudre. Dans la section suivante nous présentons les principaux critères de raffinement nécessaires pour décrire précisément l'interface dans le cadre de la fragmentation d'une goutte. Ces critères sont aussi utilisés pour décrire les structures tourbillonnaires qui peuvent influencer le processus de déformation et de fragmentation de la goutte.

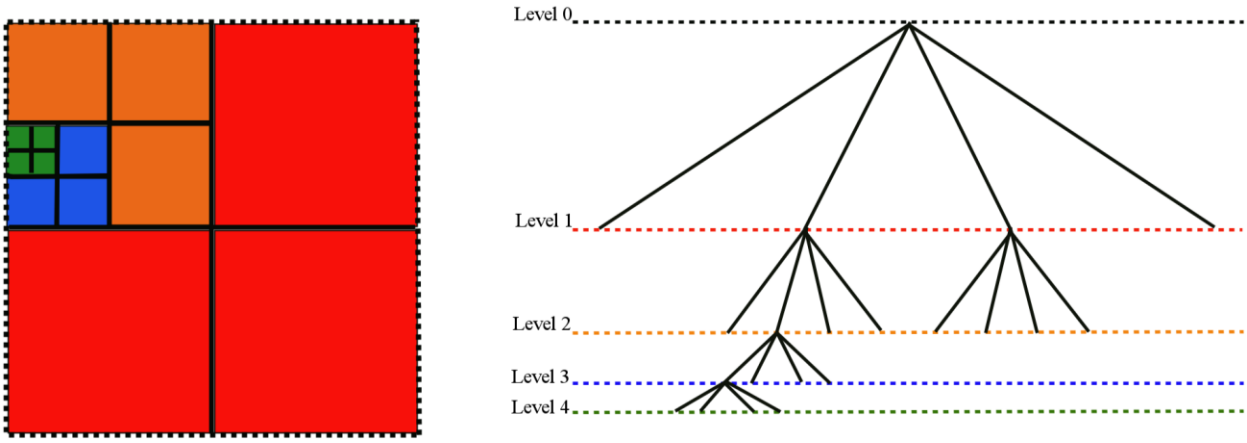


Figure 5-1 : Discrétisation quadtree et la structure logique correspondante

La précision d'une simulation numérique avec surface libre (interface entre 2 fluides) et atomisation est très dépendante de la taille de la plus petite maille comparée aux plus petites structures de l'écoulement que nous souhaitons simuler et capturer. L'avantage de Gerris est l'optimisation du maillage effectué par l'utilisation d'un maillage adaptatif qui permet de raffiner le maillage selon différents critères. Plusieurs critères de raffinement peuvent être définis, cependant, trois critères basés sur le gradient, la courbure et l'épaisseur sont couramment utilisés pour les simulations de fragmentation du liquide. Il faut noter que toutes les structures de l'écoulement ne peuvent pas toujours être résolues car le temps de calcul serait trop important.

Dans notre cas de figure, nous concentrons nos efforts sur la résolution des grandes structures tourbillonnaires de l'écoulement, les endroits avec une interface très déformée et les endroits où se produit la fragmentation. Pour les gouttes en-dessous d'un certain seuil, nous avons choisi une méthode de suivi lagrangien des gouttes (en dessous d'une certaine taille, les gouttes sont « supprimées » de la modélisation eulérienne et remplacées par des particules qui sont suivies de manière lagrangienne et qui ne peuvent plus se fragmenter à nouveau), ce qui nous permet de conserver la masse, de réduire le temps de calcul et de traduire de façon approchée l'impact des petites gouttes dans le processus de fragmentation. Il s'avère que les petites gouttes qui sont mal résolues par la méthode VOF-PLIC (diamètre de la goutte comparable à la taille de la plus petite maille) disparaissent du domaine à cause de la diffusion du champ T. Pour éviter la perte des petites gouttes (qui possèdent une surface importante) le maillage peut être raffiné à un niveau plus élevé ou ces gouttes peuvent être enlevées et traitées dans un schéma lagrangien. Effectuer un raffinement du maillage augmente d'avantage le temps de calcul sans assurer toutefois la bonne résolution de ces petites gouttes (il faut au moins 10 points de maille par diamètre). Pour cette raison, un schéma lagrangien semble être un bon compromis entre précision et temps de calcul.

Pour savoir de quelle manière les structures du fluide (gouttes, ligaments et particules) seront résolues par le code Gerris, nous avons effectué trois cas tests, où nous identifions le comportement des structures au fur et à mesure que nous changeons la résolution spatiale. Nous explorons diverses manières d'optimiser le maillage de manière à avoir des simulations numériques de durée de calcul raisonnable mais précises.

5.2 CRITÈRES DE RAFFINEMENT

5.2.1 GB (CRITERE BASE SUR LE GRADIENT)

Le critère basé sur le gradient est utile pour raffiner localement le maillage en fonction du gradient d'une variable donnée. Par exemple, pour raffiner les structures tourbillonnaires de l'écoulement loin de l'interface (à l'intérieur de la goutte ou à l'extérieur de celle-ci) nous pouvons utiliser la variable vorticité. Le maillage sera raffiné selon l'inéquation suivante :

Eq. 5-5 $$\frac{|\nabla\times\boldsymbol{v}|\cdot\Delta x}{\max|\boldsymbol{v}|} > \delta$$

Où Δx est la taille de la maille et δ est un seuil défini par l'utilisateur qui peut être interprété comme le maximum de déviation angulaire (à cause de la vorticité locale) d'une particule qui se déplace à la vitesse $\max|\boldsymbol{v}|$ à travers la maille. Ce critère de raffinement permet incrémenter le nombre de mailles au niveau de la couche limite et dans la zone de recirculation derrière la goutte (Figure 5-2).

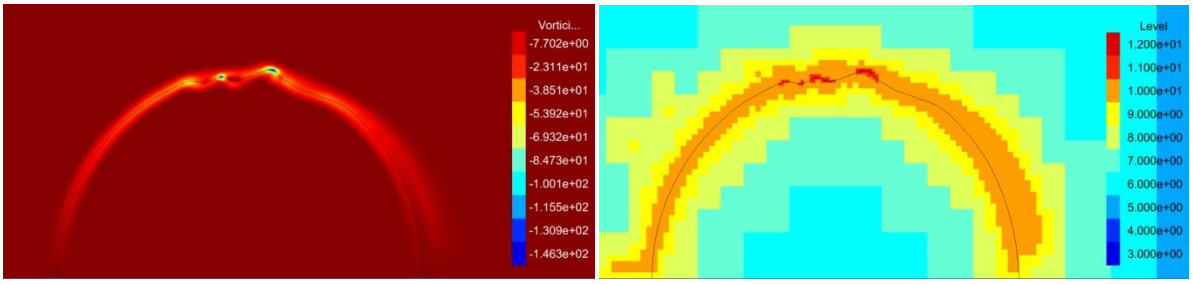


Figure 5-2 : Raffinement de la couche limite à cause du gradient de vorticité. Gauche, champ de vorticité ; Droite, niveau de raffinement du domaine

Le critère de raffinage en fonction du gradient peut être aussi utilisé pour améliorer la résolution spatiale autour de l'interface. En effet, le schéma VOF postule que l'interface est une fonction qui varie entre 0 et 1 selon que nous nous trouvons à l'intérieur de la goutte ou à l'extérieur de celle-ci. Par convention, le fluide le plus dense a la valeur ($T = 1$) et le plus léger ($T = 0$). La formulation VOF-PLIC implémentée dans Gerris ne permet pas d'avoir une interface raide et elle diffuse sur quelques mailles. Ce changement doux de la fonction T permet de définir un gradient à l'interface et que nous pouvons donc l'utiliser comme variable pour raffiner le maillage à l'interface.

Cette fonction permet de raffiner le maillage partout où la variable T présente un gradient. Dans certains cas, ce type de raffinement peut représenter un cout important en termes de temps de calcul car certaines zones de l'interface (structures de plus petite échelle) doivent être maillées plus finement. En effet, si nous souhaitons capturer les petites structures de l'interface, nous sommes obligés d'augmenter le niveau de raffinement. Cependant, ceci implique de raffiner l'interface partout y compris aux endroits peu importants. Pour optimiser la fonction de raffinement dans les endroits très déformés de l'interface et dans les zones de rupture, nous pouvons utiliser des fonctions basées sur la courbure et l'épaisseur de l'interface, qui seront exposées dans les lignes suivantes.

5.2.2 CB (CRITERE BASE SUR LA COURBURE)

Ce critère est important quand l'interface est très déformée avec des angles fermés (Figure 5-3). A la différence du raffinage basé sur le gradient de la fonction couleur T, dans ce cas, nous raffinons localement le maillage, ce qui permet d'utiliser un niveau de raffinement supérieur pour résoudre les structures de plus petites échelles, par exemple des gouttes plus petites.

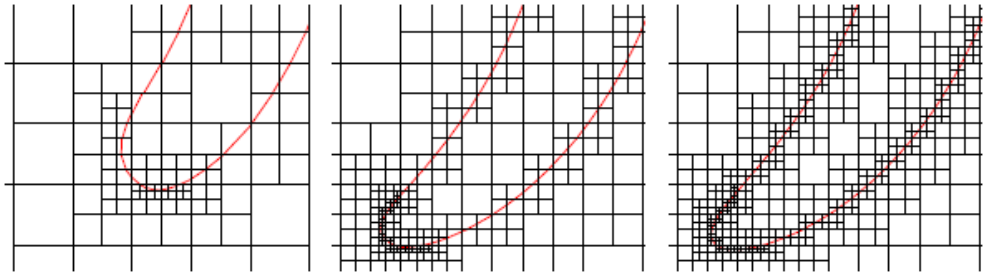


Figure 5-3 : Raffinement basé sur la courbure

5.2.3 TB (CRITERE BASE SUR L'EPAISSEUR)

Les deux critères de raffinement exposés précédemment permettent de raffiner l'interface partout avec un niveau de raffinage modéré (gradient based) et d'avoir une discrétisation spatiale fine dans les endroits où la courbure de l'interface est importante. Cependant, pour le cas où deux interfaces qui ne sont pas très déformées se rapprochent l'une de l'autre (exemple d'un ligament qui s'étire ou d'une nappe qui devient mince), aucun des deux critères ne permettent de raffiner finement le fluide entre les deux interfaces, ce qui provoquera une cassure prématuré (d'origine numérique) du ligament ou de la nappe. Pour éviter une fragmentation numérique prématurée, nous pouvons utiliser le critère de raffinage basé sur l'épaisseur lequel utilise les fonctions de hauteur (Height functions) (Popinet, 2009) nécessaires pour le calcul de la courbure et les forces de tension superficielle pour le modèle VOF.

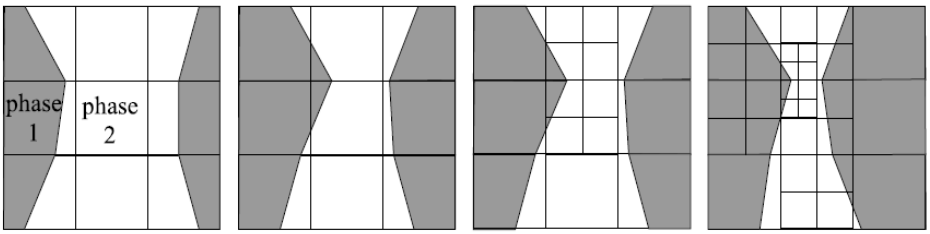


Figure 5-4 : Raffinage du maillage basé sur l'épaisseur. (Chen and Yang, 2014)

5.2.4 PRÉ-DIMENSIONNEMENT DU MAILLAGE

Une méthode plus simple de raffinement consiste à calculer l'ordre de grandeur de la plus petite maille nécessaire pour résoudre les structures qui peuvent se développer à l'interface de la goutte (instabilités de Kelvin-Helmholtz ou la capture des petites gouttes arrachées de l'interface de la goutte). En effet, la précision de la distribution de taille de particules obtenue à la fin du calcul dépend de la capacité du maillage à capturer les diverses gouttes générées pendant la fragmentation. Nous nous basons donc d'un modèle théorique pour calculer la taille des particules comme, par exemple, le modèle d'arrachement de la couche limite ou le modèle de Kelvin-Helmholtz présentées dans le chapitre 2.

Nous pouvons estimer la taille de petites particules ainsi que la longueur d'onde des instabilités qui se développent à l'interface de la goutte peuvent grâce au nombre de Weber basé sur la vitesse initiale de l'écoulement externe. La taille des plus petits fragments peut se calculer en utilisant un nombre de Weber caractéristique. Ce nombre de Weber caractéristique doit être supposé inférieur à 12 (limite de stabilité d'une goutte) et représente la taille des gouttes qui sont produites au cours de la fragmentation. La taille de ces gouttes est donnée par :

$$\boldsymbol{D_{min} = \frac{We_{ch}\sigma}{\rho_c \Delta V_{dc}^2}}$$

La dimension de ces gouttes peut être reliée à la taille du domaine de calcul et la goutte mère en introduisant le ratio α (rapport entre le diamètre des plus petits gouttes et de la goutte mère) et le ratio β (ratio entre la taille du domaine et la goutte mère):

$$\boldsymbol{\alpha = \frac{D_0}{D_{min}} = \frac{We_0}{We_{ch}}} \qquad \text{et} \qquad \boldsymbol{L = \beta \cdot D_0}$$

Nous obtenons donc une relation directe entre la taille des plus petites particules et la longueur du domaine:

$$\boldsymbol{D_{min} = \frac{L}{\alpha \cdot \beta}}$$

Les contraintes de la méthode VOF imposent qu'une goutte soit résolue par un certain nombre de points pour qu'elle soit advectée correctement avec une bonne précision sur sa forme et son volume. Nous introduisons un paramètre γ qui représente le ratio entre la taille de goutte et la taille de la plus petite maille Δx_{min}

Eq. 5-6 $$\boldsymbol{\Delta x_{min} = \frac{D_{min}}{\gamma} = \frac{L}{\alpha \cdot \beta \cdot \gamma}}$$

La taille de la plus petite maille Δx_{min} est donnée d'un autre côté par le niveau de raffinement utilisé selon l'expression suivante : $\Delta x_{min} = \frac{L}{2^{LEVEL}}$. Nous pouvons calculer donc finalement le niveau de raffinement requis pour une valeur des paramètres $\alpha, \beta\ et\ \gamma$ donnés.

Eq. 5-7 $$\boldsymbol{LEVEL = \frac{\ln(\alpha \cdot \beta \cdot \gamma)}{\ln(2)}}$$

Avec, idéalement $\alpha =$ dépendant du nombre de Weber initial , $\beta = 7.5\ \ et\ \gamma = 10$

5.3 TEST DE CRITERES DE RAFFINEMENT

Nous avons effectué différents tests pour évaluer les performances des critères de raffinement. Ces cas tests permettent de quantifier les performances du code pour résoudre les zones très déformées et étirées du fluide ; aussi, ils permettent de vérifier la conservation de la masse et la précision du VOF-PLIC pour représenter des gouttes d'une certaine taille.

Pour le premier test, nous plaçons une goutte de dimension 0.3 L (avec L la dimension de la maille de niveau zéro) dans la position $(0.0, 0.25)$ sous l'effet d'un écoulement donné par la fonction de courant suivante :

Eq. 5-8 $$\boldsymbol{\Psi = \begin{matrix} \frac{R}{\pi}\sin^2(\pi x)\sin^2(\pi y) & pour\ \ t < 4.0 \\ -\frac{R}{\pi}\sin^2(\pi x)\sin^2(\pi y) & pour\ t \geq 4.0 \end{matrix}}$$

Cet écoulement déforme la goutte en forme de spirale (voir Figure 5-5). Le paramètre R contrôle la déformation maximale de la goutte, celui-ci est fixé à 0.75. La déformation maximale de la goutte est atteinte à une valeur de $t = 4.0$ (Figure 5-5), moment à partir duquel l'écoulement s'inverse, ce qui fait revenir la goutte à son état initial à l'instant $t = 8.0$.

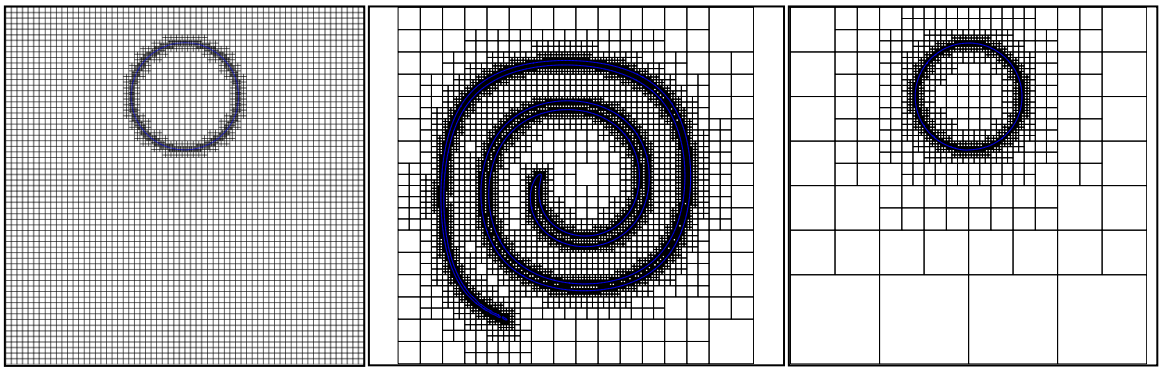


Figure 5-5 : Gauche : Etat initial de la goutte (raffinement initial du maillage, $t = 0$) ; Centre : Etat de déformation maximale ($t = 4$) ; Droite : état final de la goutte ($t = 8$)

L'erreur (L_2) est calculée entre la forme initiale $(t = 0)$ et la forme finale de la goutte $(t = 8)$ avec l'équation suivante :

Eq. 5-9 $$\boldsymbol{Erreur\ L_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{N}(s_i - v_i)^2}}$$

Où N est le nombre totale de mailles, s_i et v_i sont les fractions volumiques initiales $(t = 0)$ et finales $(t = 8)$, respectivement. Cette erreur compare donc les différences entre les formes initiales et finales de la goutte en comparant les taux volumique dans chaque maille.

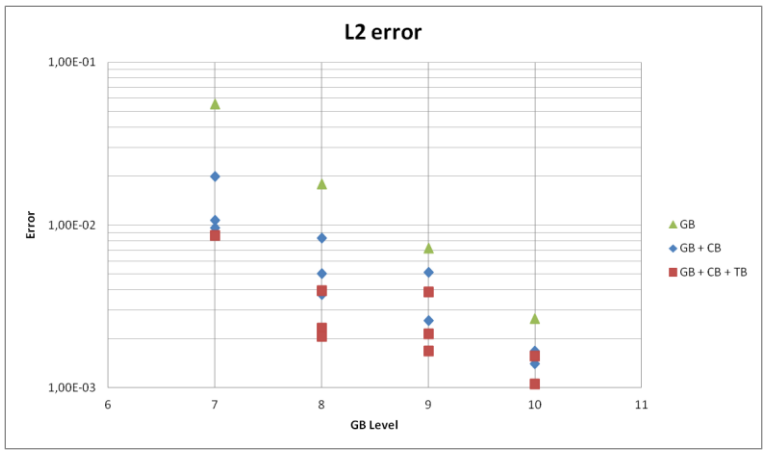


Figure 5-6 : Erreur entre la forme finale et initiale de la goutte pour différents critères de raffinement

Ce test permet de vérifier visuellement l'apparition d'une fragmentation numérique (le fluide est non-visqueux et sans tension superficielle), de quantifier l'erreur entre la forme initiale et finale de la goutte ainsi que de vérifier la conservation de la masse. La Figure 5-6 montre la diminution de l'erreur entre la forme finale et initiale de la goutte au fur et à mesure que la taille de la plus petit maille diminue (GB augmente). Aussi, nous constatons l'importance de combiner les trois critères de raffinement (GB, CB et TB). Nous remarquons que l'erreur peut être moindre avec les trois critères de raffinement comparé au critère GB tout seul avec un niveau supérieur, tel est le cas de GB 8 CB 12 TB 12 et GB 10.

L'analyse paramétrique de ce cas test permet de relever un jeu de paramètres idéal (GB 8 CB 12 TB 12, pour une simulation 2D) qui présente un très bon compromis entre précision et temps de calcul. Il faut prendre en compte que la formulation quadtree/octree est conditionnée par l'allocation de mémoire de l'ordinateur. Un niveau de raffinage supérieur et un domaine très inhomogène au niveau du raffinement peut ralentir le calcul à cause d'une mauvaise gestion de la mémoire informatique.

Pendant la fragmentation des structures de fluide (jet, ligaments et nappes), les structures subissent un processus de restructuration (élongation et diminution de son diamètre) puis par effets de tension de surface, une fragmentation en deux ou plusieurs gouttes ou structures plus petites. Pour pouvoir reproduire correctement ces caractéristiques à l'aide de la simulation numérique, nous devons dans un premier temps, éviter la rupture prématurée (numérique) des structures du fluide. Celle-ci est validée par le test de la goutte dans l'écoulement de vortex (ci-dessus). Pour la phase de rupture de ligament, nous proposons d'effectuer un test de validation concernant la fragmentation d'un ligament sans viscosité déstabilisé par les forces de tension de surface en configuration axisymétrique (Figure 5-7). Ce test nous permettra d'analyser les paramètres du code Gerris pour reproduire au mieux la phase de fragmentation d'un ligament liquide sans l'effet de la tension de surface.

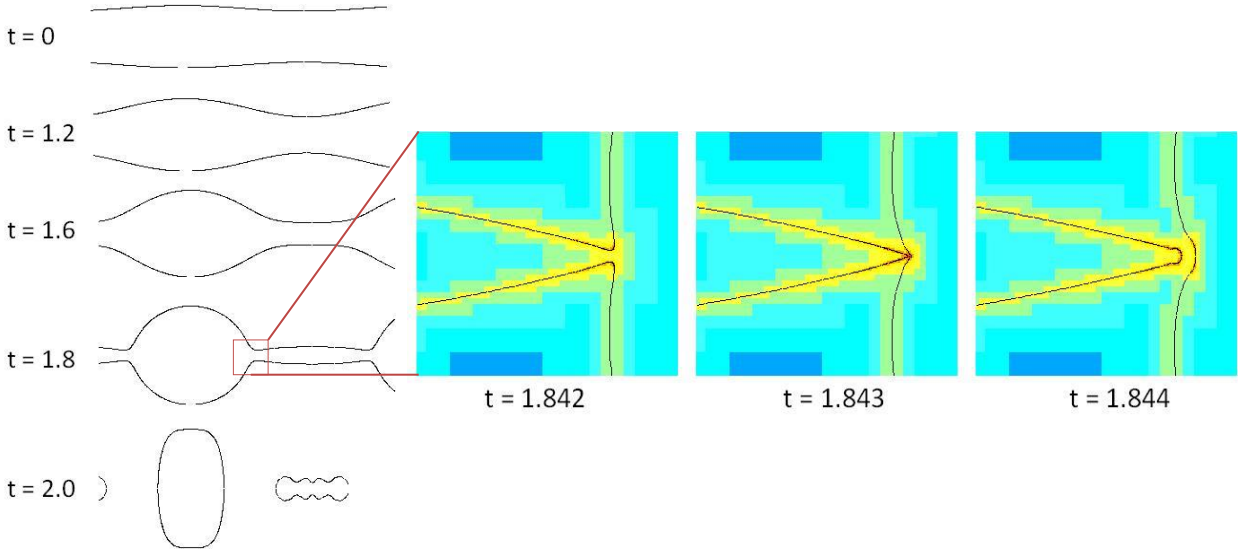


Figure 5-7 : Cassure du ligament. Comportement global (Gauche) et zoom sur la zone de rupture avec les niveaux de raffinage distingués par couleurs.

La fragmentation du ligament consiste en deux phases. En premier temps, une phase de déformation de l'interface en phase linéaire décrite par l'instabilité Rayleigh-Plateau. En deuxième temps, proche de la

zone de cassure, des effets non-linéaires ne peuvent plus être négligés et une solution non-linéaire de l'instabilité est requise. L'évolution temporelle du rayon proche de la cassure peut être décrite selon des arguments de similarité. Ces arguments préconisent une fonction du rayon de ligament dans la zone de cassure proportionnellement à : $a * (t_0 - t)^{\frac{2}{3}}$ où t_0 est le temps de rupture et a une constante.

Dans ce cas test, la position de l'interface du ligament perturbé est donnée par l'expression suivante :

Eq. 5-10 $$\boldsymbol{r = 0.2 * (1.0 + 0.1 * \sin(\pi x))}$$

Cette déformation initiale induit une déstabilisation du ligament à cause des effets de tension de surface. La précision du suivi de l'interface et du rayon dépend du niveau de raffinement utilisé. De même, au fur et à mesure que nous augmentons la résolution spatiale, grâce au nombre de courant (i.e. en respectant le critère Courant-Friedrichs-Lewy), nous incrémentons aussi la résolution temporelle. Nous utilisons trois critères différents pour le raffinement de l'interface (GB, CB et TB). La Figure 5-7 montre les différents états du ligament à divers instants; Nous constatons une très bonne résolution spatiale dans la zone de rupture et une fragmentation très contrôlée avec conservation de la masse (absence de petites gouttes satellites). Le rayon minimum du ligament avant rupture dépend du niveau de raffinement utilisé (Figure 5-8, gauche). Ce rayon minimal est calculé visuellement en repérant le moment où l'évolution du rayon du ligament en fonction du temps ne suit plus la loi de similarité $r = a * (t_0 - t)^{\frac{2}{3}}$ (Figure 5-8, droite).

Nous constatons que la simulation numérique est en très bon accord avec la solution théorique. Le rayon du jet converge vers la loi théorique au fur et à mesure que le niveau de raffinement augmente. Le moment où le rayon du jet ne suit plus la solution auto similaire correspond au moment où le rayon devient plus petit que deux fois la taille de la plus petite maille (écartement entre les courbes théorique et numériques vers $r_{min} \approx 0.0005$ (Figure 5-8, droite), valeur qui correspond approximativement à $(2 * 1/2^n)$ où $n = 12$ est le niveau maximum de raffinement.

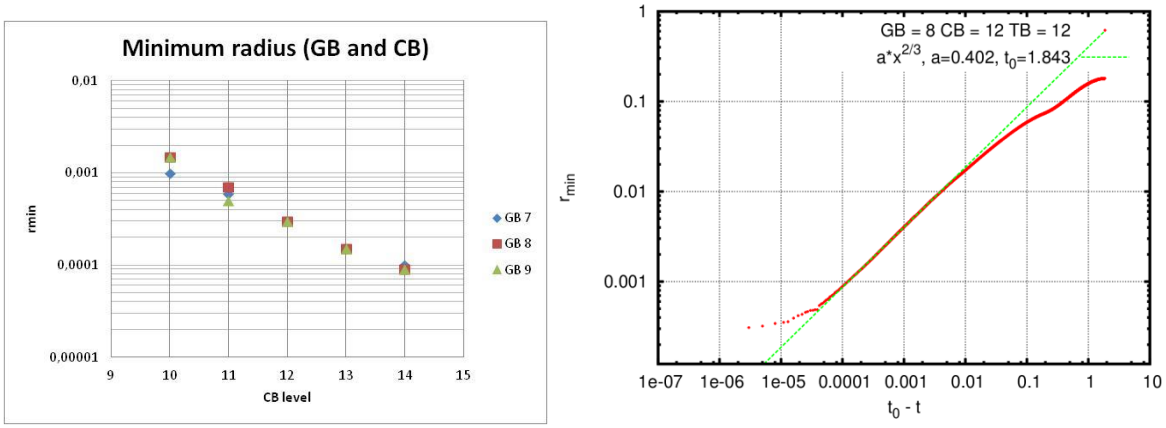


Figure 5-8 : Rayon minimale du jet avant que la fragmentation ne se produise (Gauche). Evolution temporelle du rayon du jet dans la zone de rupture pour un niveau de raffinement GB 8 CB 12 TB 12

Maintenant, Nous avons voulu regarder la précision nécessaire pour résoudre les gouttes qui seront générées pendant le processus de fragmentation. Pour ce faire, nous initialisons une goutte de taille variable dans un domaine très raffiné et nous laissons le maillage s'arranger selon les critères de raffinement choisis. Au fur et à mesure que la taille de la goutte diminue et devient du même ordre de grandeur que celle de la plus petite maille, les erreurs du volume de la goutte (par rapport au volume théorique) ainsi que la présence de courants artificiels augmentent. Comme nous constatons sur la Figure 5-9, si la taille de la goutte est trop petite, le code n'arrive pas à reproduire correctement sa forme et est susceptible de disparaitre par diffusion de la fonction T dans le domaine. De même, les courants artificiels générés par le modèle de tension superficielle peuvent avoir des vitesses comparables à celles de l'écoulement externe et donc produire une dispersion erronée.

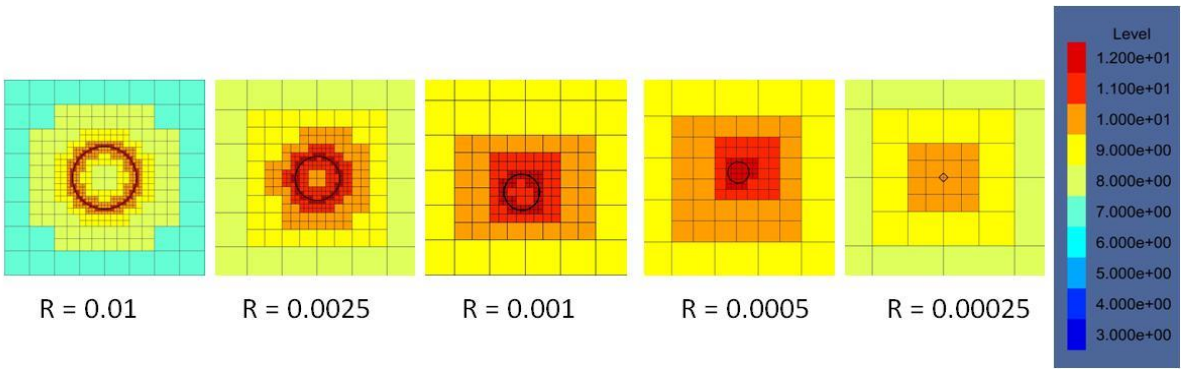


Figure 5-9 : Représentation numérique d'une goutte dans le logiciel Gerris. Des erreurs dans la forme de la goutte ainsi que la présence de courants artificielles sont de plus en plus évidents (forme non-sphérique et centre du cercle déplacé par rapport au centre du domaine) au fur et à mesure que la taille de la goutte diminue. La légende indique le niveau de raffinement du maillage

Pour éviter d'avoir des courants artificiels de grande intensité ou de perdre la masse du liquide à cause d'une faible résolution spatiale, il faudrait s'assurer que les plus petites gouttes soient résolues par au moins 10 points de maille sur le diamètre (Fuster et al., 2009). Ceci augmente considérablement le nombre de mailles, du niveau de raffinage et donc du temps de calcul. Une solution alternative est d'utiliser un suivi lagrangien de particules où nous transformons les gouttes qui sont mal résolues par le schéma VOF en particules sphériques dont nous calculons les trajectoires à l'aide de leur équation de quantité de mouvement ($F = m \cdot a$). Ces particules ne subissent plus de rupture mais elles peuvent coalescer à nouveau avec d'autres particules ou gouttes. Ces particules sont influencées par l'écoulement externe et elles ont une rétroaction à leur tour sur l'écoulement.

En conclusion, ces trois cas test nous ont permis d'obtenir des éléments quantitatifs sur le comportement du code dans les endroits critiques de l'interface comme les zones très étirées avec une faible épaisseur et une courbure importante. De même nous avons pu quantifier la taille minimale des gouttes résolues par le schéma VOF en fonction du niveau de raffinement et le passage de ces gouttes au champ lagrangien.

5.4 SUIVI LAGRANGIEN DE PARTICULES

La modélisation de particules lagrangiennes consiste dans une modélisation à deux voie (two-way coupling) pour le couplage Eulérien-Lagrangien (Tomar et al., 2010). D'une part, le fluide environnant et les champs de forces (pesanteur si elle existe) exercent une force sur les particules lagrangiennes. Ces particules en retour auront un effet sur le fluide environnant, ce qui est pris en compte comme un **terme source** dans l'équation de Navier Stokes. Le mouvement de particules est décrit par la deuxième loi de newton ou principe fondamentale de la dynamique :

$$m_p \frac{dv}{dt} = F_D + F_I + F_A + F_L$$

Où :

- m_p est la masse de la particule
- F_D est la force de trainée
- F_I est la force inertielle
- F_A est la force de masse ajoutée
- F_L est la force de portance

En contrepartie, le terme source de quantité de mouvement pris en compte dans les équations de Navier Stokes est Φ_p

$$\Phi_p = \lim_{v_f \to 0} \sum_{i=1}^{N_p} \frac{V_i}{V_f} \left[-\rho_{p_i} \frac{dv}{dt} + \rho \frac{Du}{dt} \right]$$

Où V_f est le volume de control de fluide qui contient N_p particules. Le terme de droite de l'équation est une combinaison de la force nette de réaction à cause des particules et des forces de poussée. Comme nous l'avons précisé précédemment, l'utilisation de particules lagrangiennes assure la conservation de la masse et une bonne résolution de la distribution de taille de particules. Ces particules lagrangiennes sont initialisées à partir d'une goutte eulérienne de petite taille qui respecte certaines conditions de

taille (expliquées ci-dessous). La goutte eulérienne est enlevée du domaine et transformé en une particule lagrangienne. Le maillage est ensuite de-raffiné selon les critères de raffinement exposés précédemment.

La condition à respecter pour la conversion de gouttes eulériennes[26] en lagrangiennes est basée sur le nombre de mailles qui comportent la goutte. Si le nombre de mailles comprises dans la goutte eulérienne est inférieur à un certain seuil, la conversion est effectuée. Les gouttes ont besoin d'un nombre minimum de mailles pour être résolues correctement (Fuster et al., 2009). Dans cette publication, les auteurs ont étudié la précision de la représentation de la tension de surface pour une goutte (2D) avec un fort rapport de densité par rapport au fluide environnante (1/1000). La goutte sans viscosité oscille sous l'effet de la tension de surface et légèrement amortie par la viscosité numérique. Le rayon initial de la goutte est donnée par :

Eq. 5-11 $$\boldsymbol{r = r_0 + \epsilon \cos(n\theta)}$$

Avec r_0 le rayon moyen de la goutte, ϵ l'amplitude des oscillations à l'interface de la goutte et n un entier décrivant le mode d'oscillation. La Figure 5-10 nous montre l'erreur sur la fréquence d'oscillation de la goutte pour le mode d'oscillation deux. La figure montre une meilleure précision du code Gerris par rapport aux méthodes utilisés par Torres et Brackbill ainsi que par Herrmann (se référer à l'article (Fuster et al., 2009) pour plus d'information). L'erreur sur la fréquence d'oscillation de la goutte diminue au fur et à mesure que le nombre de mailles par diamètre de la goutte augmente. D'après la Figure 5-10, une goutte peut être bien résolue (erreur sur la fréquence aux alentours de 1%) pour à peu près 10 points de maille par diamètre. Nous utilisons ce critère pour définir la conversion de gouttes eulériennes en particules lagrangiennes. Cependant, nous considérons que ce seuil est sévère pour nos simulations car nous avons très peu d'intérêt à reproduire correctement l'oscillation des petites gouttes car elles seront pour la plupart converties en particules lagrangiennes. Le seuil de conversion dans notre cas varie entre 5 et 10 points de maille par diamètre de goutte.

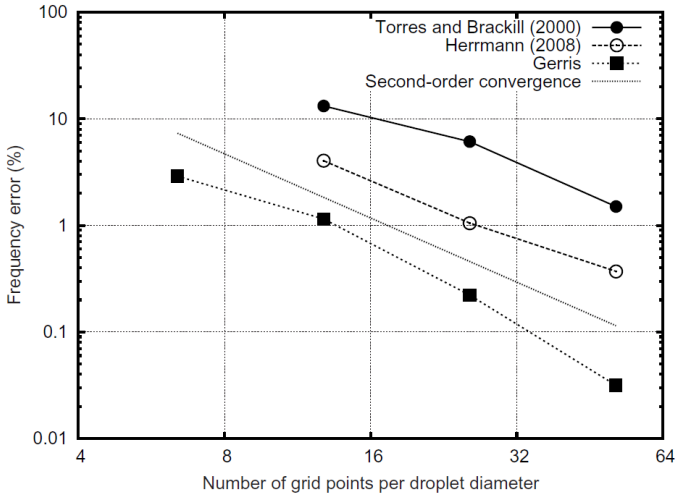


Figure 5-10 : Erreur de convergence entre les fréquences théorique et calculée pour le deuxième mode d'oscillation d'une goutte liquide

Les nouvelles particules lagrangiennes auront la masse volumique correspondant au champ $T = 1$ (masse volumique de la goutte). La position initiale des particules est définie par le centre de masse de la goutte eulérienne avant conversion. La vitesse de la particule est calculée en fonction de la quantité de mouvement moyenne dans la goutte (Tomar et al., 2010). De la même manière, les gouttes lagrangiennes qui sont proches d'un champ résolu VOF reviendront vers le champ T par coalescence. Les forces de couplage seront transformées en une vitesse d'impulsion.

[26] Nous nous référons à « gouttes » pour les gouttes résolues avec le champ VOF-PLIC et nous référons à « particules » pour les gouttes résolues avec le suivi Lagrangien

6 CHAPITRE 6 : SIMULATIONS DE LA FRAGMENTATION D'UNE GOUTTE DE METAL LIQUIDE DANS UN ECOULEMENT D'EAU

Nous avons effectué des simulations numériques de gouttes de métal liquide (gallium) dans l'eau dont nous disposons de résultats expérimentaux sur la taille finale de fragments (Gelfand, 1996; Kim, 1983). Ces gouttes de gallium ont un diamètre de 3 mm et sont soumises à un écoulement d'eau à différentes vitesses en absence de gravité. Le nombre de Weber aérodynamique de la goutte varie entre 1 et 533 (Valeurs estimées selon les conditions de la phase de prémélange en ICR). Les propriétés physiques des fluides sont (sous-indice d correspond à la goutte, c correspond au fluide externe et R correspond au rapport goutte/fluide environnant):

$$\rho_d = 6070\frac{kg}{m^3}, \qquad \rho_c = 1000\frac{kg}{m^3}, \qquad \rho_R = 6.07$$

$$\mu_d = 1.6e-3\ Pa\cdot s,\ \ \mu_c = 1.0e-3\ Pa\cdot s,\ \ \mu_R = 1.6$$

$$\sigma = 0.7\ N/m$$

Les conditions de l'interaction sont données par les nombres adimensionnels de Weber et de Reynolds. Ces nombres ont été calculés avec les propriétés physiques du fluide externe et en prenant en compte comme dimension caractéristique la taille initiale de la goutte (D_0) :

$$We = \frac{\rho_0 D_0 U_0^2}{\sigma} = \frac{\rho_c D_0 U_c^2}{\sigma}, \qquad Re = \frac{\rho_0 D_0 U_0}{\mu_0} = \frac{\rho_c D_0 U_c}{\mu_c}$$

Dans la littérature nous trouvons certains publications qui étudient la fragmentation de gouttes à partir de simulations 2D (Han and Tryggvason, 2001, 1999; Zaleski et al., 1995). Nous avons donc, effectué des simulations 2D axisymétriques pour de nombres de Weber de 1 jusqu'à 6. Ces simulations nous donnent des informations sur le régime d'oscillation et nous permettent de calculer plus facilement les fréquences d'oscillation de gouttes. Pour obtenir des données plus précises sur les régimes de fragmentation, nous avons effectué des simulations 3D pour des nombres de Weber entre 3 et 533 (voir Tableau 9). Ces simulations utilisent les critères de raffinement exposées précédemment (chapitre 5) ainsi que la conversion de petites gouttes VOF en particules lagrangiennes. Le domaine de calcul est présenté en Figure 6-1:

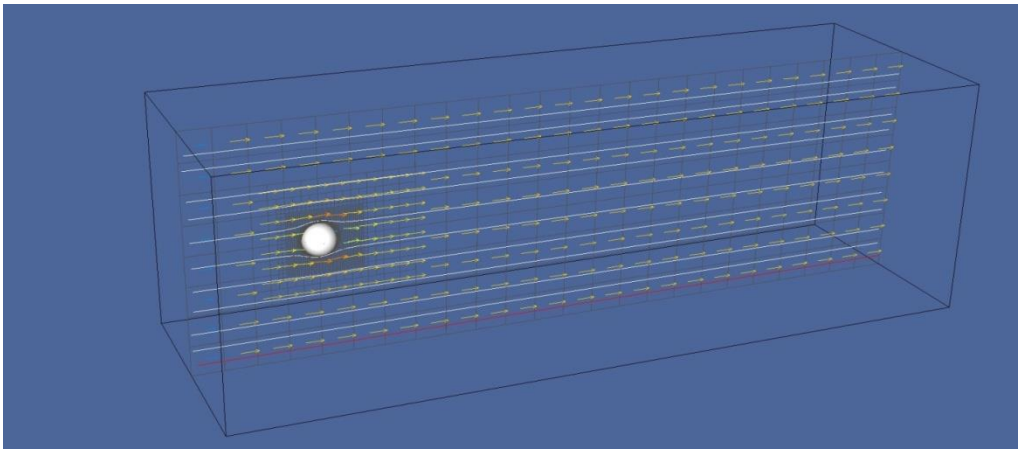


Figure 6-1 : Domain de calcul (3D) pour la fragmentation d'une goutte de gallium par un écoulement d'eau

Les dimensions du domaine de calcul sont ($7.5D0, 7.5D0, 22.5D0$), ce qui assure un faible impact des conditions aux limites sur l'écoulement et sur la goutte. La longueur dans la direction de l'écoulement assure en théorie (longueur maximum calculée en fonction du $t^* = 5$ et de la vitesse maximale de l'écoulement) une fragmentation complète avant que la goutte ne sorte du domaine.

Les conditions aux limites assurent aussi un écoulement le moins perturbé possible, cependant, nous limitons la dimension du domaine de calcul à cause des temps de calculs élevés. Les conditions aux limites sont les suivantes :

- Vitesse d'entrée à gauche du domaine
- Pression de sortie à droite du domaine
- Condition de glissement de vitesses sur les parois latérales (haut, bas, devant et derrière)

6.1 GRILLE DE CALCUL

Type de simulation	Weber	Reynolds (fluide environnant)	Temps caractéristique de fragmentation	Vitesse du fluide environnant
2D	0,59	1117,69	1,98E-02	3,73E-01
2D	1,19	1580,66	1,40E-02	5,28E-01
2D	1,78	1935,90	1,14E-02	6,46E-01
2D	2,37	2235,39	9,91E-03	7,46E-01
2D - 3D	2,96	2499,24	8,87E-03	8,35E-01
2D	3,56	2737,78	8,09E-03	9,14E-01
2D	4,15	2957,14	7,49E-03	9,87E-01
3D	4,45	3060,93	7,24E-03	1,02E+00
2D	4,74	3161,32	7,01E-03	1,06E+00
2D	5,34	3353,08	6,61E-03	1,12E+00
2D – 3D	5,93	3534,46	6,27E-03	1,18E+00
3D	7,41	3951,65	5,61E-03	1,32E+00
3D	8,89	4328,81	5,12E-03	1,45E+00
3D	10,38	4675,65	4,74E-03	1,56E+00
3D	11,86	4998,48	4,43E-03	1,67E+00
3D	13,34	5301,69	4,18E-03	1,77E+00
3D	14,82	5588,47	3,97E-03	1,87E+00
3D	17,79	6121,86	3,62E-03	2,04E+00
3D	23,72	7068,92	3,13E-03	2,36E+00
3D	35,57	8657,62	2,56E-03	2,89E+00
3D	47,43	9996,96	2,22E-03	3,34E+00
3D	59,29	11176,94	1,98E-03	3,73E+00
3D	71,15	12243,73	1,81E-03	4,09E+00
3D	177,87	19359,03	1,14E-03	6,46E+00
3D	355,74	27377,81	8,09E-04	9,14E+00
3D	533,61	33530,83	6,61E-04	1,12E+01

Tableau 9 : Grille de calculs de fragmentation de gouttes de gallium par un écoulement d'eau

6.2 DESCRIPTION DU PROCESSUS DE FRAGMENTATION D'UNE GOUTTE

Les Figure 6-2 et Figure 6-3 montrent les images de simulations numériques pendant la phase de déformation pour différents nombres de Weber.

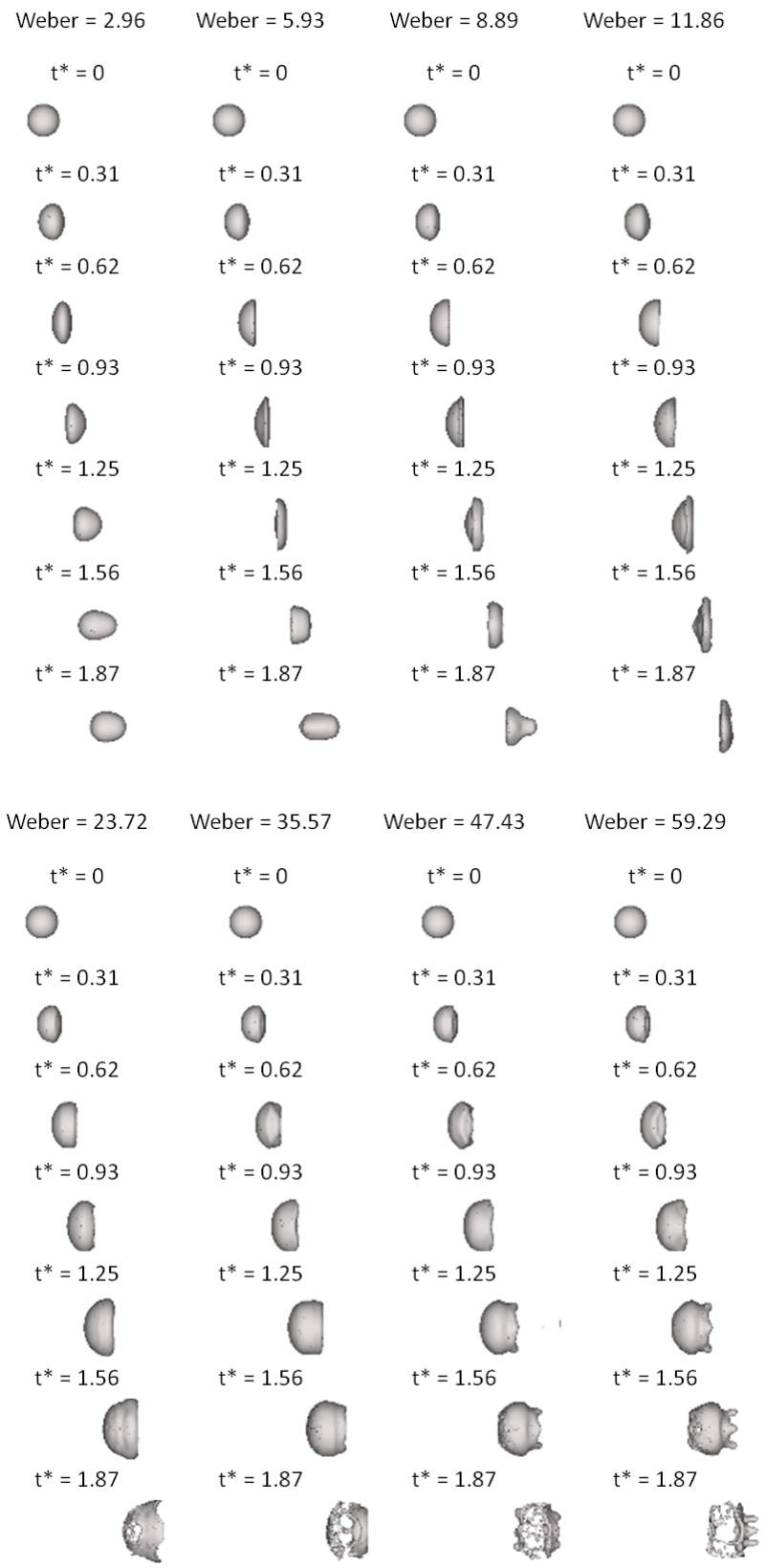


Figure 6-2 : Déformation d'une goutte de Gallium perturbée par un écoulement d'eau à différentes vitesses. Le temps affiché correspond au temps adimensionné par le temps caractéristique de fragmentation de Ranger et Nicholls

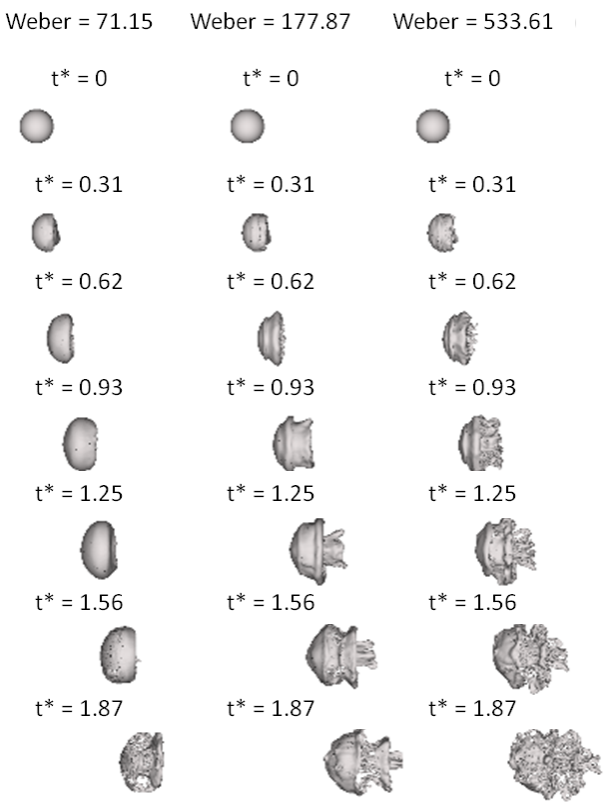


Figure 6-3 : Déformation d'une goutte de Gallium perturbée par un écoulement d'eau à différentes vitesses (Weber entre 71.15 et 533.61). Le temps affiché correspond au temps adimensionné par le temps caractéristique de fragmentation de Ranger et Nicholls

Dans les premiers instants de l'interaction, la goutte se déforme en prenant une forme de demi-ellipsoïde du type concave (voir Figure 6-4). Nous constatons que la loi de transition (Eq. 6-1) entre les formes 'dôme' et 'concave' prise de la publication de (Hsiang and Faeth, 1995) ne s'accorde pas bien avec nos résultats numériques.

Eq. 6-1 $\boldsymbol{We = C\,Re^{\frac{1}{2}}}$**; pour une onde de choc,** $\boldsymbol{C = 0.7}$

La transition entre les formes dôme et concave est défini par le rapport entre les contraintes de cisaillement et les contraintes de tension de surface. La loi de Hsiang considère que les contraintes de cisaillement sont données par une couche limite laminaire, où sa taille est proportionnelle au diamètre initial des gouttes. Les contraintes de tension de surface sont données par $\frac{\sigma}{D_0}$ où D_0 donne un ordre de grandeur de la courbure de la goutte (pris égale au diamètre initial de la goutte).

Les simulations numériques (Figure 6-2 et Figure 6-3) montrent que, quelles que soient les valeurs du nombre de Weber étudiées, la forme privilégiée de la goutte est du type 'concave'. Il faut cependant noter que même si dans les résultats expérimentaux utilisées dans (Hsiang and Faeth, 1995), quelques configurations liquide/liquide sont étudiées, les propriétés physiques de fluides utilisés sont différentes par rapport à notre cas d'étude.

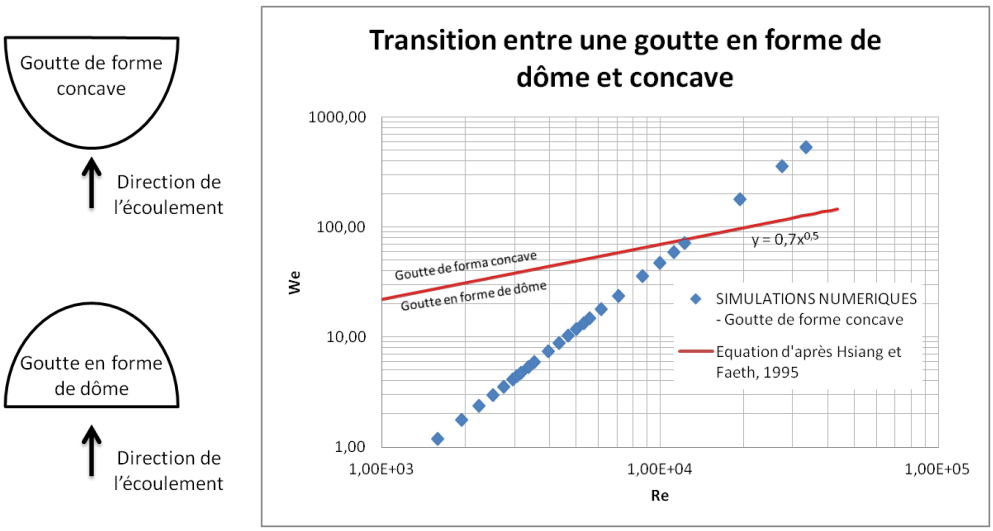


Figure 6-4 : Comparaison entre la transition entre forme de dôme et concave de la goutte donné par Eq. 6-1 (Hsiang and Faeth, 1995) et les simulations numériques. La forme des gouttes dans les simulations est toujours concave.

Une étude sur le mécanisme de déformation de la goutte est nécessaire pour comprendre comment une des formes 'dôme' ou 'concave' est privilégiée pendant l'interaction. Une des pistes d'étude concerne la présence d'un anneau de vortex derrière la goutte. De même, le fait d'avoir une forte tension de surface, un faible rapport de densité et un faible rapport de viscosité pourront être importants dans la sélection du mode de déformation.

Dans le régime présenté dans la Figure 6-2 pour $We = 8.89$, nous remarquons l'inversion des bords de la nappe et du sac, faisant une transition d'une forme concave vers une forme de dôme. Ceci est similaire à ce qui se passe dans le régime de fragmentation en sac dans le cas liquide/gaz, cependant, à cause des forces de tension superficielle, la nappe revient sur le centre et un gros blob de liquide est à nouveau formé ($t^* = 1.56$). Ce blob s'étire dans le sens axial (sens de l'écoulement) potentiellement à cause de l'inertie qu'acquière le liquide et aussi à l'influence du vortex autour de la goutte. Nous constatons donc la rupture du ligament pour un nombre de Weber supérieur à six. L'étirement du ligament avant la fragmentation est d'autant plus grand que le Weber est important. La taille des particules générées par la rupture du ligament varie de manière inverse au nombre de Weber. Un ligament plus étiré qu'un autre produira au moment de la rupture plus de fragments qu'un autre avec une faible déformation axiale.

Si nous augmentons le nombre Weber, jusqu'à une valeur de $12 < We < 18$, le processus de déformation de la goutte semble être plus important. La goutte se déforme jusqu'à un point tel que la nappe qui se forme devient trop fine pour qu'une instabilité arrive à la percer. Après la formation d'un trou dans la nappe, un réseau du type « toile d'araignée » se développe. Ce réseau est formé par des ligaments et des nœuds qui produiront une polydispersion de gouttes. Dans ce régime de fragmentation par rupture de nappe, la nappe contient une masse du liquide faible par rapport à la masse cumulée dans l'anneau de la goutte, lequel se referme après la fragmentation de la nappe. Les temps maximaux de nos simulations ne permettent pas de conclure sur le devenir du blob formé.

Si nous augmentons le nombre de Weber à des valeurs comprises entre $18 < We < 180$, la nappe s'enroule autour de l'anneau de vortex et puis se fragmente à cause de son faible épaisseur. L'identification **d'un vortex dans la goutte et dans l'écoulement externe, ainsi que leur interaction pendant la fragmentation est une première dans l'étude de la fragmentation de gouttes de métal liquide dans l'eau. N**ous allons parler plus en détail de cette interaction goutte-vortex dans les sections suivantes concernant les différents régimes de fragmentation. Le vortex s'avère utile pour comprendre la morphologie de la goutte pendant la fragmentation ainsi qu'il permet de mieux discerner les différents régimes de fragmentation.

Le dernier régime est bien plus complexe, avec formation de plusieurs dizaines de ligaments derrière la goutte. Les structures de vortex sont très complexes et bien plus petites que celles formées dans les régimes à plus bas Weber. Le nombre de gouttes augmente significativement avec des tailles plus petites et diverses. Pour distinguer les différents régimes de fragmentation, nous avons établi une classification préliminaire comme suit:

Régime	***Gamme de Weber***	***Description***
Oscillatoire	0 – 6	Faible déformation de la goutte et oscillation sans fragmentation
Fragmentation par élongation	6-12	Déformation du type concave suivi d'une déformation dans le sens de l'écoulement. Le ligament formé est étiré jusqu'à la rupture produite par des effets de tension de surface
Fragmentation par rupture de nappe	12-18	Déformation du type concave avec formation d'une nappe fine et d'un anneau. La nappe se fragmente et l'anneau se referme sur l'axe de la goutte
Fragmentation par enroulement autour de l'anneau tourbillonnaire et par rupture de nappe	18-180	Déformation du type concave avec enroulement de la nappe sur l'anneau tourbillonnaire. La nappe se fragmente quand elle devient trop fine et diverses structures complexes sont formées par l'anneau. Pour des Weber importants, lorsque la nappe s'enroule autour de l'anneau tourbillonnaire, elle peut se fragmenter, en générant des fragments qui impacteront la nappe principale et contribueront à sa rupture.
D'arrachement, de distorsion et de rupture	>180	Faible déformation de la goutte, formation et séparation de vagues de liquide qui interagissent avec des structures tourbillonnaires. Ce processus continue jusqu'au moment où la nappe principale se fragmente par des effets capillaires.

Tableau 10 : Classification de divers régimes de fragmentation pour le cas d'une goutte de gallium soumise à un écoulement d'eau (système liquide/liquide)

Les différentes simulations nous ont permis de déterminer les nombres de Weber correspondants aux différentes transitions entre ces régimes de fragmentation. Ceci répond à plusieurs objectifs proposés :

- Nombre de Weber critique : Le nombre de Weber qui marque le début de la fragmentation de la goutte est classiquement considéré aux alentours de $We \approx 12$.
- Différents régimes de fragmentation de gouttes de métal liquide : 1 régime d'oscillation et 4 régimes de fragmentation sont proposés. Ces régimes sont différents de ceux couramment adoptés pour les configurations liquide/gaz.
- Etudier quantitativement la fragmentation secondaire : Des données concernant la taille des fragments, le nombre de fragments, le temps de fragmentation, le diamètre de Sauter, etc. font partie de la grande quantité de résultats obtenues d'après ces simulations numériques.

6.2.1 RÉGIME OSCILLATOIRE (WE < 6):

- Simulations 3D : We = 2.96, 4.45
- Simulations 2D : We = 0.59, 1.19, 1.78, 2.37, 2.96, 3.56, 4.15, 4.45, 4.74, 5.34, 5.93

Dans le régime oscillatoire, les gouttes soumises à des perturbations hydrodynamiques par l'écoulement environnant, se déforment et oscillent, sans se fragmenter. Les gouttes se déforment fortement au début de l'interaction à cause du fort gradient de vitesse entre la goutte et l'écoulement environnant. Nous pouvons évaluer l'oscillation des gouttes par deux dimensions caractéristiques de déformation montrées dans la Figure 6-5. Ces dimensions sont définies comme la différence de position entre le point maximum et minimum dans le sens parallèle à l'écoulement (dimension h) et dans le sens perpendiculaire à l'écoulement (dimension y).

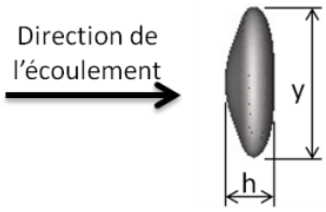


Figure 6-5 : Dimensions caractéristiques de la déformation de la goutte. y : Déformation dans le sens perpendiculaire à l'écoulement ; h : déformation dans le sens de l'écoulement

La déformation de la goutte dans la sens perpendiculaire à l'écoulement est d'autant plus grande que le nombre de Weber augmente, comme le montre la Figure 6-6 où nous visualisons la déformation de la goutte dans la direction y normalisée par le diamètre de la goutte non-déformée en fonction du temps.

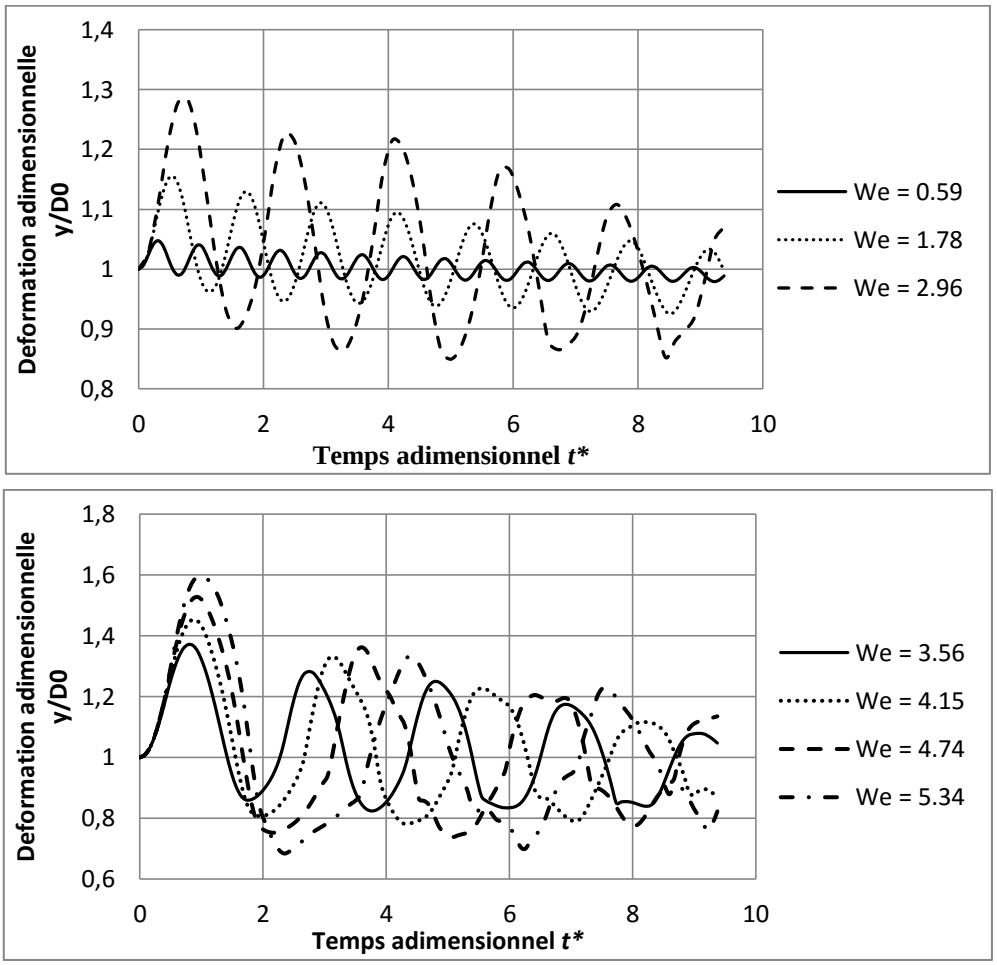


Figure 6-6 : Variation de la surface (aire interfaciale) de gouttes de gallium soumises à un écoulement d'eau à différents nombres de Weber

Les caractéristiques d'oscillation de la goutte sont étroitement liées au nombre de Weber. Ceci défini l'amplitude des oscillations ainsi que la fréquence. Premièrement, nous constatons l'augmentation de l'amplitude d'oscillation : $a \approx 1.04$, pour un $We = 0.59$ et $a \approx 1.6$, pour un $We = 5.34$. La goutte connait deux états déformés, un dans le sens perpendiculaire à l'écoulement externe et un autre dans le sens de l'écoulement. Le points maximum des courbes de déformation présentées dans la Figure 6-6 correspond à une déformation de type oblate 'a' et les minimums correspondent à l'état déformé de type prolate 'b' (voir Figure 6-7). Nous avons remarqué que l'aire crée lors de la déformation du type 'a' est presque le double de celle du type 'b'.

Figure 6-7 : Etats de déformation maximale de la goutte. a) déformation dans le sens perpendiculaire à l'écoulement (nappe). b) déformation dans le sens de l'écoulement (ligament)

La morphologie de la goutte pour chacun de ces deux états de déformation est très différente. Le premier état (dans le sens perpendiculaire à l'écoulement) ressemble à un disque (sphéroïde oblate), avec une section transversale (face à l'écoulement externe) importante. Pour le deuxième état (dans le sens de l'écoulement), la goutte prend une forme « prolate » avec une section transversale (par rapport à la direction de l'écoulement) plus petite que le premier état de déformation. Les simulations numériques effectues nous permettent de quantifier les oscillations des gouttes en fonction du nombre de Weber, lesquelles peuvent modifient la dispersion de la goutte et la surface d'échange pour les transferts thermiques dans une situation d'ICR. La Figure 6-8 montre les oscillations de la goutte ainsi que son déplacement en fonction du temps, adimensionnées par le diamètre de la goutte pour un $We = 2.96$. Nous constatons que le déplacement de la goutte est influencé par ses propres oscillations (Figure 6-8, gauche).

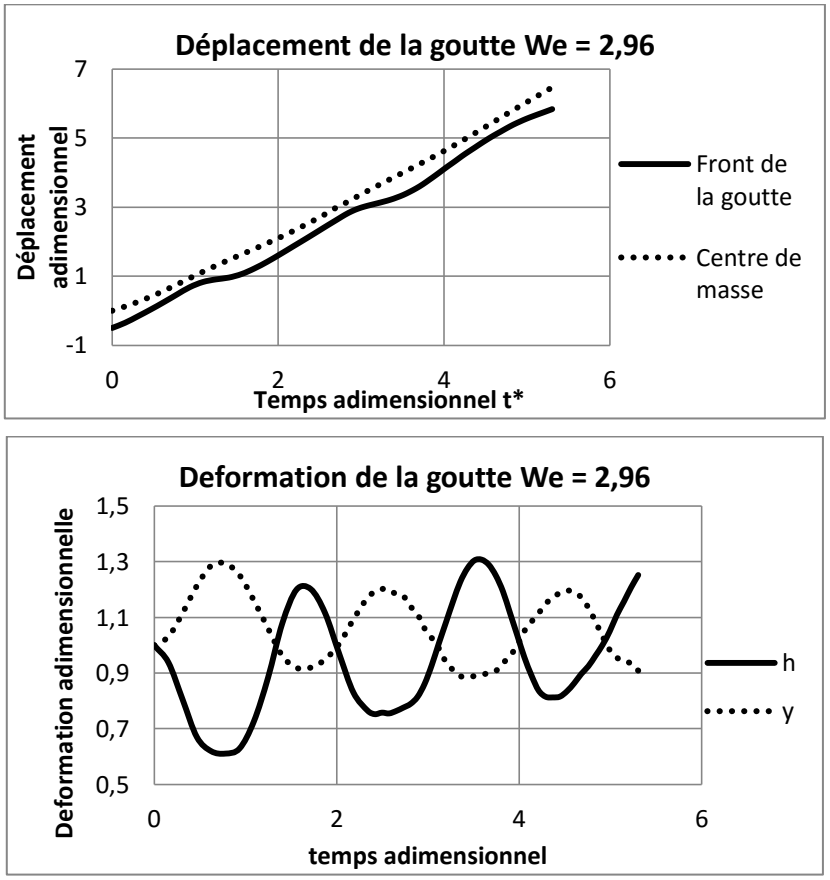


Figure 6-8 : Déplacement de la goutte dans le sens de l'écoulement et déformation de la goutte dans le sens perpendiculaire et parallèle à l'écoulement ($We = 2.96$)

Nous constatons une atténuation de l'amplitude d'oscillation de la goutte en fonction du temps probablement à cause de la dissipation de l'énergie par la viscosité. Nous avons déterminé la fréquence d'oscillation de la goutte par une transformée de Fourier sur la déformation dans le sens perpendiculaire à l'écoulement[27] (voir Figure 6-10). Nous constatons une diminution de la fréquence d'oscillation de la

[27] Nous avons mesuré la fréquence d'oscillation par une transformée de Fourier ainsi que manuellement en repérant chaque maximum et leur temps associé. Nous trouvons que les fréquences obtenues sont quasi-identiques pour les deux méthodes.

goutte au fur et à mesure que le nombre de Weber augmente. Ceci peut être expliqué par une plus grande déformation de la goutte à cause de plus fortes perturbations hydrodynamiques.

Les information obtenues sont pertinentes pour valider un modèle de déformation (du type DDB (Ibrahim et al., 1993) ou TAB (O'Rourke and Amsden, 1987)). Ces modèles permettent de faire une analyse phénoménologique des propriétés physiques beaucoup moins couteuse que les simulations numériques. Récemment, N. Rimbert (Rimbert et al., 2015, 2014) propose un modèle d'oscillation de gouttes basé sur la modélisation DDB. Ce modèle analytique est basé sur la théorie des écoulements potentiels utilisé pour développer l'équation d'un oscillateur non-linéaire de la déformation de la goutte (valable pour une gamme restreinte de nombres de Weber). Cette équation de déformation est obtenue en faisant un équilibre entre l'énergie cinétique de déformation, la création de surface, le travail de pression et la dissipation visqueuse. Il est supposé que la goutte du diamètre D_0 se déforme dans un sphéroïde oblate sous l'action de l'écoulement externe (voir annexe 8.11 pour plus de détail sur la modélisation). L'équation d'équilibre d'énergie dans la goutte est présentée en eq. 6-2 :

eq. 6-2 $$\frac{dK}{dt} + \frac{dE_s}{dt} = W_p + D$$

Avec K l'énergie cinétique de la goutte, E_s l'énergie de surface, W_p le travail de pression et D la dissipation visqueuse à cause du mouvement interne dans la goutte. L'écoulement du fluide à l'intérieur de la goutte est considéré bidimensionnel et axisymétrique du type extensionnel. La dissipation visqueuse est calculée basé sur cet écoulement extensionnel. L'énergie de surface est calculé en supposant une goutte de forme sphéroïde protale. Le terme de pression du fluide environnante est calculé en faisant l'hypothèse d'un écoulement potentiel autour d'une sphère (théorie des fluides potentiels de Joseph (Joseph, 2003)).

Ce modèle analytique proposé par N. Rimbert a été modifié pour prendre en compte certains phénomènes relevés dans les simulations numériques, lesquels divergent des conditions donnés par l'hypothèse des écoulements potentielles. A partir du champ de vitesse de l'écoulement à l'intérieur et à l'extérieur de la goutte, nous constatons la présence de deux anneaux de vortex. Le premier se développe dans le sillage de la goutte et l'autre se développe à l'intérieur de la goutte (voir Figure 6-9). Ceci montre que les hypothèses du fluide à l'intérieur et à l'extérieur de la goutte ne sont pas valides pour tous les nombres de Weber étudies.

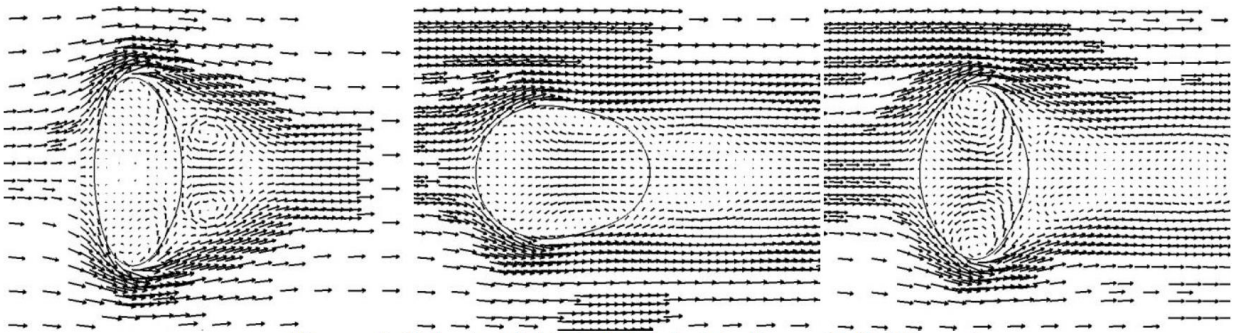


Figure 6-9 : Champ de vitesse pour $t^* = 0.69, 1.46$ et 2.16. Nombre de Weber et de Reynolds égales à $We = 2.96$ et $Re = 2499.24$

La présence de ces vortex se traduit par des modifications sur les termes de dissipation visqueuse et sur le terme de travail de pression. Concernant le champ de pression, nous constatons une région de faible pression dans la périphérie de la goutte (équateur) où les vitesses du fluide sont les plus grandes. Cette faible pression provoque la déformation et une dissymétrie de pression autour de la goutte entre la face avant et arrière, ce qui provoque l'entrainement. Nous avons introduit un coefficient de correction de la pression, lequel prend en compte une pression à l'arrière de la goutte réduite (à cause de la présence du vortex).

La fréquence d'oscillation donnée par cette méthode peut être approchée par la fonction suivante :

Eq. 6-3 $$f = \left(\frac{1.49}{We} - 0.15\right)^{1/2}$$

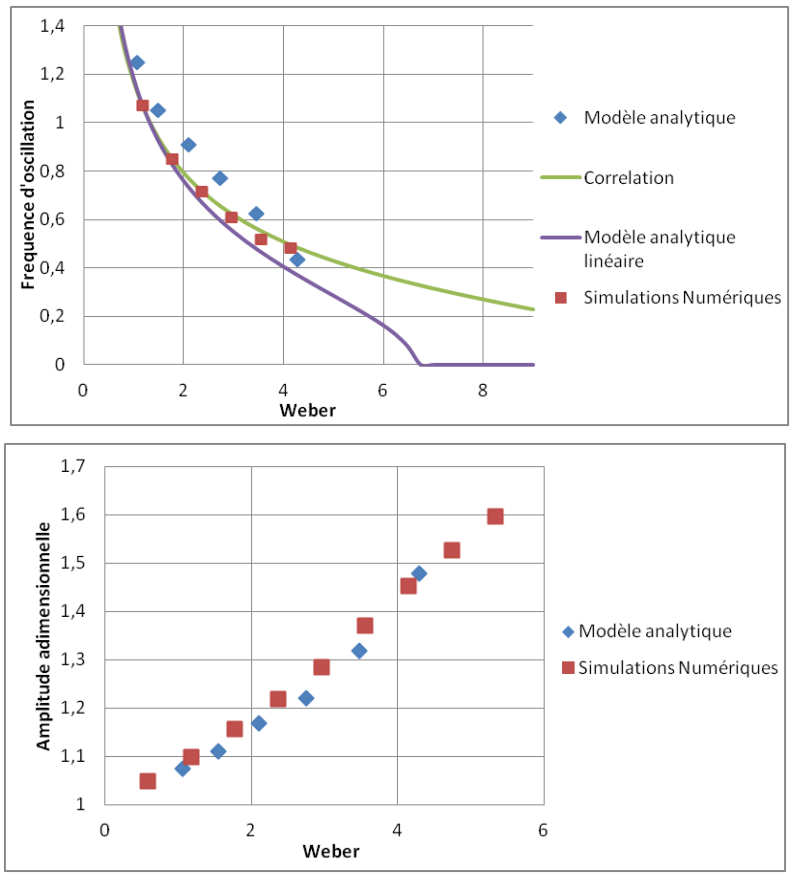


Figure 6-10 : Fréquence et amplitude d'oscillation de gouttes en fonction du nombre de Weber

Nous constatons d'après la Figure 6-10 une bonne concordance entre les fréquences d'oscillation obtenues dans les simulations numériques et celle du modèle analytique. La concordance de modèles est restreinte au régime d'oscillation de la goutte en phase linéaire ($We < 4$). Pour les Webers supérieurs, il est cependant difficile de déterminer une fréquence d'oscillation car celles-ci deviennent non-linéaires.

En regardant le champ de vorticité dans le sillage de la goutte (Figure 6-11), nous constatons que l'anneau de vorticité est créé quand la goutte acquière une forme de sphéroïde oblate. Le vortex se sépare quand la goutte devient protale. Postérieurement, un nouveau vortex se forme quand la goutte devienne oblate et ainsi successivement, produisant une allée complexe de vortex. Il semble que la fréquence de formation des vortex n'est pas contrôle par les instabilités de l'écoulement externe (tel que dans le cas de l'écoulement autour d'une sphère solide) sinon qu'elle est contrôlée par l'oscillation de la goutte.

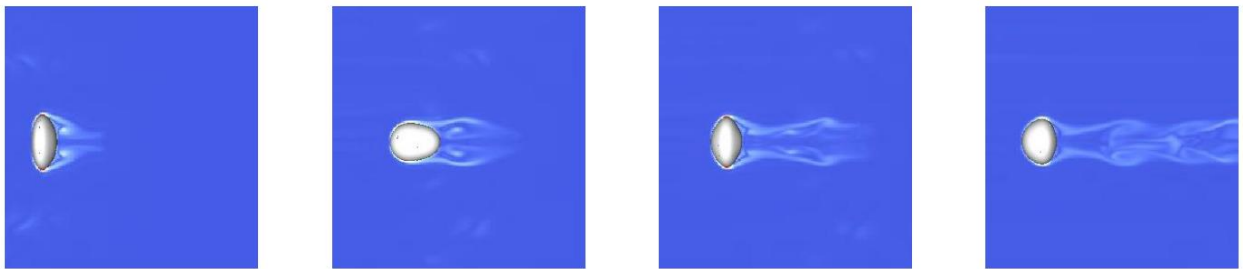


Figure 6-11 : Iso-contours de vorticité dans le sillage de la goutte pour $t^* = 0.69, 1.46, 2.16$ et 3.69. $Re = 2499.24$, $We = 2.96$

Le terme vortex est utilisé pour désigner un mouvement de rotation du fluide des particules autour d'un axe droit ou courbé. Malgré qu'ils soient présents dans la plupart des écoulements, les vortex sont souvent mal représentés car les variables utilisées (par exemple, lignes de courant) peuvent être dépendantes du référentiel choisi. Afin d'étudier les caractéristiques de l'interaction entre la goutte et le vortex, de manière indépendante du référentiel, nous utilisons le critère de détection de vortex λ_2. Ce critère détermine plus précisément les régions qui appartiennent aux structures du vortex (voir annexe 8.12). Dans le code Gerris, nous pouvons caractériser les vortex à l'aide du critère λ_2 (Jeong and

Hussain, 2006). Ce critère est un des plus connus et il est caractérisé par une bonne précision pour détecter des structures de vortex même en présence d'un fort cisaillement proche d'une couche limite.

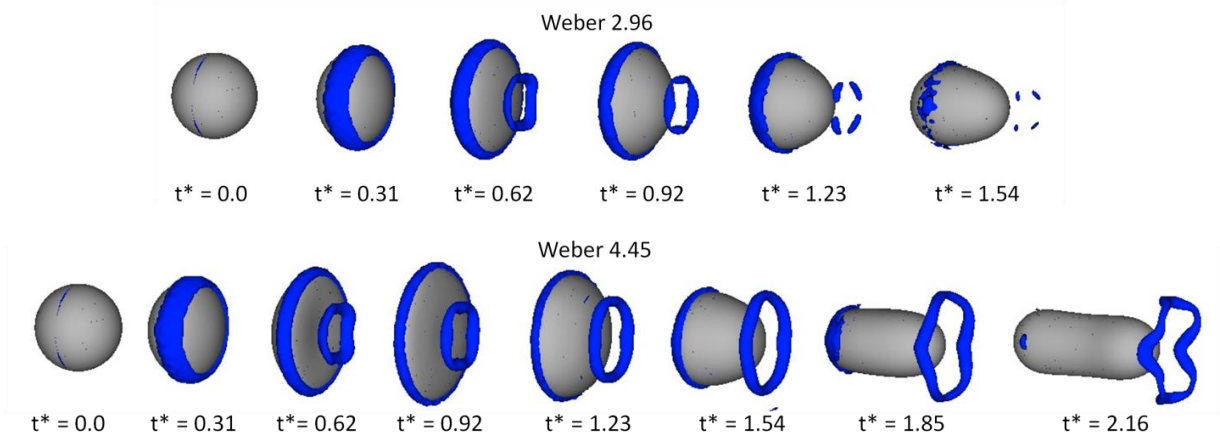


Figure 6-12 : Interaction goutte-vortex ($We = 2.96$ et $We = 4.45$). La goutte est représentée par la couleur grise et le vortex (détecté selon le critère λ_2) est en couleur bleue

Dans la Figure 6-12, nous visualisons la goutte de gallium et les structures de vortex identifiées grâce au critère $\lambda_2 < -0.000066$ (voir annexe 8.14 pour plus de détail sur l'identification des vortex). Nous constatons la présence d'un vortex dans le sillage de la goutte, lequel semble influencer la déformation de la goutte. Pour $We = 2.96$, le vortex disparait quand la goutte prend une forme allongée dans le sens de l'écoulement, cependant, pour $We = 4.45$, ce vortex est présent pendant plus longtemps et contribue potentiellement à l'allongement de la goutte dans le sens de l'écoulement. Pour calculer plus précisément l'influence du vortex sur la fragmentation, nous avons développé une méthode pour quantifier l'intensité du vortex et son évolution temporelle.

Une fois les vortex identifiés, leur intensité est calculée à l'aide de l'intensité locale de rotation. Selon un concept généralement utilisé, l'intensité « force » d'un vortex est calculée comme la circulation le long des limites du vortex ou, de manière équivalente, en utilisant le théorème de Green, comme l'intégrale de surface de la vorticité sur une section plane transversale au vortex (Kolář, 2011).

Eq. 6-4 $$\oiint \vec{\omega} \cdot d\vec{A}$$

Le calcul de cette intégrale demande la connaissance du plan transversale au vortex en un point donné. Comme le montre la Figure 6-12, les vortex ont une forme d'anneau de caractère 3D à partir de laquelle est difficile de déduire un plan normal au vortex basé directement sur les coordonnées spatiales des points appartenant au vortex. Pour calculer le plan normal, nous utilisons la méthode de squelettisation expliqué en détail en annexe 8.13. La méthode consiste à extraire les lignes médianes de volumes pleins, lesquelles représentent le squelette du volume, dans notre cas, celui du vortex. Le squelette nous permet de visualiser de manière plus claire la position et le diamètre du vortex. De même, cette ligne médiane (squelette) contient la direction du plan normal au vortex, qui conjointement avec le champ de vorticité, nous permet de calculer l'intensité du vortex.

Nous constatons dans la Figure 6-13, que l'algorithme de squelettisation implémenté fonctionne correctement sur le vortex placé dans le sillage de la goutte. En effet, le premier vortex (sur l'équateur de la goutte) est assimilé à une nappe ou surface de vorticité dont nous ne pouvons pas définir sa ligne médiane. La squelettisation de deux vortex est présentée pour différents temps de simulation dans la Figure 6-13.

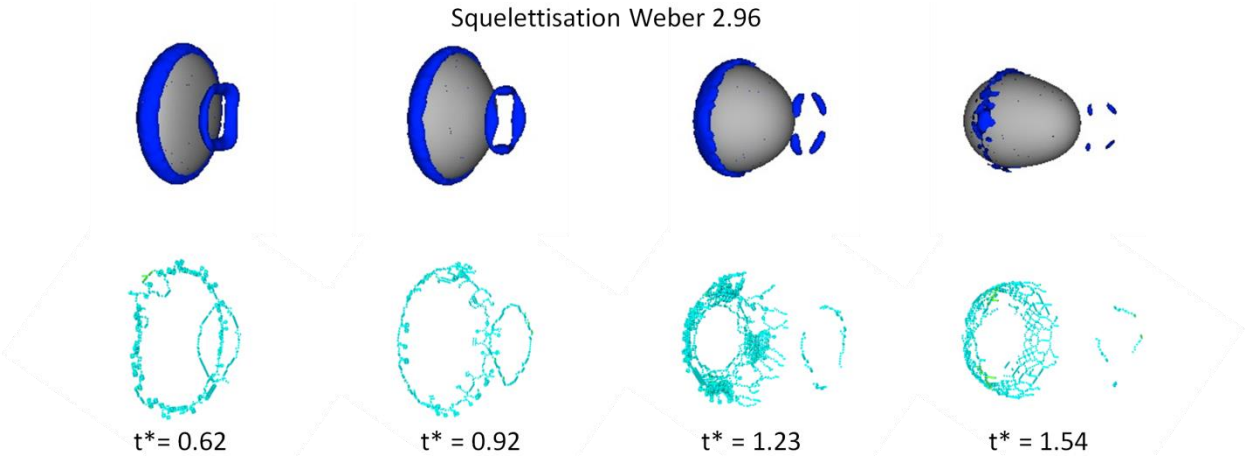


Figure 6-13 : Squelettisation de vortex à différents instants du temps ($We = 2.96$)

Pour calculer l'intensité du vortex, nous devons donc trouver le plan normal au vortex en un point donné du squelette. Pour ce faire, nous utilisons le squelette afin de définir un point du plan et une normale, en regardant les points voisins du squelette (direction de la ligne tangente au squelette dans le point choisi). La normale est calculée en faisant une différence centrée entre les deux points les plus proches au point choisi. La grande quantité des données rend difficile le calcul rapide de l'intensité, raison pour laquelle, avant d'effectuer le calcul, nous procédons à l'isolement d'une petite région du vortex. Ceci est présenté en Figure 6-14, où nous présentons en vert les points correspondants au vortex et en rouge (triangles) les points correspondants au squelette.

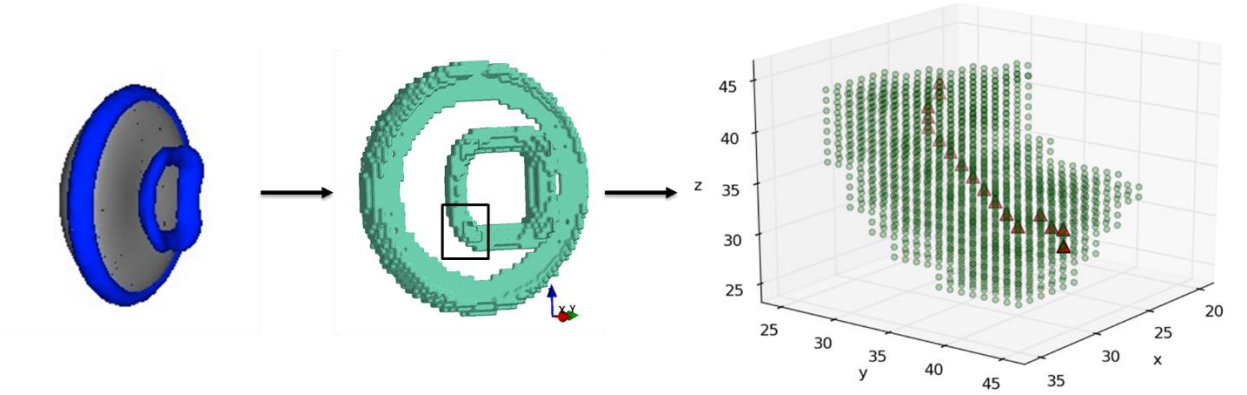


Figure 6-14 : Traitement du vortex et délimitation du volume pour le calcul de l'intensité du vortex. Gauche : Vortex et goutte ; centre : Vortex et délimitation du volume de traitement ; Droite : volume délimité, les points verts correspondent aux points du vortex et les triangles rouges aux points du squelette

Une fois le plan calculé (détermination d'un point du plan et de la normal, voir Figure 6-15), nous pouvons déterminer la vorticité sur ce plan. Nous constatons qu'une interpolation de la vorticité sur les points environnants au plan est nécessaire afin de trouver les valeurs de la vorticité sur le plan calculé. Nous utilisons une interpolation du type linéaire. Dans la Figure 6-15, nous présentons les points du squelette, le plan normal et l'interpolation de la vorticité sur le plan (en contour).

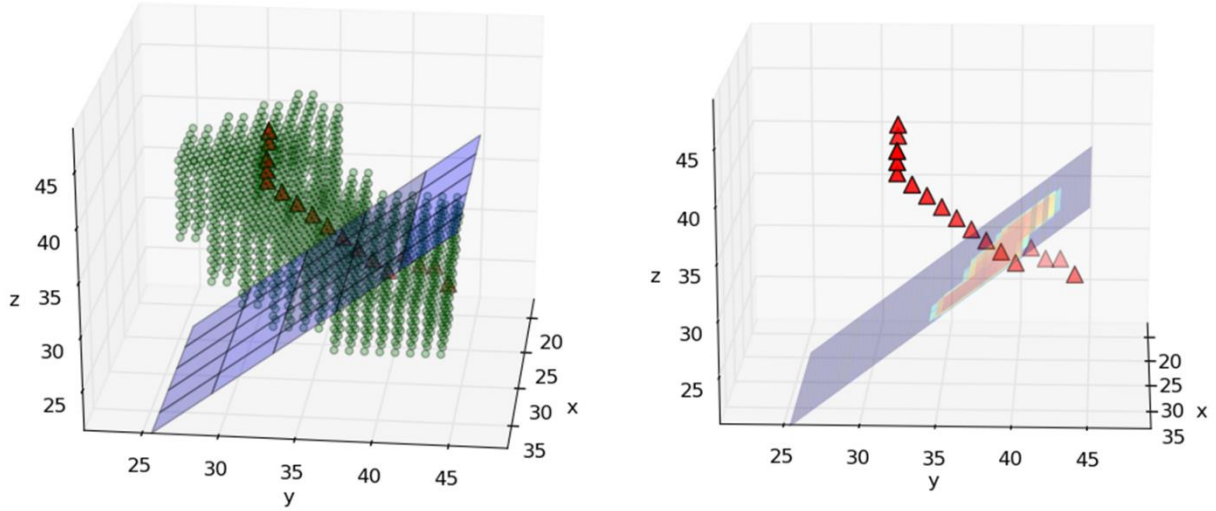
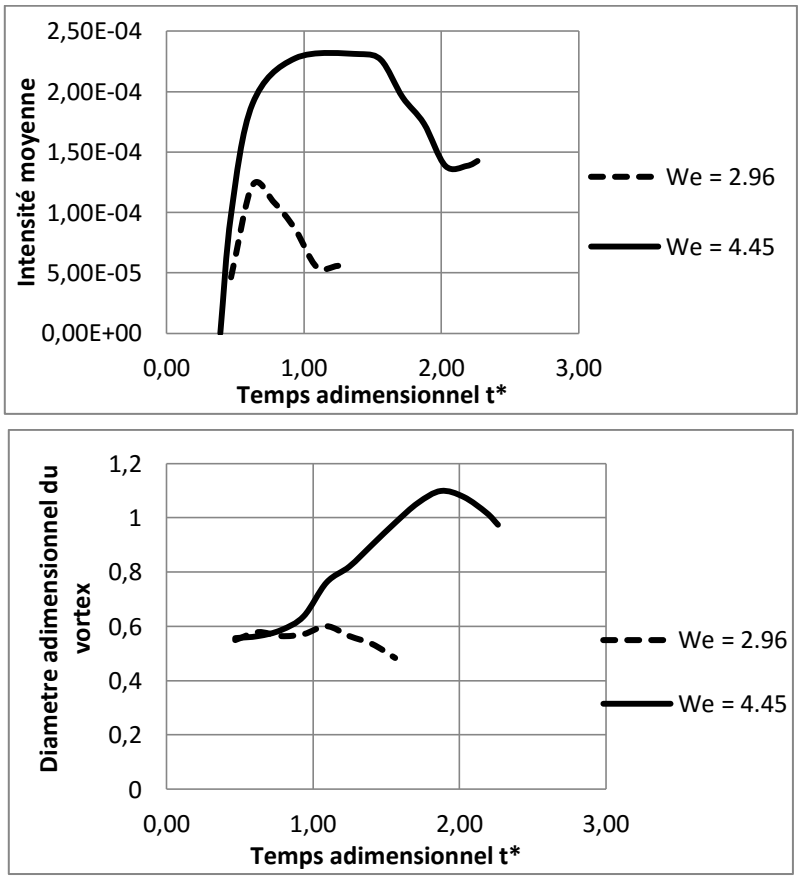


Figure 6-15 : plan normal à la ligne médiane du vortex (gauche) ; Interpolation de la vorticité sur le plan normal

Finalement, pour calculer l'intensité du vortex, nous intégrons les valeurs de la vorticité le long du plan normal. Nous calculons cette intégrale en considérant des valeurs constantes de la vorticité dans chaque différentielle de surface (dA), donné par le maillage choisi pour construire le plan normal. Cette méthode s'avère précise car nous utilisons une grille de 200 points de côté, ce qui fait un total de 40.000 points d'intégration.

Afin de déterminer l'intensité du vortex sur tout le volume, nous effectuons le calcul de l'intensité sur plusieurs points du squelette. Nous définissons l'intensité du vortex comme la moyenne de l'intensité sur tous les points du squelette. Dans la Figure 6-16, nous présentons les caractéristiques du vortex en fonction du nombre du Weber et au cours du temps pour le régime en oscillation. Il faut remarquer que les caractéristiques du vortex dépendent de la valeur seuil du critère λ_2 choisi. Nous donnons plus de détails sur l'influence de ce critère λ_2 dans la morphologie du vortex dans l'annexe 8.14.



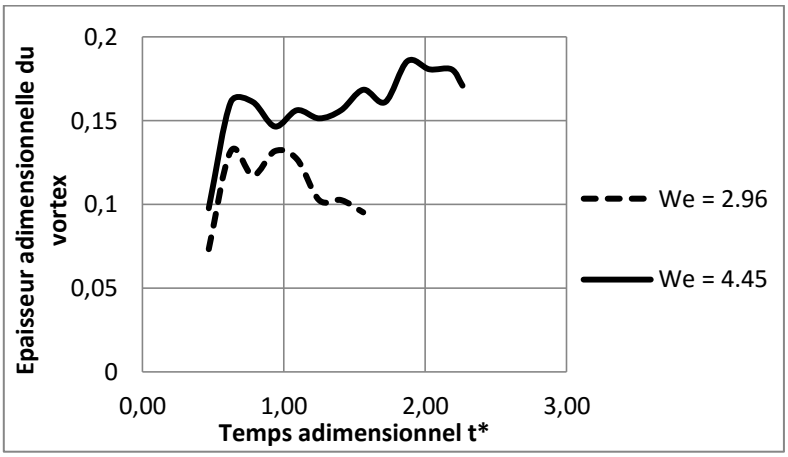


Figure 6-16 : Evolution temporelle de l'intensité moyenne du vortex à l'aval de la goutte, de son diamètre et de son épaisseur (pour $\boldsymbol{We = 2.96}$ et $\boldsymbol{We = 4.45}$)

La Figure 6-16 montre une plus forte intensité du vortex au fur et à mesure que nous augmentons le nombre de Weber. Pour $We = 2.96$, cette intensité diminue au bout de la première oscillation de la goutte. Par contre, pour le $We = 4.45$, le vortex garde une intensité pendant plus longtemps, tel que nous l'avons constaté en Figure 6-12. Ce vortex est à l'origine de l'élongation de la goutte dans le sens de l'écoulement.

6.2.2 REGIME DE FRAGMENTATION PAR ELONGATION (6 < WE < 12)

- Simulation 3D : We = 5.93, 7.41, 8.89, 10.38, 11.86

Ce régime diffère de celui d'oscillation car la goutte, après avoir été déformée à son point maximal (maximum d'aire interfaciale, état de déformation de la Figure 6-7, a), revient sur l'axe avec une forte inertie, ce qui provoque une déformation dans le sens de l'écoulement, si intense que les forces de tension superficielles qui gardent la cohérence de la goutte sont dépassées par les forces qui tentent de produire la rupture de la goutte (voir Figure 6-17)

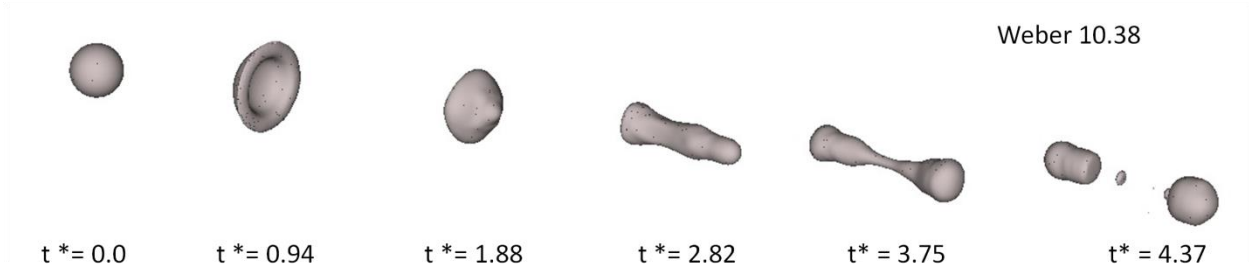


Figure 6-17 : Différents état de déformation de la goutte dans le régime de fragmentation par élongation ($\boldsymbol{We = 10.38}$)

Dans la Figure 6-18, la déformation de la goutte dans le sens parallèle et perpendiculaire à l'écoulement est présentée en fonction du temps adimensionnel de fragmentation. Pendant les premières instantes de l'interaction, l'évolution temporelle de la déformation de la goutte semble être indépendante du nombre de Weber car toutes les lignes se superposent. Ceci s'avère juste jusqu'au moment de la déformation maximale dans la direction y, quand la goutte forme une nappe concave. A cause des forces de tension de surface, cette nappe revient sur l'axe de symétrie de la goutte pour ensuite former un ligament. Pendant ce régime, la goutte s'étire dans la direction de l'écoulement, avec une faible variation des diamètres des bourrelets formés dans le ligament.

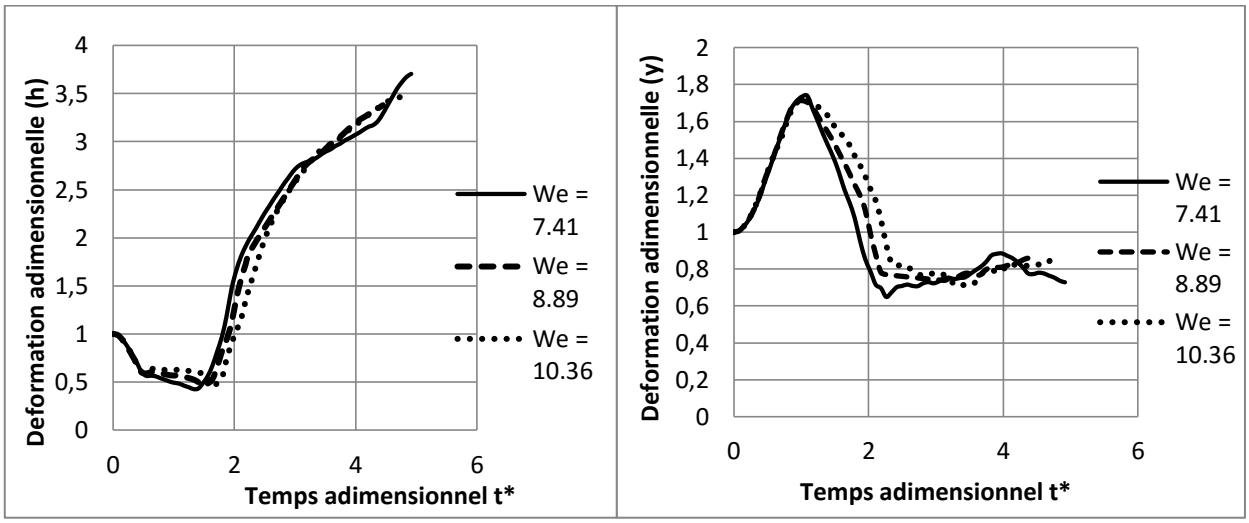


Figure 6-18 : Gauche : Déformation de la goutte dans le sens de l'écoulement (h) ; Droite : Déformation de la goutte dans le sens perpendiculaire à l'écoulement (y) pour le régime de fragmentation par élongation

La fragmentation dans ce régime dépend principalement de l'action des forces de tension de surface, lesquelles essaient de préserver la cohérence de la goutte, mais en même temps de minimiser sa surface, en produisant des ruptures quand la goutte est trop déformée. Les simulations effectuées dans ce régime de fragmentation, montrent que la fragmentation se produit toujours par la fragmentation d'un ligament ou blob, lequel s'étire plus rapidement à mesure que le nombre de Weber augmente. Ce ligament est sujet à plusieurs types de forces de tension superficielle, qui agissent selon les rayons de courbure présentés sur la Figure 6-19.

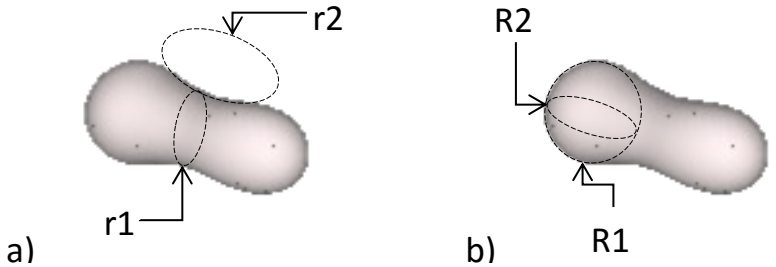


Figure 6-19 : Rayons de courbure qui génèrent de forces de tension de surface dans un ligament. Selon (Shinjo and Umemura, 2010)**, les forces agissent dans la direction de la ligne génératrice du ligament (Generating line direction), rayon r_2 et aussi dans le direction circonférentielle (circumferential direction), rayon r_1 . Aussi, les rayons de courbure R_1 et R_2 et les forces de surface associées agissent sur le drainage de la zone de rupture du ligament.**

Tous ces rayons de courbure peuvent être utilisés pour définir un critère de drainage du ligament. En effet, le drainage de la zone centrale ou de rupture peut être vu comme un écoulement du fluide généré par la différence de pression entre la zone centrale et les extrêmes du ligament. Le drainage aura donc lieu quand la pression de Laplace donnée par les rayons de courbure R_1 et R_2 soit inférieur à celle généré par r_1 et r_2.

Rappel à la loi de Laplace :

$\Delta P = \zeta\sigma$ où $\zeta = \frac{1}{R} + \frac{1}{R'}$, $R\ et\ R'$ sont les axes de courbure principaux de l'interface.

Critère de drainage de la zone centrale du ligament	
a) $$\zeta_1 = \frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2}$$	b) $$\zeta_2 = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}$$ Nous supposons que les rayons R_1 et R_2 décrivent une sphère. Ceci veut dire que $R_1 = R_2$. Nous obtenons donc :

Dans la plupart des cas, le rayon de courbure r_2 est toujours beaucoup plus grand que r_1 ($r_2 \gg r_1$). Cela veut dire que $\frac{1}{r_1} \gg \frac{1}{r_2}$. Nous obtenons donc : $$\zeta_1 \cong \frac{1}{r_1}$$	$$\zeta_2 \cong \frac{2}{R_1} = \frac{2}{R_2}$$
Le drainage du fluide de la zone centrale du ligament se produit quand la pression dans les bourrelets est plus faible que celle de la région centrale du ligament. L'inéquation suivante nous donne la condition nécessaire pour avoir drainage ($\Delta P_a > \Delta P_b$) : $$R_1 > 2\, r_1$$	

Les forces de tension de surface générées par la courbure de l'interface du rayon r_2 tentent de rétablir la forme sphérique de la goutte ; Par contre, les forces à cause du rayon de courbure r_1 augmentent le rétrécissement de la goutte et essaient de produire sa rupture. La rupture de la goutte est donc le résultat de la compétition entre ces deux forces de tension de surface et du drainage produit par la différence de pression entre la zone centrale et les bourrelets.

La différence principale entre les régimes par oscillation et par étirement est que dans le deuxième mode, les forces qui agissent dans la direction circonférentielle sont aidées par l'inertie du fluide qui se déplace dans la direction de l'écoulement externe (direction de la ligne génératrice) et par le drainage de la zone centrale. Ce régime de fragmentation par étirement est donc une combinaison des forces de tension superficielle et inertielle.

Une fois les forces de tension de surface dans la direction circonférentielle prédominent, différents modes de rupture de ce ligament peuvent se produire avec une variété de taille de gouttes produites. Les ruptures sont principalement le résultat de l'instabilité de Rayleigh-Plateau (voir paragraphe 5.3) et sont similaires à la rupture de jets cylindriques à faible nombre de Weber. Les différents types de fragmentation peuvent s'observer dans la Figure 6-20.

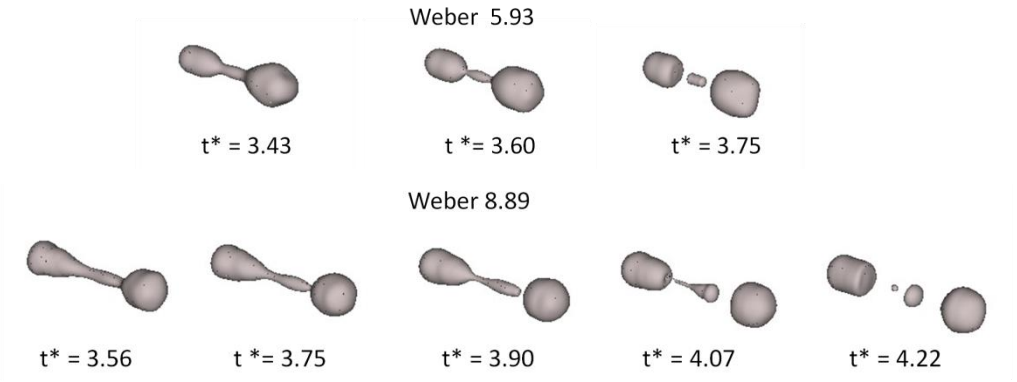


Figure 6-20 : Fragmentation de gouttes à différents nombres de Weber dans le régime de rupture par élongation

Au fur et à mesure que le nombre de Weber augmente, le nombre de gouttes augmente, en passant de 3 pour un $We = 5.93$ à 6 pour un $We = 10.38$. Le diamètre de Sauter dans ce régime de fragmentation reste toujours autour de $\frac{SMD}{D0} = 0.75$. La distribution de gouttes générées comporte deux bourrelets plus quelques petites gouttes satellites (voir Figure 6-21 pour un exemple de distribution de taille de particules). Il est probable qu'une coalescence de petites gouttes avec les gouttes satellites ou même avec bourrelets se produise. Ceci est constaté par la différence entre le nombre maximal de gouttes et le nombre final de gouttes.

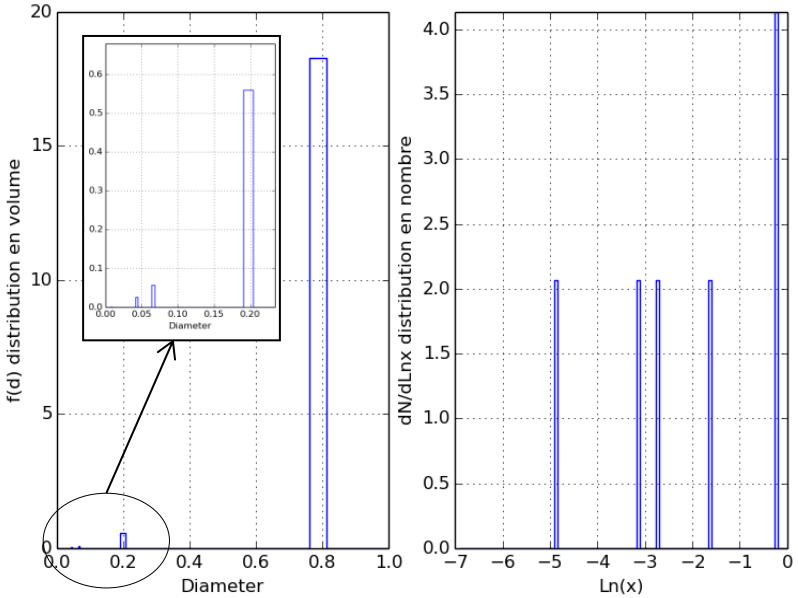


Figure 6-21 : Exemple de distribution de taille de particules à $We = 10.38$. A gauche : distribution en volume avec zoom sur les petits fragments. A droite : Distribution en nombre.

La Figure 6-21 montre la distribution de particules générées lors de la fragmentation d'une goutte à $We = 10.38$. Les graphes montrent différentes représentations de la distribution dans lesquelles nous observons la prédominance de bourrelets autour de $\frac{D}{D_0} \approx 0.8$ (distribution en volume, Figure 6-21, gauche). Les petites gouttes sont quasiment invisibles dans le graphe, cependant, elles sont visibles dans la distribution en nombre de particules. Le fait d'avoir une distribution en nombre nous permet d'observer plus facilement la présence de 4 petites gouttes et de 2 grosses gouttes.

Malgré que les petites gouttes aient une aire interfaciale importante, le diamètre de Sauter dans ce régime est donc piloté par les gros bourrelets formés pendant la fragmentation. En effet, le peu nombre de petites gouttes filles ainsi que sa faible masse, permet de supposer que leur impact est négligeable.

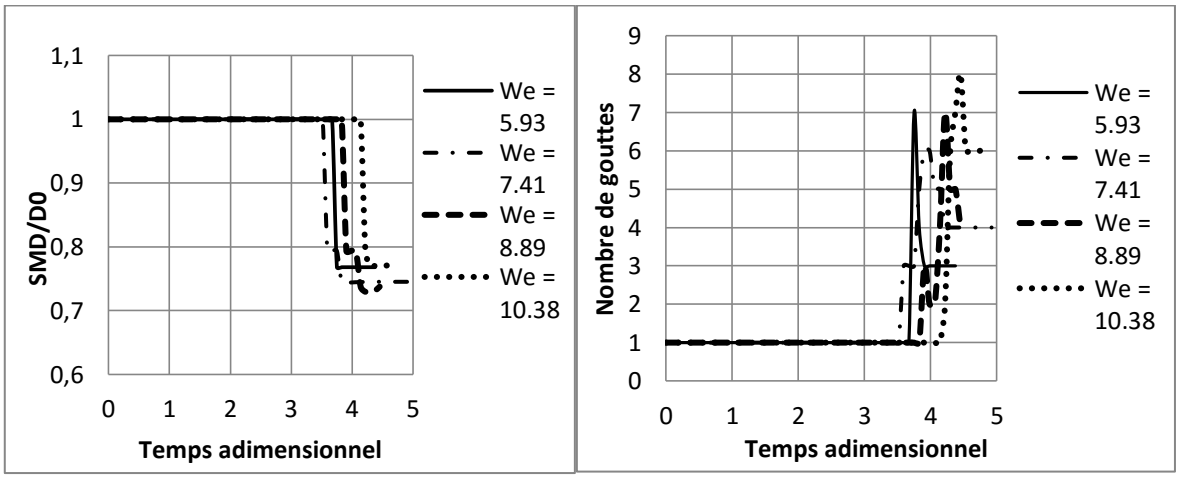


Figure 6-22 : Nombre de gouttes (Gauche) et diamètre final de Sauter (droite) en fonction du temps adimensionnel pour différents nombres de Weber dans le régime de fragmentation par étirement

Le Figure 6-22 nous montrent l'évolution temporelle du nombre de gouttes et du diamètre de Sauter SMD/D_0 en fonction du nombre de Weber. Nous constatons une dépendance entre le moment de fragmentation du ligament et le nombre de Weber. A fur et à mesure que le nombre de Weber augmente, la fragmentation se fait plus tardivement, en passant pour un temps adimensionnel de fragmentation d'environ 4 pour $We = 5.93$, jusqu'au un temps d'environ 4.5 pour $We = 10.36$. Par ailleurs, la coalescence de quelques petites gouttes lagrangiennes sur les gouttes de plus grand taille n'a pas d'influence significative dans la valeur finale du diamètre de Sauter (voir Figure 6-22).

Concernant l'interaction goutte-vortex, à différence du régime d'oscillation, nous constatons en Figure 6-23 que le vortex au sillage de la goutte se fusionne avec un nouveau vortex qui se forme dans la zone équatoriale de la goutte, ayant un diamètre similaire à celui de la goutte. Ce nouveau vortex plus

intense, produit une élongation plus prononcée de la goutte dans le sens de l'écoulement, jusqu'à produire sa rupture par élongation (voir Figure 6-23, Weber 7.41).

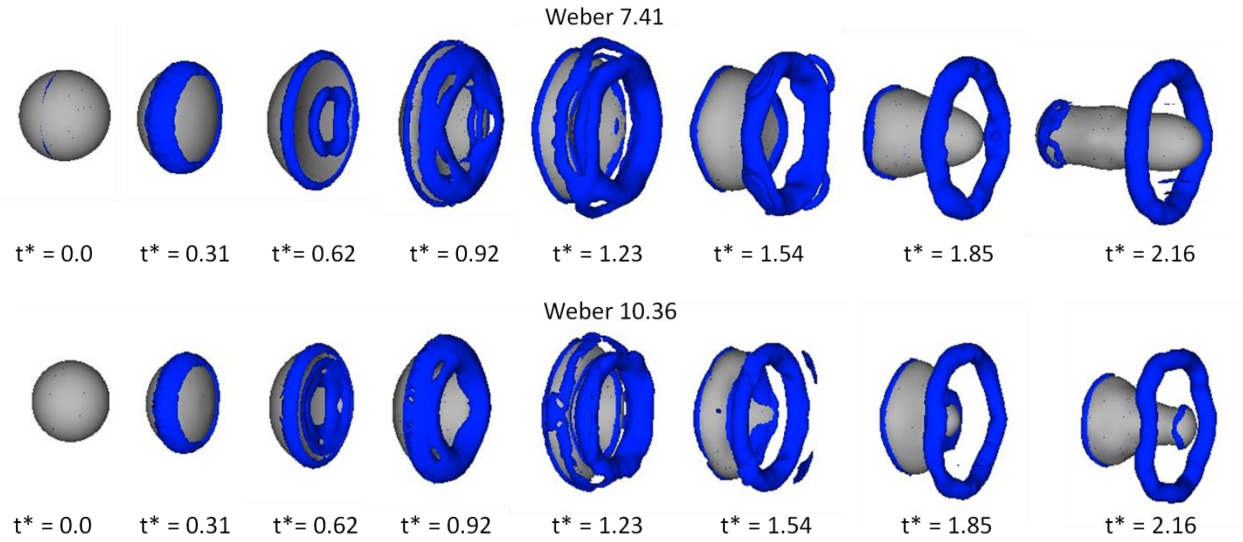


Figure 6-23 : Interaction goutte-vortex ($We = 7.41$ et $We = 10.36$). La goutte est représentée en couleur grise et le vortex (détecté selon le critère λ_2) est en couleur bleue

La fusion de deux vortex semble conditionner la transition entre un régime oscillatoire et un régime de fragmentation par élongation. En effet, lors du régime d'oscillation, le vortex généré dans le sillage de la goutte est à lui seul le responsable de l'élongation de la goutte dans le sens de l'écoulement, pour de nombres de Webers proches de la transition oscillation-élongation (voir Figure 6-12, $We = 4{,}45$) Cependant, son intensité n'est pas suffisante pour produire la fragmentation de la goutte.

Le grand vortex produit par la fusion pour $We > 6$ est suffisamment puissant pour produire une élongation de la goutte et sa rupture. Le mécanisme de fusion est présenté en détail dans la Figure 6-24. Nous constatons que le vortex présent au $t^* = 0.72$, conserve sa forme jusqu'à l'instant $t^* = 0.97$, où il disparait en se fusionnant au nouveau vortex de fort intensité généré dans le sillage de la goutte. Ce nouveau vortex se dégage finalement de la zone du sillage proche de la goutte pour prendre sa forme finale vers $t^* = 1.54$ (voir Figure 6-23)

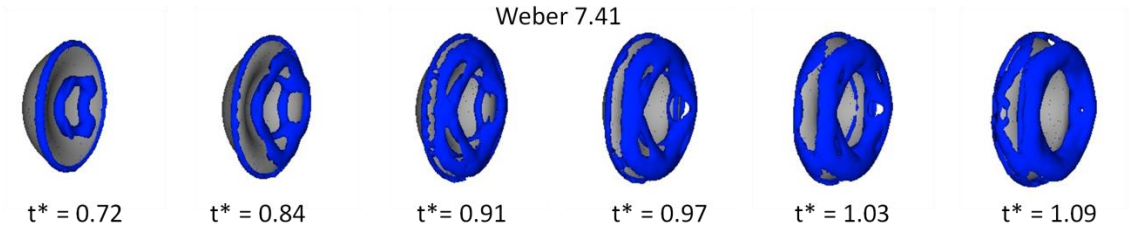


Figure 6-24 : Mécanisme de fusion et squelettisation des vortex pour $We = 7.41$

Nous avons utilisé notre méthodologie pour évaluer l'évolution temporelle de l'intensité moyenne du vortex, cependant, nous n'avons pas donné des valeurs d'intensité pendant la fusion de vortex. En effet, il est difficile de calculer de manière précise le squelette de vortex à cause de leur forme complexe. A cause du grand nombre de points du squelette, le calcul de l'intensité résulterait couteux et imprécis ; nous avons donc, préféré calculer l'intensité du vortex avant et après la fusion.

6.2.3 REGIME DE FRAGMENTATION PAR RUPTURE DE NAPPE (12 < WE < 18)

- Simulation 3D : We = 13.34, 14.82, 17.79

Dans ce régime, la goutte se déforme pour former une nappe creuse (forme d'une demi-sphère, voir Figure 6-25). Les bords de la nappe semblent être écartés vers l'extérieur. L'épaisseur de la nappe diminue jusqu'à moment auquel elle se perce et plusieurs gouttes sont générées.

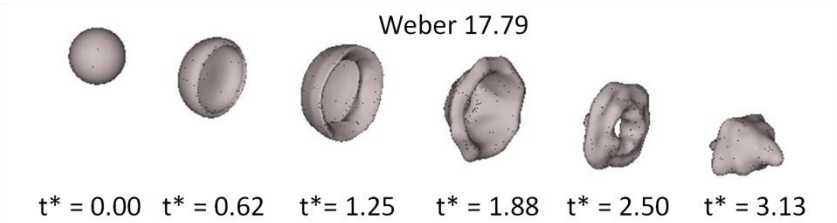


Figure 6-25 : Fragmentation d'une goutte en régime de fragmentation par rupture de nappe (Weber = 17.79)

Au moment de la rupture, la nappe est percée à plusieurs endroits. Ces percements grandissent grâce aux forces de tension de surface. Les ligaments constitués forment une structure de type « toile d'araignée », suivent un processus de restructuration et de drainage, jusqu'à leur rupture (voir Figure 6-26). Plusieurs gouttes sont alors générées ; Malgré la déformation considérable de la goutte, nous remarquons qu'une grande quantité de volume de métal reste dans l'anneau, lequel suit postérieurement un processus de restructuration.

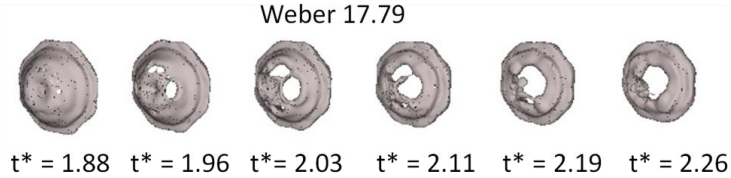


Figure 6-26 : Rupture de nappe (We = 17.79). Nucléation et grandissement des trous, formation de ligaments, restructuration et rupture

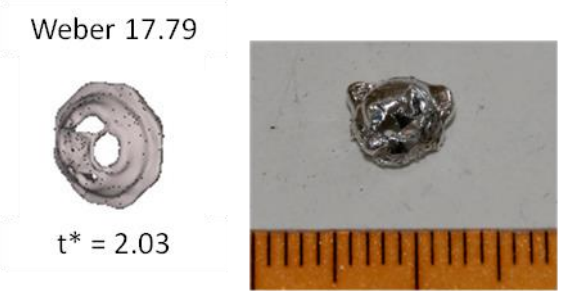


Figure 6-27 : Comparaison de morphologie entre les simulations numériques et les essais expérimentaux GaLaD

Ce régime de fragmentation a été constaté expérimentalement lors des essais GaLaD effectués au LEMTA (Hadj-Achour et al., 2015). GaLaD (goutte à la demande) fait interagir une goutte de métal de Fields en chute gravitaire avec un bac remplie d'eau. Une chute préalable de la goutte dans l'air permet que celle-ci acquière une certaine vitesse avant de pénétrer dans l'eau. La hauteur de chute est réglée en fonction du nombre de Weber. Nous avons constaté qualitativement une morphologie similaire entre les gouttes issues de simulations numériques et celles obtenues expérimentalement.

Du côté de simulations numériques, nous constatons que le principal problème pour la résolution de ce type de fragmentation est le caractère multi-échelle des structures formées. Comme nous pouvons le voir sur la Figure 6-26, les ligaments et les gouttes produites ont un diamètre $\frac{D_f}{D_0} \approx 0.005$ en comparaison avec l'anneau qui a une taille comparable au diamètre initiale de la goutte. De manière à optimiser le temps de calcul et la conservation de la masse de gouttes, les petites gouttes mal résolues par le modèle VOF sont basculées vers le champ lagrangien (voir paragraphe 5.4). C'est pour cette raison que très peu de particules sont représentées dans les images. Nous constatons une forte coalescence de petites gouttes qui impactent l'anneau et la restructuration de l'anneau qui se transforme en une nouvelle grosse goutte (voir Figure 6-25). Dans ce régime de fragmentation, le diamètre de Sauter final est proche du diamètre initial, car la coalescence de petites gouttes et la restructuration l'anneau génèrent à nouveau une grosse goutte.

La déformation initiale de la goutte est similaire à celle constaté dans le régime de fragmentation par élongation. Dans la direction h (sens de l'écoulement), nous constations que la formation d'une goutte de type oblate est quasi-indépendant du nombre de Weber. Postérieurement, la formation du sac (aux alentours du $t^* \approx 1.54$) dépend du nombre de Weber étudié (voir Figure 6-28, gauche).

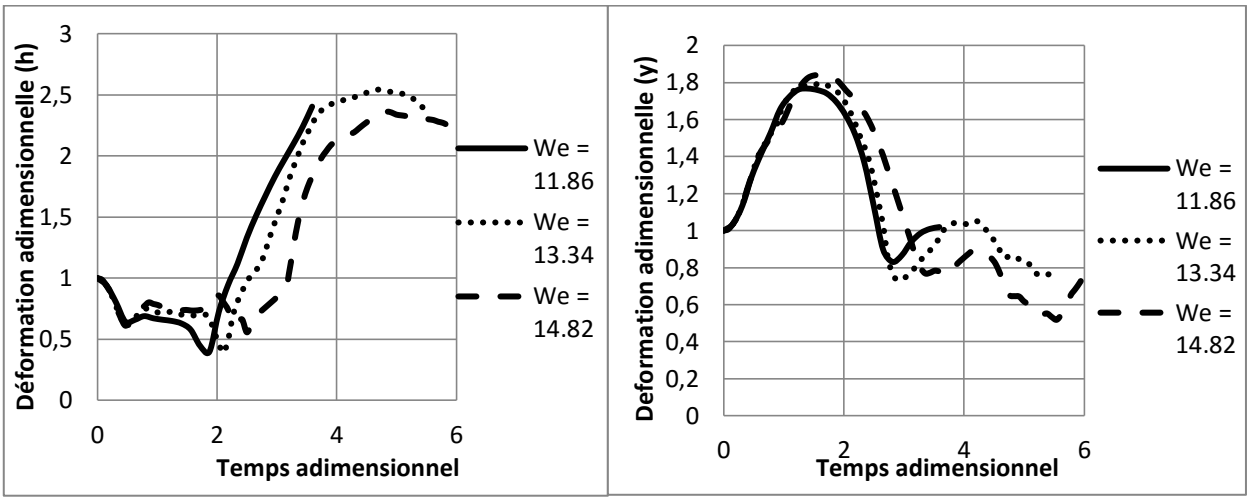


Figure 6-28 : Gauche : Déformation de la goutte dans le sens de l'écoulement (h) ; Droite : Déformation de la goutte dans le sens perpendiculaire à l'écoulement (y) pour le régime de fragmentation par rupture de nappe

L'interaction goutte-vortex dans ce régime de fragmentation est clé pour comprendre la dynamique de la déformation de la goutte. Nous constatons dans la Figure 6-29, que le vortex reste toujours derrière la goutte. Celui-ci interagi avec les lèvres de la nappe et empêche son étirement dans la direction axiale. Ce vortex provoque la concentration d'une grande quantité de masse de fluide dans l'anneau ce qui explique sa grande taille après la rupture de la nappe.

Après le renfermement de l'anneau du fluide, le vortex aide le blob formé à s'étirer dans la direction axiale et à prendre une forme de ligament. Le temps final imposé dans nos simulations ne permet pas d'estimer le devenir de ce ligament, cependant, nous doutons que celui-ci soit à nouveau fragmenté car il a été fortement entrainé.

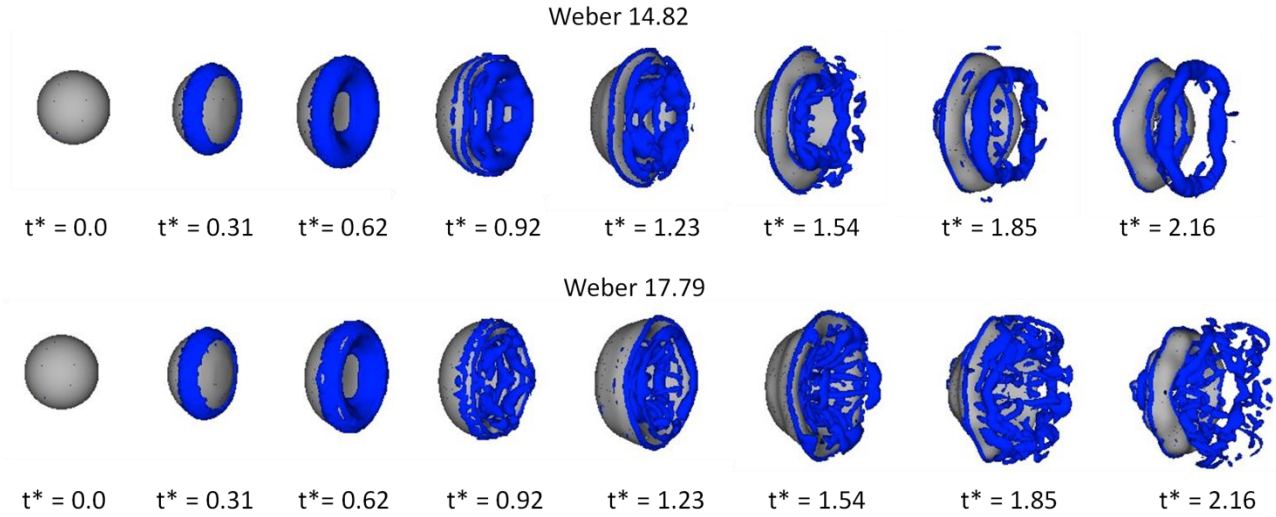


Figure 6-29 : Interaction goutte-vortex ($We = 14.82$ et $We = 17.79$). La goutte est représentée en couleur grise et le vortex (détecté selon le critère λ_2) est en couleur bleue

Malgré la formation d'une nappe fine de fluide, nous constatons une quantité limitée de gouttes produites. Dans la Figure 6-30 nous présentons le nombre de gouttes et le diamètre de Sauter en fonction du temps. Nous constatons que la fragmentation de la nappe se produise vers un temps adimensionnel proche de deux, indépendant du nombre de Weber. La faible variation du diamètre de Sauter malgré la fragmentation de la nappe, montre que la nappe formée est de petit taille et contient peu de masse. Les gouttes formées par la fragmentation de cette nappe se trouvent à l'amont de l'écoulement par rapport à l'anneau formé. Ces gouttes sont fortement entrainées vers l'anneau qui se referme sur l'axe et coalescent (aux alentours de $t^* \approx 3$).

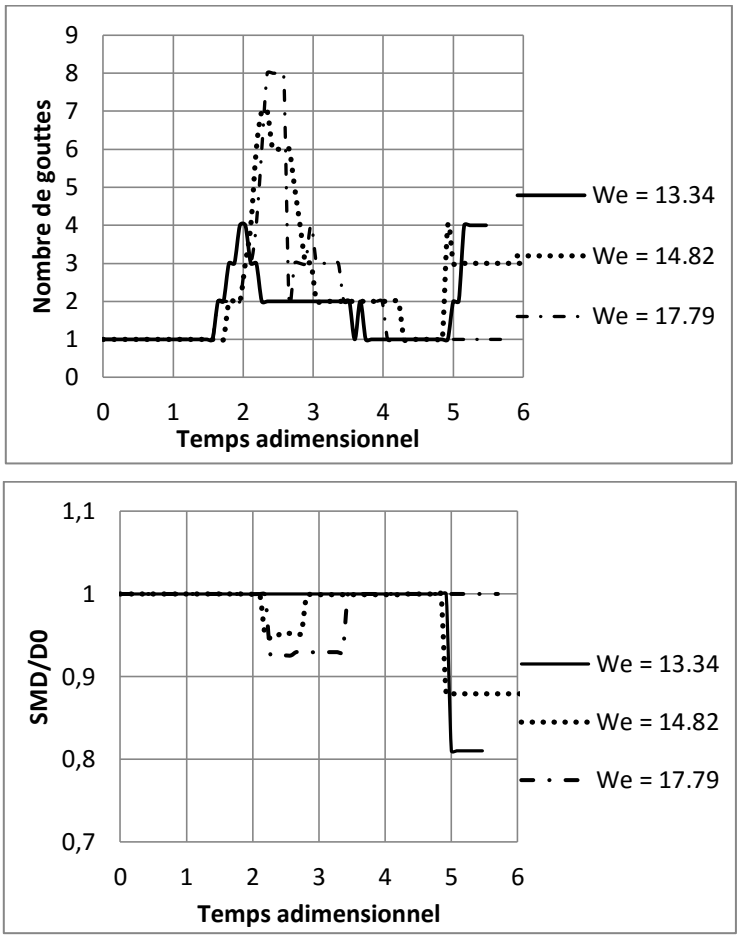


Figure 6-30 : Nombre de gouttes (haut) et diamètre final de Sauter (bas) en fonction du temps adimensionnel pour différents nombres de Weber dans le régime de fragmentation par rupture de sac

L'anneau forme peut se fragmenter en plusieurs morceaux de grand taille après sa restructuration. Nous constatons, que cette fragmentation de grand échelle produit moins de gouttes mais une forte variation du diamètre de Sauter. Cependant, cette fragmentation n'est pas systématique et dans certains cas, le blob formé peut ne pas se fragmenter (le diamètre de Sauter final est proche du diamètre de Sauter initial).

6.2.4 REGIME DE FRAGMENTATION PAR RUPTURE DE NAPPE ET ENROULEMENT AUTOUR DE L'ANNEAU TOURBILLONNAIRE (18 < WE < 180)

- Simulation 3D : We = 23.72, 35.57, 47.43, 59.29, 71.15, 177

Un quatrième régime de fragmentation a été observé pour des gouttes soumises à des perturbations hydrodynamiques avec un Weber variant entre 18 et 180. Ce régime est difficilement différenciable de celui d'arrachement et rupture de nappe. Les principales caractéristiques de ce régime sont la déformation de la goutte en forme de nappe dirigée dans le sens de l'écoulement (voir Figure 6-32). Cette nappe est similaire à celle formée dans le cas de la fragmentation par élongation, mais avec une déformation plus importante.

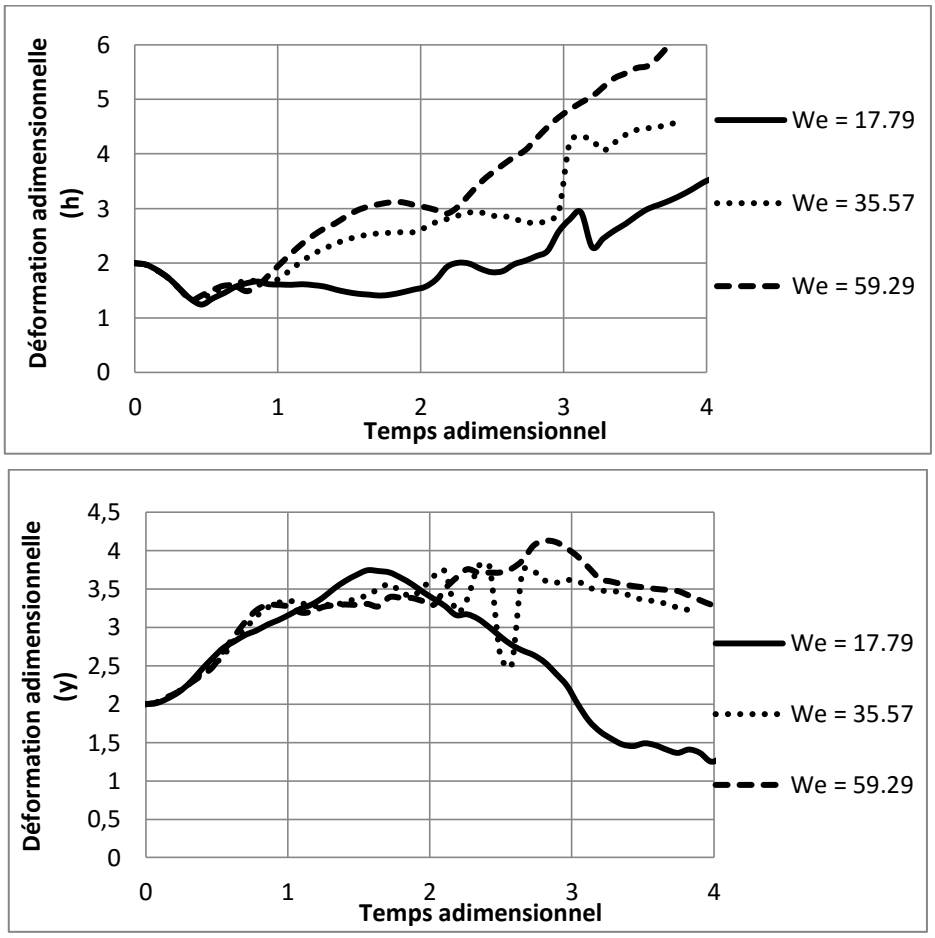


Figure 6-31 : Haut : Déformation de la goutte dans le sens de l'écoulement (h) ; Bas : Déformation de la goutte dans le sens perpendiculaire à l'écoulement (y) pour le régime de fragmentation par rupture de nappe et enroulement autour de l'anneau de vortex

La forte déformation de la nappe provoque une diminution significative de son épaisseur. Ceci permet donc, l'action des forces de tension de surface qui provoquent la rupture de la goutte à divers endroits.

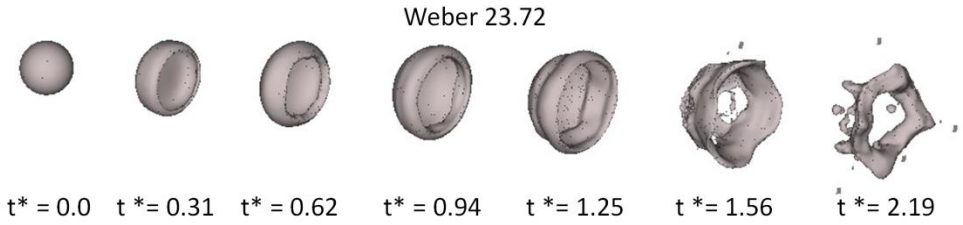


Figure 6-32 : Formation de nappe lors du régime de fragmentation par rupture de nappe

Une fois ces trous de nucléation formés, ils s'amplifient rapidement à cause des forces de tension de surface qui tentent de minimiser la surface. Des réseaux dits en toiles d'araignées apparaissent. La goutte est à ce moment constitué de longs ligaments avec des points de croisement formant un réseau assez complexe. Les ligaments qui composent ce réseau suivent donc une rupture et donnent lieu à une polydispersion de gouttes. Parallèlement à la formation de la nappe, un anneau fluide se forme aussi (similaire à celui du régime de fragmentation en sac pour les systèmes liquide/gaz) et postérieurement se fragmente (voir Figure 6-32 et Figure 6-33)

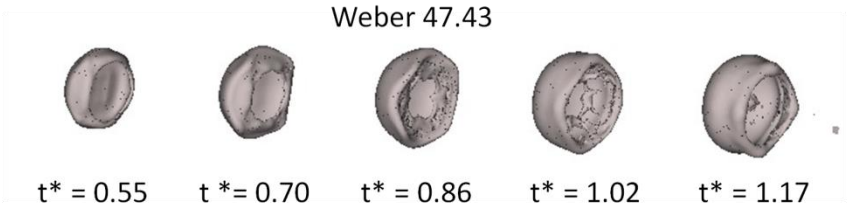


Figure 6-33 : Formation d'anneau, enroulement et rupture

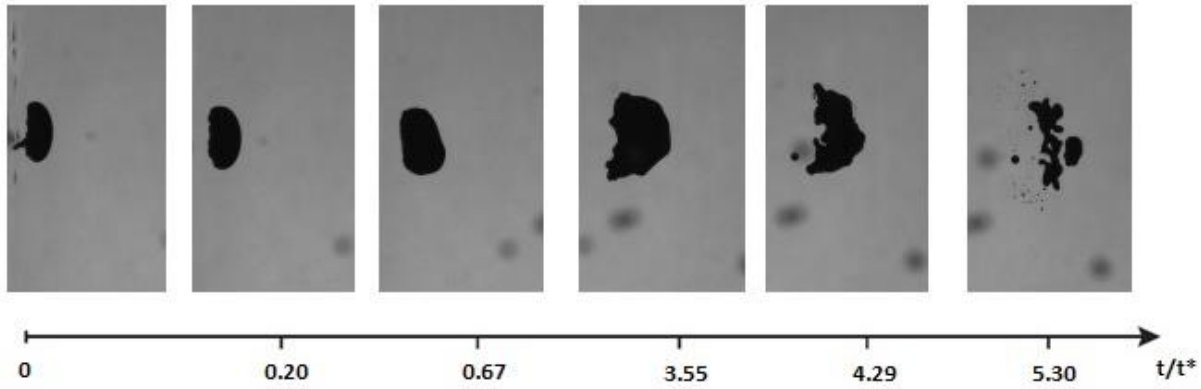


Figure 6-34 : Déformation et fragmentation d'une goutte de métal de Fields en chute gravitaire dans l'eau. Le Weber initial de la goutte est de 37 (Hadj-Achour et al., 2015)

Ces différentes structures formées nous permettent de prédire que des gouttes de petite taille sont issues de la fragmentation de ligaments qui constituent la nappe et des gouttes de taille plus importante sont issues des interconnections dans la nappe et de la rupture de l'anneau. De même, des structures de grande taille peuvent être générées à cause de la coalescence et restructuration des structures grâce aux forces de tension superficielle.

Dans ce régime, nous pouvons distinguer deux phases de fragmentation (Figure 6-35). La première fragmentation arrive entre $0.85 < t^* < 1.92$. La nappe s'enroule autour de l'anneau de vortex, en diminuant son épaisseur (voir Figure 6-37). Une rupture de la lèvre enroulée se produise et une grande quantité de gouttes sont produites. Ses gouttes se trouvent ensuite dans une zone à faible vitesse axiale et sont très vite rattrapées par la nappe principale, laquelle est fortement déstabilisé par leur impacte et se fragmente en plusieurs morceaux. Le moment d'impact est autour de $t^* = 1.92$, car nous constatons une forte diminution du nombre de gouttes (Figure 6-35). Entre temps, la nappe s'enroule une deuxième fois autour de l'anneau de vortex en formant une grande structure qui subsiste après la fragmentation de la nappe principale.

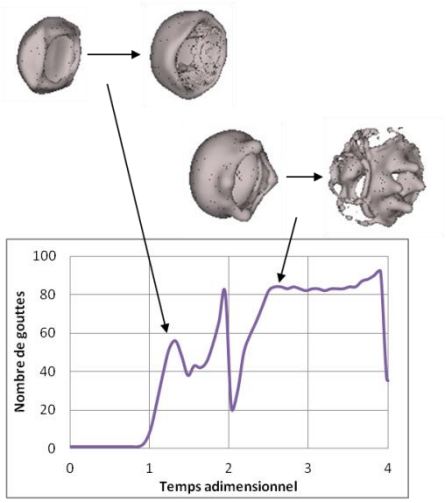


Figure 6-35 : Nombre de particules en fonction du temps adimensionnel. Weber = 59.29. Les images de gouttes montrent les deux principaux instants de génération de gouttes (rupture de l'anneau enroulé autour du vortex et rupture de la nappe principale)

Nous constatons que ces deux étapes de fragmentation ont un impact sur le diamètre de Sauter Figure 6-36. Nous constatons une premier diminution du diamètre de Sauter correspondant à la fragmentation des lèvres de la nappe. Cependant, c'est la fragmentation de la nappe celle qui produit une diminution plus prononcé du diamètre de Sauter.

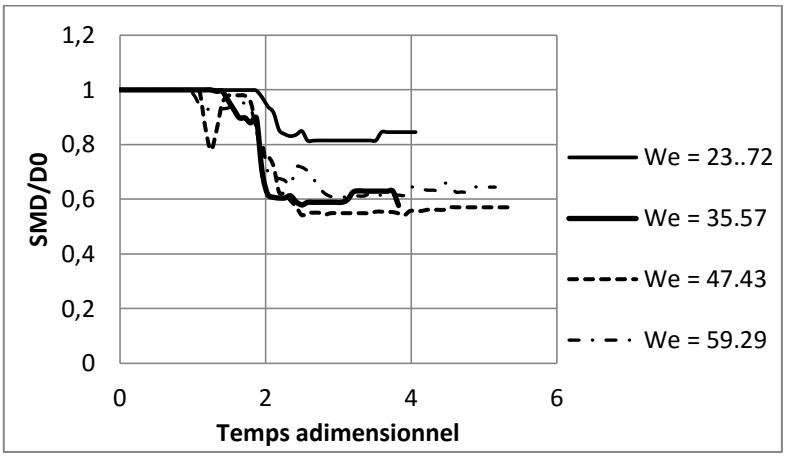


Figure 6-36 : Diamètre de Sauter en fonction du temps pour le régime de enroulement autour du vortex et de fragmentation du sac

Dans ce régime de fragmentation nous n'avons pas pu effectuer une analyse de l'intensité du vortex car celui-ci n'a pas une forme géométrique simple pour être analysé. Nous constatons qu'à différence de régime de fragmentation par élongation, il n'y a pas création du vortex de petite taille dans le sillage de la goutte. En effet, un vortex de taille similaire à celle de la goutte déformé est directement produit. La nappe s'enroule ensuite autour de celui-ci, lequel contribue au maintien de la forme du sac et postérieurement, à sa fragmentation. Dans la Figure 6-37, Weber 47.73, $t^* = 1.85$ et 2.16, nous remarquons la présence de cet anneau de vortex bien défini à l'intérieur de la goutte.

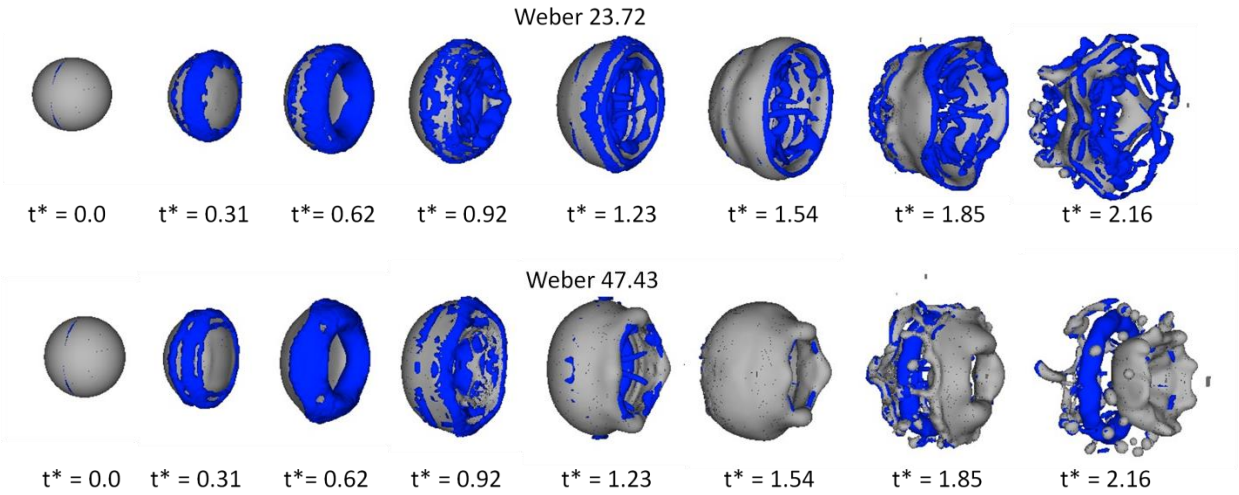


Figure 6-37 : Interaction goutte-vortex ($We = 23.72$ et $We = 47.43$). La goutte est représentée par la couleur grise et le vortex (détecté selon le critère λ_2) est en couleur bleue

6.2.5 REGIME D'ARRACHEMENT, DE DISTORSION ET DE RUPTURE (WE > 180)

- Simulation 3D : We = 177, 355.74, 533.61

Ce régime de fragmentation est très complexe et plusieurs phénomènes se produisent au même moment. Premièrement, nous constatons une déformation plus faible de la goutte et la formation de vagues de fluide à la surface de la goutte qui se détachent périodiquement. Clairement, le nombre de gouttes générées pendant cette phase est plus grande par rapport aux régimes précédents (entre 500 et 1000 gouttes).

En ce que concerne la dynamique de génération de gouttes, la génération de très petites gouttes commence très tôt (vers $t^* = 0.62$, voir Figure 6-38). Ceci contredit une hypothèse commune pour la fragmentation de gouttes, où il est souvent préconisé un temps de déformation sans fragmentation égale à $t^* = 2$, indépend du régime de fragmentation.

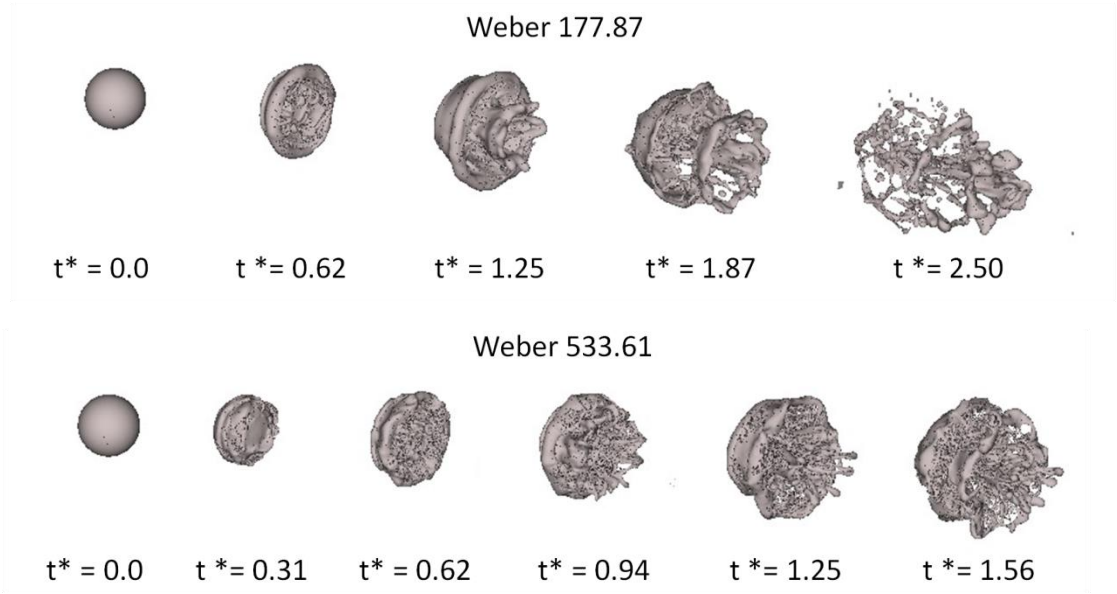


Figure 6-38 : Simulations numériques de la rupture d'une goutte à haut nombre de Weber. Régime d'arrachement et rupture, dit régime catastrophique

Une configuration très complexe se forme dans la partie arrière de la goutte avec la formation de nombreuses gouttes et ligaments. Nous remarquons l'absence des instabilités de surface de petite longueur d'onde et l'absence d'un régime d'arrachement à proprement parler. En effet, les instabilités de surface croissent et génèrent des vagues de fluides qui sont postérieurement arrachées de la goutte quand le cylindre creux du fluide qui les attache à la goutte est percé. Après l'arrachement de plusieurs vagues, la masse du fluide restante forme une nappe qui est percée et fragmentée (similaire aux régimes précédentes).

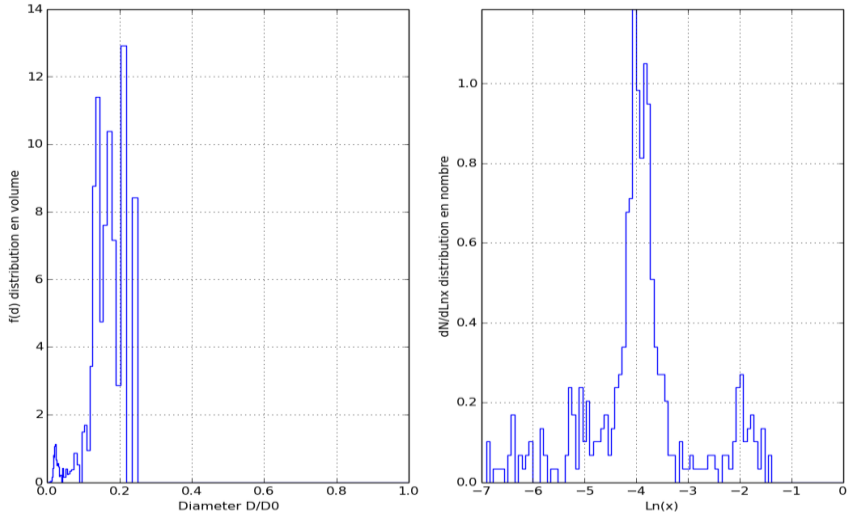


Figure 6-39 : Distribution de taille de particules issue de la fragmentation d'une goutte de gallium ($Weber = 177.87$)

La distribution en taille de fragments ne suit pas une loi statistique connue (par exemple, log-normale ou gamma), cependant nous pourrons espérer se rapprocher plus de ce type de loi au fur et à mesure que le nombre de Weber augmente. Dans la Figure 6-39 nous constatons une forte probabilité d'avoir de gouttes de $\frac{D_{filles}}{D_0} \approx 0.18$. Concernant la variation du diamètre de Sauter en fonction du temps, nous constatons une première diminution aux alentours de $t^* \approx 0.5$. Cette fragmentation corresponde à la formation de ligaments et des fragments derrière la goutte. La fragmentation est ensuite plus continue et progressive car les gouttes sont arrachées plus régulièrement de la zone équatoriale de la goutte mère. Finalement, la fragmentation de la nappe résiduelle marque la fin de la fragmentation. Cependant, les diverses gouttes et ligaments suivent un processus de restructuration, de fragmentation et de coalescence, raison pour laquelle, le diamètre de Sauter n'atteint pas une valeur stable.

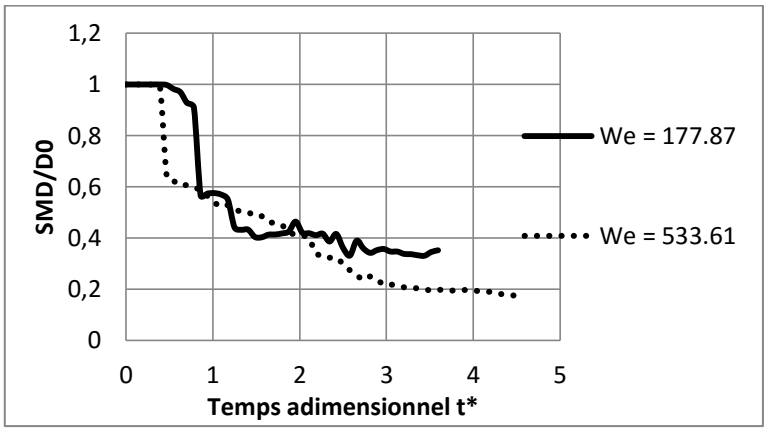


Figure 6-40 : Diamètre de Sauter en fonction du temps pour le régime catastrophique

L'interaction goutte-vortex dans ce cas de figure n'est pas très claire et la présence de grands anneaux de vortex bien définis n'a pas été observée (voir Figure 6-41). Nous constatons une région avec plusiers vortex à l'arrière de la goutte et la formation de nappes de vorticité au niveau équatoriale de la goutte. Nous n'avons pas identifié clairement un anneau de vorticité conditionnant la forme de la nappe, cependant, la présence de l'écoulement de recirculation dans le sillage de celle-ci peut influencer la formation de la nappe.

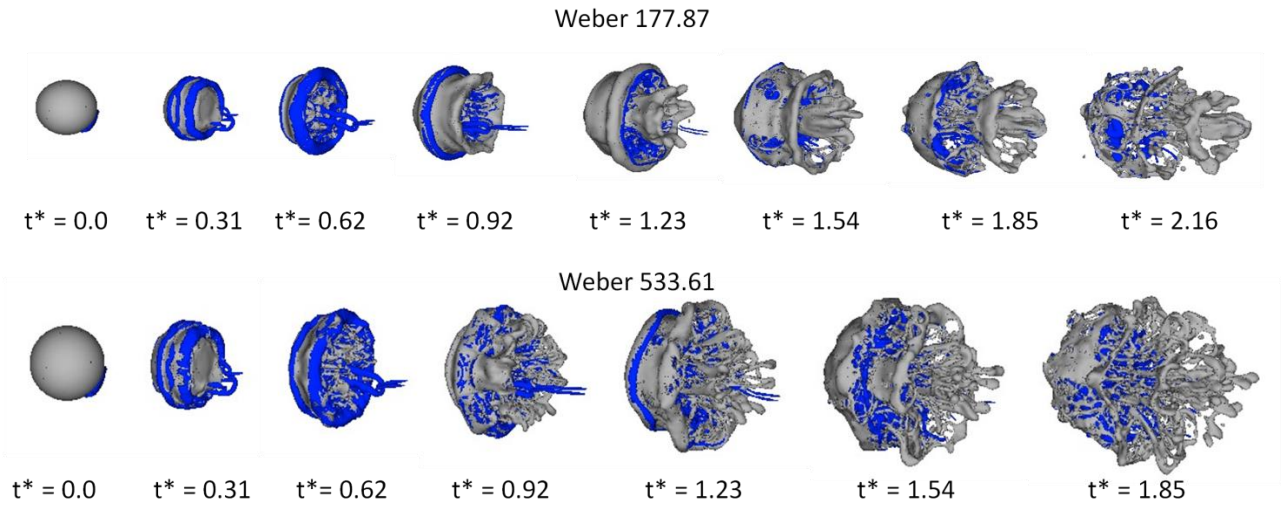


Figure 6-41 : Interaction goutte-vortex ($We = 177.87$ et $We = 533.61$). La goutte est représentée par la couleur grise et le vortex (détecté selon le critère λ_2) est en couleur bleue

6.3 ANALYSE GENERALE DE LA FRAGMENTATION SECONDAIRE

Dans le schéma présenté en Figure 6-42, nous proposons une classification de différents régimes de fragmentation de gouttes de métal liquide dans l'eau. Nous comparons directement ces régimes proposées avec les régimes de fragmentation acceptées pour les configurations liquide/gaz. D'abord, nous remarquons l'absence du régime de fragmentation en sac et multi-mode dans la configuration liquide/liquide. Les régimes de fragmentation en liquide/liquide sont caractérisés pour une plus grande déformation avant la rupture du sac. L'orientation de la cavité du sac est inverse à celle constaté pour le régime de fragmentation en sac pour liquide/gaz. Pour les nombres de Weber élevés, les régimes de fragmentation son similaires entre les deux configurations. Cependant, de gouttes de plus grosse taille sont observées dans les configurations liquide/liquide.

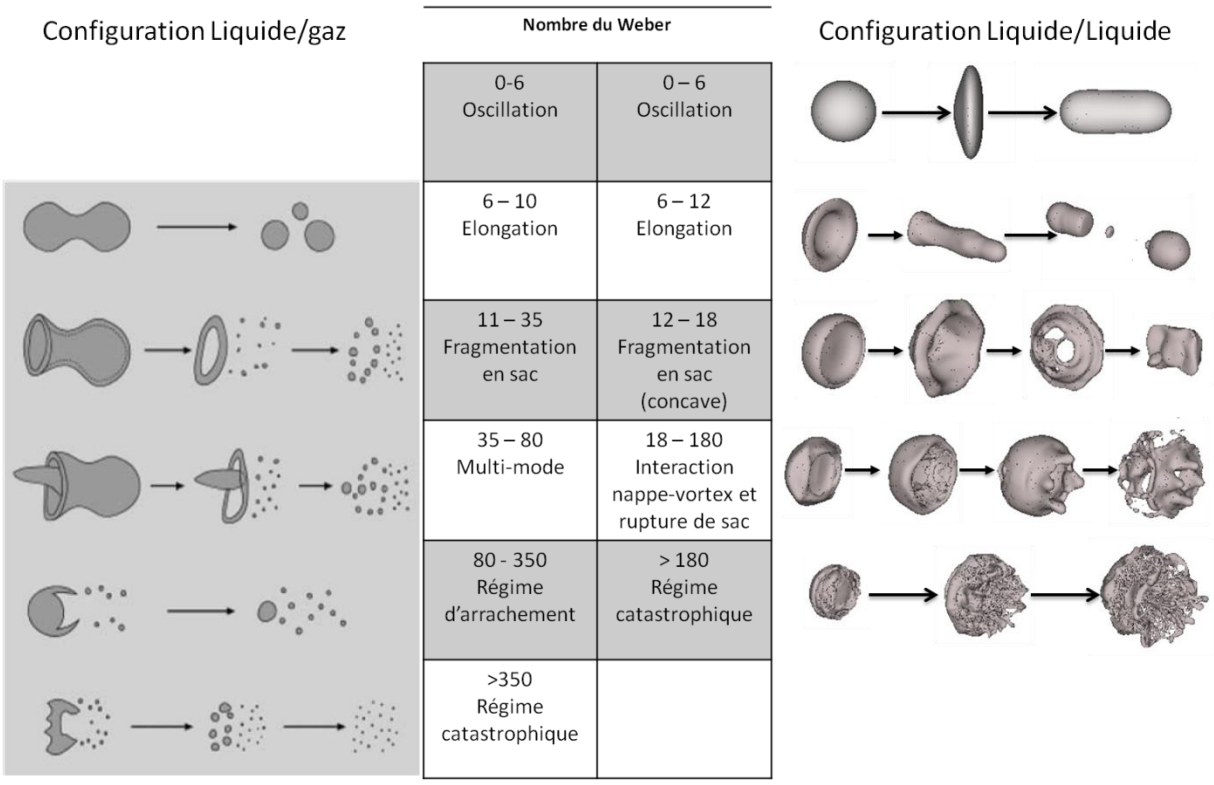


Figure 6-42 : Classification des régimes de fragmentation de gouttes. Gauche : classification pour les systèmes liquide/gaz (Guildenbecher et al., 2009) et droite, notre classification pour les systèmes liquide/liquide issue de résultats de simulations numériques effectuées dans le cadre de la thèse

Les simulations numériques effectuées sont en accord avec la tendance de variation du $\frac{SMD}{D_0}$ $Vs\ We$ relevé expérimentalement (Gelfand, 1996; Kim, 1983) et avec les résultats expérimentales obtenues avec le dispositif GaLaD au LEMTA (Hadj-Achour et al., 2015). Nous constatons une faible variation du diamètre final du Sauter pour les nombres de Weber plus petits que 30. Ceci est principalement à cause de la présence de gouttes de grand taille et à la possible coalescence des petits gouttes dans les grandes structures qui restent après la fragmentation de la nappe. Une diminution de la valeur du SMD est observé clairement à partir du $We = 17.79$, où la fragmentation de la goutte est caractérisé par la rupture de la nappe.

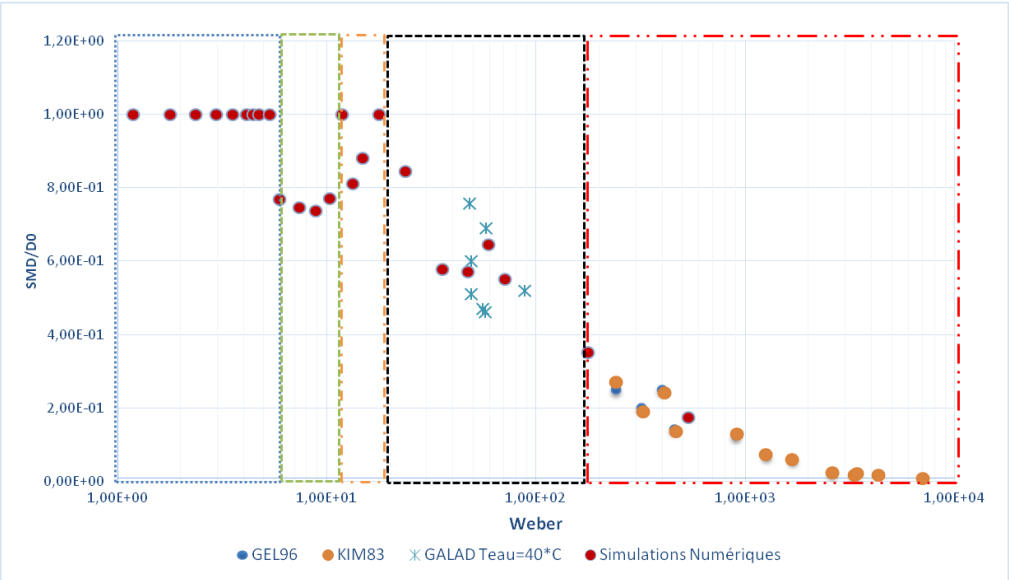


Figure 6-43 : Diamètre de Sauter de fragments ($SMD/D0$) en fonction du nombre de Weber aérodynamique. Les carrés de couleur indiquent les différents régimes de fragmentation : régime oscillatoire (Bleu), régime de fragmentation par élongation (vert), régime de rupture de nappe (orange), régime de rupture de nappe et enroulement autour de vortex (noir) et régime catastrophique, distorsion et rupture (rouge)

Nous constatons que le diamètre final de Sauter pour le régime de fragmentation par rupture de sac ($12 < We < 18$) augmente à nouveau à des valeurs proche de l'unité. Nous concluons que ceci est produit par la coalescence de petites gouttes issues de la fragmentation du sac avec l'anneau du fluide qui se referme sur l'axe de la goutte. En effet, ces gouttes sont créées à l'amont de l'écoulement (par rapport à l'anneau fluide) et sont entrainées rapidement avec une vitesse plus grande que la vitesse de l'anneau. Nous avons utilisé les valeurs du SMD après que cette coalescence ait lieu.

En négligeant le régime particulier de fragmentation par rupture du sac ($12 < We < 18$), nous pouvons décrire le diamètre de Sauter final de gouttes par la suivante fonction :

$$f_{SMD}(We) = \left(\frac{SMD}{D_0}\right)_{(We)} \approx \begin{cases} 0.85 & 6 < We < 18 \\ 25.386\, We^{-0.855} & We > 18 \end{cases}$$

Nous constatons donc une variation en $We^{-0.855}$.

Concernant la dynamique de la fragmentation, l'assomption d'une phase de déformation pour $t^* < 2\tau_{RN}$ et une phase de fragmentation totalement achevée au bout de 4 à 6 τ_{RN} n'est pas complètement cohérente avec nos simulations. Nous constatons tout d'abord que le maximum de déformation dans le sens perpendiculaire à l'écoulement se produit vers $t^* \approx 1.5$ pour les régimes de fragmentation à faible nombre de Weber.

Nous trouvons que le temps de fragmentation total diminue au fur et à mesure que le nombre de Weber augmente. Le moment où la fragmentation est considéré totalement achevé peut être exprimé en fonction du nombre du Weber tel que :

$$f_{t^*}(We) = \tau(We) \approx \begin{cases} 5 < t_f^* < 6.2 & 6 < We_0 < 18 \\ 3.5 < t_f^* < 3.0 & 18 < We_0 < 180 \\ t_f^* \approx 2 & We_0 > 180 \end{cases}$$

Ces deux caractéristiques permettent de définir un taux de fragmentation qui est fonction du nombre de Weber. Nous pouvons définir un taux de fragmentation donné par (terme source d'aire et terme source de masse):

$$\Gamma_{A_{frag}}^{+} = \frac{A_0}{\tau_{RN}}\left|\frac{1-f_{SMD}(We)}{f_{t^*}(We)}\right| \qquad \text{et} \qquad \Gamma_{frag} = \frac{\rho_d D_0 A_0}{6\tau_{RN}}\left|\frac{1-\frac{f_{SMD}(We)}{A_0}}{f_{t^*}(We)}\right|$$

Il faut tenir compte que un code eulérien pour la phase dispersé calcul sur plusieurs pas de temps la fragmentation de gouttes et un coefficient multiplicateur doit être implémenté et calibré pour avoir des résultats correctes.

Les simulations numériques effectuées nous permettent d'analyser plus en détail la dynamique de la fragmentation. Tout d'abord, nous avons calculé le déplacement du centre de masse (dans le sens de l'écoulement) en fonction du nombre de Weber (voir Figure 6-44).

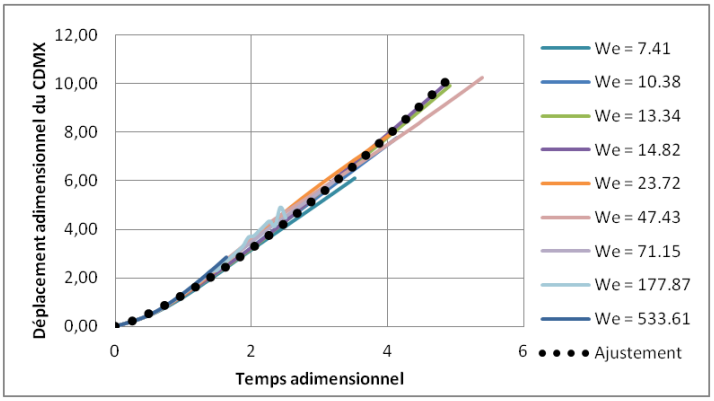


Figure 6-44 : Position x du centre de masse en fonction du temps adimensionnel pour différents régimes de fragmentation

Nous pouvons établir une seule loi, indépendante du nombre du Weber. Nous pouvons exprimer le déplacement de la manière suivante :

$$\frac{X}{D_0} = C\left(\frac{t}{\tau_{RN}}\right)^k = C\left(t\frac{\Delta V_{dc}}{D_0}\sqrt{\frac{\rho_c}{\rho_d}}\right)^k$$

Avec k un exposant qu'il faut trouver par ajustement. Nous trouvons des valeurs de $C = 1.304$ et de $k = 1.294$

6.4 CONCLUSIONS SUR LA MODELISATION DE LA FRAGMENTATION SECONDAIRE DE GOUTTES

Les simulations numériques effectuées dans le cadre de l'analyse de la fragmentation secondaire de gouttes de métal liquide par un courant d'eau nous ont permis d'identifier différents régimes de fragmentation. Ces régimes sont différents de ceux relativement bien connus pour les configurations liquide/gaz. Nous avons remarqué l'absence du régime de fragmentation en sac et multimodal. La fragmentation d'une goutte dans le cas liquide/liquide est dans la plupart de régimes caractérisé par la fragmentation de la nappe qui se forme après la déformation de la goutte. Au fur et à mesure que le nombre de Weber augmente, l'interaction entre la nappe et les structures de vortex (identifiés par le critère λ_2) sont plus importantes et un régime de fragmentation par enroulement de la nappe autour de l'anneau de vortex a été identifié. Postérieurement, la fragmentation devient trop complexe pour identifier clairement les interactions entre la goutte et les structures de vortex. Ces régimes de fragmentation sont bien sûr définis de manière préliminaire et peuvent être soumis à discussions. Un résumé de ces régimes est présenté en Figure 6-42. Dans ce chapitre :

- Nous avons présenté brièvement un processus de validation de différents paramètres nécessaires pour une simulation numérique précise et fiable de la fragmentation hydrodynamique d'une goutte
- Les caractéristiques du maillage avec raffinage itérative ont été exposées et testés sur des interfaces très déformées et de très faible épaisseur.
- Les simulations effectuées ont permis d'identifier 1 régime d'oscillation et 4 différents régimes de fragmentation
- Nous avons pu obtenir des informations qualitatives et quantitatives sur la fragmentation de gouttes liquides dans un autre liquide (Distribution de taille de particules, déformation, déplacement, vitesse, vorticité, etc.).
- Une différence claire a été observée entre la dynamique de la fragmentation de gouttes liquides dans le gaz et dans un autre liquide.

7 CONCLUSIONS

Nous avons présenté dans ce rapport, les résultats les plus significatifs de nos travaux sur la fragmentation de jets de corium dans le cadre de l'interaction corium-réfrigérant. Les diverses échelles des structures qui se développent dans le milieu environnante nous amène à étudier la fragmentation comme un phénomène multi-échelle. La fragmentation est donc le résultat d'un processus de déstabilisation primaire pilotée par les grandes échelles de l'écoulement et d'un processus de déstabilisation secondaire à petite échelle. A l'issue de chapitres bibliographies portant sur l'état de l'art de l'interaction corium-réfrigérant et de la fragmentation de jets de métal liquide à haute température et isothermes, nous avons défini les lignes directrices et les diverses hypothèses pour notre étude :

- L'état des lieux proposé s'inscrit dans un cadre général de compréhension qui n'est pas universel. Il représente cependant un consensus assez large et est conforme aux principales conclusions des travaux les plus récents, en particulier le programme SERENA-2.
- Les conséquences de l'ICR dépendent fortement des caractéristiques de la fragmentation du jet. Ces caractéristiques comme la longueur de pénétration, la taille des particules générées, les régimes de fragmentation, entre autres, pilotent globalement les divers processus physiques de l'interaction (ébullition, solidification et oxydation).
- La fragmentation des jets est le résultat de deux processus de déstabilisation (primaire et secondaire) dépendants de deux échelles différentes de l'écoulement (intégrale et locale).
- La déstabilisation primaire est générée par les effets de cisaillement entre le jet et l'écoulement environnant. Elle génère la fragmentation du jet et pilote ainsi le taux de fragmentation. Elle dépend principalement du gradient de vitesse et du rapport de densités des fluides.
- La déstabilisation secondaire est le processus de fragmentation finale des gouttes liquides et dépend des conditions locales (à l'échelle de la goutte) de l'écoulement. Le phénomène de fragmentation thermique est supposé avoir un impact mineur et le processus est supposé être piloté par l'hydrodynamique locale. La tension superficielle est un paramètre majeur du phénomène, malheureusement très incertain pour les fluides utilisés pour l'étude (en particulier pour le corium).
- La fragmentation conduit à une large gamme de diamètres de gouttes qu'il est nécessaire de modéliser pour reproduire de manière adéquate le processus de solidification et de transferts de chaleur.

L'objectif général de la thèse est d'améliorer la modélisation et la compréhension de la fragmentation des jets et de gouttes de corium. Le travail présenté dans ce rapport concerne d'une part, l'implémentation d'une nouvelle modélisation de la fragmentation du corium dans le logiciel MC3D et d'une autre part, l'étude détaillée de la fragmentation secondaire de gouttes en configuration liquide/liquide à l'aide de simulations numériques.

Nous considérons la fragmentation du corium comme le résultat de deux déstabilisations principalement dues à des effets hydrodynamiques. Dans notre proposition de découplage d'échelle, la modélisation de la fragmentation primaire vise à prendre en compte les effets des structures de grande échelle sur les instabilités qui se développent à la surface du jet. Le principal mécanisme d'instabilité est celui de Kelvin-Helmholtz que **nous proposons comme la base de notre modélisation**. Nous reprendrons la méthode utilisée dans MC3D pour calculer les propriétés moyennes autour de l'interface du jet, ce qui est nécessaire pour les calculs de l'instabilité. Nous avons considéré que la fragmentation primaire génère une distribution de taille de particules du type log-normale. Pour ce faire, nous utilisons la modélisation de type MUSIG (Multi-Size Group Approach) pour la description de la phase dispersée.

La fragmentation secondaire des gouttes issues de la fragmentation primaire est prise en compte à travers un modèle sous-maille dans MUDROPS. Initialement, le modèle MUDROPS homogène (un seul champ de vitesse pour la phase dispersé) a été utilisé. Nous constatons lors de nos calculs, que la surface de gouttes pilote tant les transferts thermiques que l'entrainement des gouttes. Pendant la fragmentation de gouttes, la surface d'échange croit très rapidement, principalement à cause de la présence de gouttes de petite taille. Cette augmentation de la surface de gouttes produit un entrainement plus rapide de la masse du liquide (grandes et petites gouttes confondues). Cet entrainement impacte fortement la fragmentation des gouttes car le gradient de vitesse entre les gouttes et le fluide environnant décroit plus rapidement que prévu. Pour pallier à ce problème, nous proposons une modélisation du champ de gouttes dispersées selon une méthodologie du type MUDROPS hétérogène. Cette modélisation comporte plusieurs champs de vitesse pour la phase dispersée, ce qui permet de

mieux modéliser la dynamique de la fragmentation. Dans cette hypothèse, la fragmentation primaire n'est pas modifiée ; le modèle MUDROPS hétérogène vise à améliorer la fragmentation secondaire et la dispersion de gouttes. Bien que la méthode hétérogène semble plus juste pour la modélisation de la fragmentation secondaire, nous constatons lors de nos calculs, que nous avons une compréhension limitée du phénomène, surtout pour les configurations liquide-liquide. Ceci est mis en évidence par les choix de paramètres de calcul et les diverses hypothèses prises pour la construction du modèle.

La modélisation de la déstabilisation primaire a été effectuée et validée avec les résultats expérimentaux de fragmentation de jets de métaux liquides à bas point de fusion (sans l'ébullition du réfrigérant). Les modèles de fragmentation montrent un bon accord avec les résultats expérimentaux et ils capturent correctement l'influence de la vitesse d'injection du jet liquide et la distribution en taille issue de sa fragmentation ; les résultats sont jugés satisfaisants. Cependant, la validation dans les situations ICE a relevée certaines divergences du modèle en fonction de paramètres numériques choisis. Il est important de souligner ici le faible nombre de résultats expérimentaux et l'incertitude des mesures (telle que reportée dans les publications). Une incertitude particulièrement gênante concerne la valeur de tension superficielle dans les fluides considérés (métaux liquides et corium) qui est incertaine au moins pour un facteur 2. Dans le cadre du projet ICE, les expériences programmées et les mesures des propriétés des matériaux associées devraient permettre de réduire ces incertitudes.

De manière à recueillir les informations manquantes sur les mécanismes de fragmentation secondaire, nous avons décidé **d'effectuer de simulations numériques** de la fragmentation de gouttes de métal liquide dans l'eau. Cette modélisation a été effectuée à l'aide du code de simulation numérique CFD Gerris. Nous avons choisi ce code car ses caractéristiques permettent d'effectuer des simulations bien résolues spatialement et temporellement avec un temps de calcul raisonnable. L'intérêt principal de ces simulations est de fournir des éléments supplémentaires pour la compréhension de la fragmentation de gouttes à faible nombre de Weber. Même dans ces conditions isothermes et à bas Weber, les simulations numériques montrent la complexité du phénomène. Nous avons essayé de comprendre plus en détail les différents régimes de fragmentation, en proposant une nouvelle classification liquide-liquide.

Les simulations du type DNS ont démontré être un outil précis et robuste pour la réalisation des expériences numériques afin de comprendre plus en détails les mécanismes qui interviennent pendant la fragmentation des gouttes de métal liquide dans l'eau. Les simulations numériques effectuées dans le cadre de l'analyse de la fragmentation secondaire de gouttes de métal liquide par un courant d'eau nous ont permis d'identifier différents régimes de fragmentation. Ces régimes sont différents de ceux relativement bien connus pour les configurations liquide/gaz. Nous avons remarqué l'absence du régime de fragmentation en sac et multimodal. La fragmentation d'une goutte dans le cas liquide/liquide est dans la plupart de régimes caractérisé par la fragmentation de la nappe qui se forme après la déformation de la goutte. Au fur et à mesure que le nombre de Weber augmente, l'interaction entre la nappe et les structures de vortex (identifiés par le critère λ_2) sont plus importantes et un régime de fragmentation par enroulement de la nappe autour de l'anneau de vortex a été identifié. Postérieurement, la fragmentation devient trop complexe pour identifier clairement les interactions entre la goutte et les structures de vortex. Ces régimes de fragmentation sont bien sûr définis de manière préliminaire et peuvent être soumis à discussions. Pour ces simulations numériques :

- Nous avons présenté brièvement un processus de validation de différents paramètres nécessaires pour une simulation numérique précise et fiable de la fragmentation hydrodynamique d'une goutte
- Les caractéristiques du maillage avec raffinage itérative ont été exposées et testés sur des interfaces très déformées et de très faible épaisseur.
- Les simulations effectuées ont permis d'identifier 1 régime d'oscillation et 4 différents régimes de fragmentation
- Nous avons pu obtenir des informations qualitatives et quantitatives sur la fragmentation de gouttes liquides dans un autre liquide (Distribution de taille de particules, déformation, déplacement, vitesse, vorticité, etc.).
- Une différence claire a été observée entre la dynamique de la fragmentation de gouttes liquides dans le gaz et dans un autre liquide.

Malgré les résultats encourageants obtenus dans ce rapport, des incompréhensions persistent au niveau de la physique de la fragmentation primaire et secondaire, notamment dans les situations multiphasiques. Le processus de fragmentation implémenté nécessite une modélisation plus détaillée concernant l'impact du milieu ambiant diphasique (eau en ébullition) sur la fragmentation et l'impact de la solidification doit rapidement être mieux caractérisé.

8 ANNEXES

8.1 DÉFINITION DES DIAMÈTRES MOYENS

Lors de la fragmentation des jets de métaux liquides ainsi que dans la plupart des processus de fragmentation, la taille de fragments produits peut être variée. Ces gouttes constituent une distribution en tailles de particules.

La distribution en tailles de particules est une fonction $f_{(D)}$[28] (continue ou discontinue par morceaux) qui donne des informations concernant la fraction massique des gouttes d'un certain diamètre. Cette fonction est obtenue de manière expérimentale généralement par une méthode de tamisage. Le résultat est une fonction discontinue par morceaux en fonction de la taille des tamis utilisés (Figure 8-1). L'intégrale de cette fonction de distribution dans l'intervalle de diamètres est égale à 1, ce qui représente un 100% de gouttes.

$$\int_0^\infty f_{(D)} dD = 1$$

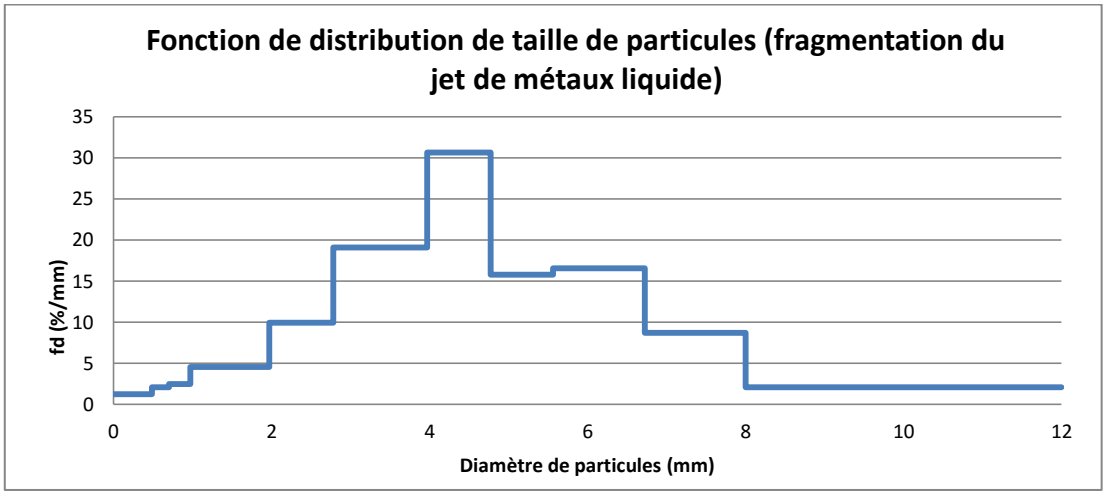


Figure 8-1: Fonction de distribution de taille de particules issu des essais IEMS à $V = 2\frac{m}{s}$. D'après (Abe et al., 2006)

Pour comparer les résultats expérimentaux avec les données numériques, l'utilisation des diamètres moyens représentatifs ou effectifs de cette distribution s'avère nécessaire. Il existe sur ce point des controverses car les analyses récentes montrent qu'il n'existe pas de diamètre représentatif de l'ensemble des processus physiques. Le logiciel MC3D utilise le diamètre de Sauter moyen, lequel fait intervenir l'aire de gouttes, laquelle pilote les échanges de quantité de mouvement et les transferts thermiques.

8.1.1 DIAMÈTRE DE SAUTER MOYEN

Le diamètre de Sauter (SMD ou D_{32}) est défini comme le diamètre d'une sphère qui a le même rapport volume/surface que le groupe de particules considérées. Il est défini selon l'équation suivante :

$$SMD = \frac{1}{\int_0^\infty \frac{f_{(d)}}{D} dD}$$

La fonction $f_{(D)}$ issue de résultats expérimentaux est discontinue par morceaux (Figure 8-1), ce qui permet de définir le diamètre de Sauter moyen en fonction des valeurs $f_{(d_i)}$ et les diamètres initiaux (d_i) et finale (d_{i+1}) de chaque morceau (où NC est le nombre total des morceaux)

[28] Nous considérons normalement une fonction de distribution en termes de la masse de gouttes et non pas en fonction de leur nombre. Ce dernier s'appelle fonction de densité en nombre de gouttes.

$$SMD_{global} = \frac{1}{\int_0^{\infty} \frac{f_{(d)}}{D} dD} \approx \frac{\sum_{i=1}^{i=NC} f_{(d_i)} * (d_{i+1} - d_i)}{\sum_{i=1}^{i=NC} f_{(d_i)} \ln\left(\frac{d_{i+1}}{d_i}\right)}$$

8.1.2 DIAMÈTRE MÉDIAN

Le diamètre médian est un autre diamètre effectif de la distribution utilisé dans le milieu expérimental. Ce diamètre est défini comme le diamètre à 50% de masse cumulée.

$$\int_0^{D_{0,50}} f_{(D)} dD = 0.5$$

Ceci est facilement calculé à partir des résultats expérimentaux, car il peut être déduit visuellement du graphe de masse cumulée (Figure 8-2) ou bien par une simple interpolation linéaire entre les valeurs au tour de 50 % en masse cumulée. Du point de vue numérique et physique, ce diamètre ne représente pas une moyenne classique et n'a pas de signification physique particulière. Cependant, le $D_{0,50}$ est facile à déterminer (il suffit d'avoir la moitié du spectre) et peut être utile pour comparer les résultats numériques et les données expérimentales ainsi que pour déterminer l'étalement de la distribution de taille de particules s'il est accompagné du diamètre de Sauter moyen (cas de la loi log-normale).

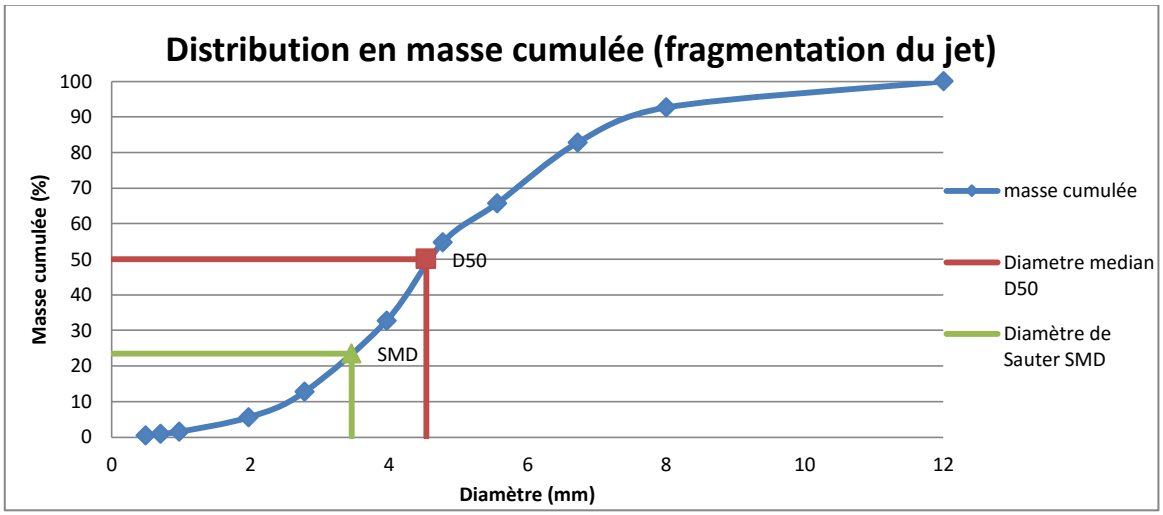


Figure 8-2: Distribution en masse cumulée, diamètre médian et diamètre du sauter pour l'essai IEMS à V=2 m/s. D'après (Abe et al., 2006)

8.2 MODELE D'INSTABILITE DE KELVIN-HELMHOLTZ

Nous supposons un écoulement plan potentiel pour les deux phases :

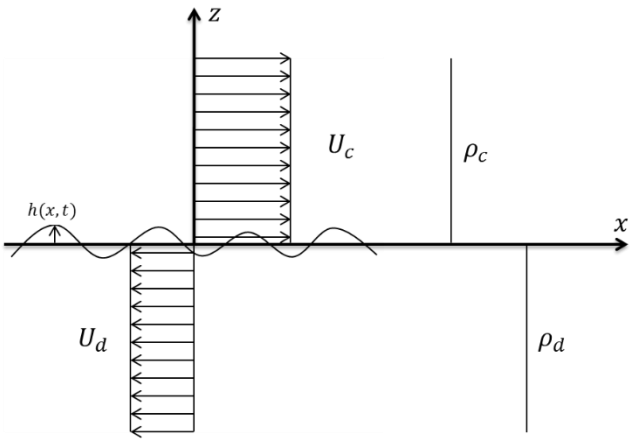


Figure 8-3 : Schéma de l'instabilité de cisaillement des écoulements parallèles du type Kelvin-Helmholtz

Les vitesses des fluides sont définies tels que :

- Vitesse parallèle à l'interface : $u_i = U_i + u_i'$
- Vitesse perpendiculaire à l'interface : $w_i = w_i'$

Avec $i = c$ côté gaz et $i = d$ côté liquide

$$(u', w') = \nabla\phi \text{ avec } \phi \equiv \phi_{(x,z,t)} \ (1)$$

Forme linéarisée du Navier-Stokes :

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + U\frac{\partial}{\partial x}\right)\overrightarrow{u'} = -\boldsymbol{\nabla} p' \ (2) \text{ et } \boldsymbol{\nabla}\cdot\overrightarrow{u'} = 0 \ (3)$$

L'équation de continuité ($\boldsymbol{\nabla}\cdot\overrightarrow{u'} = 0$) devient l'équation de Laplace, tel que :

$$\Delta\phi = 0 \ (4)$$

Nous supposons une solution de la forme (décomposition en modes normaux) :

$$\phi_i = A_i e^{skz} e^{\sigma t + ikx} \ (5)$$

Avec $s = 1$ pour $i = d$ et $s = -1$ pour $i = c$

k Correspond au nombre d'onde de la perturbation ($k = \frac{2\pi}{\lambda}$) et il est réel lors d'une analyse temporelle de l'instabilité. Le terme e^{skz} assure l'atténuation des perturbations loin de l'interface.

De la même forme, l'interface est définie tel que :

$$h = h_0 e^{\sigma t + ikx} \ (6)$$

Les vitesses perpendiculaires à l'interface sont définies comme étant :

$$w_i' = \frac{\partial h}{\partial t} + U_i\frac{\partial h}{\partial x} \ (7)$$

Conditions limites :

➔ Egalité des déplacements à l'interface :

$$\begin{aligned}(\sigma + ikU_c)h_0 e^{\sigma t + ikx} &= -kA_c e^{-kz} e^{\sigma t + ikx} = w_c' \\ (\sigma + ikU_d)h_0 &= kA_d e^{kz} e^{\sigma t + ikx} = w_d'\end{aligned} \ (8)$$

➔ Saut de pression à l'interface :

$$-p_c + p_d = -\sigma\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \ (9)$$

En utilisant l'équation de quantité de mouvement (2) et l'équation de continuité (3), nous pouvons obtenir la dérivée seconde de la pression (p_c et p_d):

$$\rho_c\left(\frac{\partial^2 w_c'}{\partial t\partial z} + U_c\frac{\partial^2 w_c'}{\partial x\partial z}\right) = \frac{\partial^2 p_c}{\partial x^2} \ (10)$$

En dérivant selon x l'équation (9) et en remplaçant (10) en (9), nous obtenons :

$$-\rho_c\left(\frac{\partial^2 w_c'}{\partial t\partial z} + U_c\frac{\partial^2 w_c'}{\partial x\partial z}\right) + \rho_d\left(\frac{\partial^2 w_d'}{\partial t\partial z} + U_d\frac{\partial^2 w_d'}{\partial x\partial z}\right) = -\sigma\frac{\partial^4 h}{\partial x^4} \ (11)$$

En remplaçant les expressions pour w_c', w_d' (8) et h (6), nous obtenons l'équation suivante :

$$\rho_c(\sigma + ikU_c)^2 + \rho_d(\sigma + ikU_d)^2 = -\sigma k^3 (12)$$

La solution pour σ en fonction de k est :

$$\sigma = -\frac{ik(\rho_c U_c + \rho_d U_d)}{(\rho_c + \rho_d)} + \sqrt{\frac{\rho_c\rho_d k^2(\Delta V_{dc})^2}{(\rho_c + \rho_d)^2} - \frac{\sigma k^3}{(\rho_c + \rho_d)}} \ (13)$$

Avec : $\Delta V_{jc} = U_d - U_c$

Partie imaginaire :

$$\sigma_i = -\frac{k(\rho_c U_c + \rho_d U_d)}{(\rho_c + \rho_d)}, \text{ Célérité de la perturbation}$$

Partie réelle :

$$\sigma_r = \sqrt{\frac{\rho_c\rho_d k^2(\Delta V_{dc})^2}{(\rho_c + \rho_d)^2} - \frac{\sigma k^3}{(\rho_c + \rho_d)}}, \text{ Taux de croissance de la perturbation}$$

Le maximum de taux de croissance σ_r se trouve quand $\frac{d\sigma_r}{dk} = 0$:

$$k_{maximum} = \frac{2}{3}\,\frac{(\Delta V_{dc})^2 \rho_d \rho_c}{\sigma(\rho_d+\rho_c)}, \qquad \text{où} \qquad \lambda_{maximum} = \frac{2\pi}{k_{maximum}} \text{ longueur d'onde la plus excitée}$$

Pour le logiciel MC3D, nous utilisons $c_i = \frac{\sigma_r}{k}$ (Vitesse caractéristique de la croissance de la perturbation):

$$c_i = \frac{\sqrt{\rho_c \rho_d (\Delta V_{dc})^2 - k(\rho_c+\rho_d)\sigma}}{\rho_c+\rho_d}, \text{ où le taux de fragmentation est proportionnel au } c_i$$

En remplaçant la valeur de $k_{maximum}$ dans l'expression de la vitesse caractéristique de la perturbation, nous obtenons l'expression suivante:

$$c_i = \frac{\Delta V_{jc}\sqrt{\frac{1}{3}\rho_d \rho_c}}{\rho_c + \rho_d}$$

Cette expression montre que le taux de fragmentation est indépendant de la tension superficielle.

Nous pouvons relier les grandeurs caractéristiques de l'instabilité de Kelvin-Helmholtz avec les grandeurs caractéristiques de fragmentation grâce aux coefficients de proportionnalité N_f et N_d. Nous relions la vitesse caractéristique de la fragmentation avec le taux de fragmentation et la longueur d'onde la plus instable avec la taille caractéristique de particules créées.

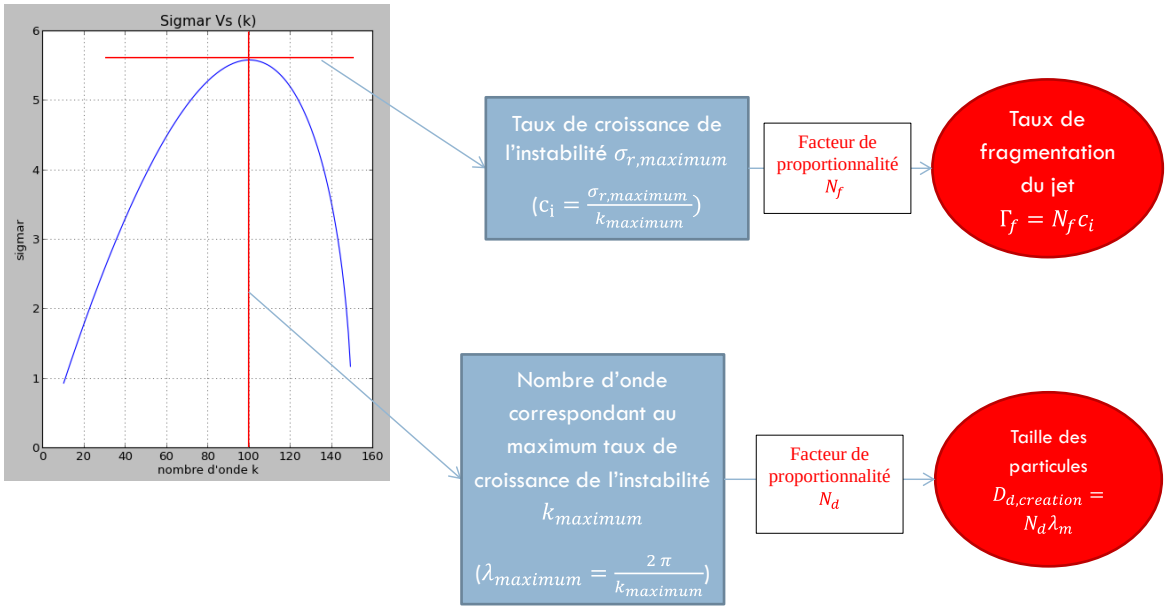


Figure 8-4 : Valeurs caractéristiques de l'instabilité de KH et leurs correspondances par rapport aux ordres de grandeur de la fragmentation

8.3 ESSAIS DE FRAGMENTATION DE JETS DE METAUX LIQUIDES A BASSE TEMPERATURE, SANS EBULLITION DU REFRIGERANT

L'intérêt principal de ces essais est d'obtenir des informations plus précises sur les processus d'instabilité et fragmentation. Ces essais sont bien sûr nettement moins couteux que les essais sous conditions ICR et peuvent donc être répétés plusieurs fois. La visualisation est bien sûr plus aisée et des techniques de mesures optiques peuvent être mises en œuvre (ombroscopie et techniques laser (e.g. PIV, LDA, LIF)). Cependant, les données restent encore très limitées sur ce point.

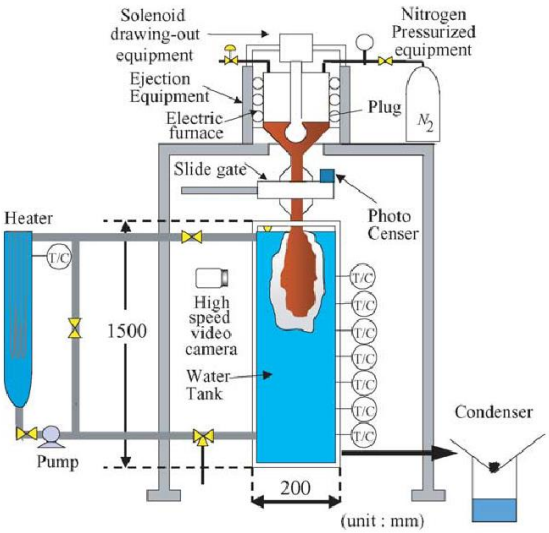


Figure 8-5 : Diagramme schématique du dispositif expérimental utilisé par (Abe et al., 2006)

Ils utilisent des métaux liquides afin d'être suffisamment représentatifs du point de vue de rapport de densité. Ainsi, les jets sont dans un régime inertiel, avec de faibles effets de flottabilité. Les matériaux utilisés dans ces expériences ont un bas point de fusion afin de s'affranchir des problèmes de vaporisation qui gênent l'instrumentation et pourraient éventuellement engendrer des explosions. Par exemple, les essais effectués par l'institut IKE (Burger et al., 1995) avec métal de Wood à une température au-dessous du point d'ébullition de l'eau, permettent d'étudier le processus de fragmentation sans prendre en compte la génération du vide (pas de changement de phase du réfrigérant).

Nous notons d'un autre côté que les essais effectués par l'institut IGCAR (Narayanan et al., 2006) permettent d'étudier la fragmentation du jet à différents régimes d'ébullition (nucléée, transition et ébullition en film) sans que le risque d'explosion soit élevé. Cependant, ces essais sont réalisés dans des conditions où la solidification semble avoir un rôle important (cadre de l'interaction corium-sodium) et sont donc difficilement exploitables. Malgré le nombre d'essais effectués et les divers phénomènes étudiés, les résultats publiés sont cependant assez limités et nous ne pouvons qu'en tirer des tendances générales sur le processus de fragmentation du jet.

Comme nous pouvons le voir dans la Figure 8-6, conclure sur le mécanisme spécifique de fragmentation du jet semble assez difficile. Nous constatons la présence d'un film de vapeur (ou d'air) qui empêche la fragmentation du jet pendant les premiers instants de l'interaction. Par la suite, le processus de fragmentation se produit principalement à la colonne du jet. Nous constatons que le processus de fragmentation n'est pas homogène le long de la surface du jet et qu'il est difficile de distinguer les processus de fragmentation primaire et secondaire à proprement parler.

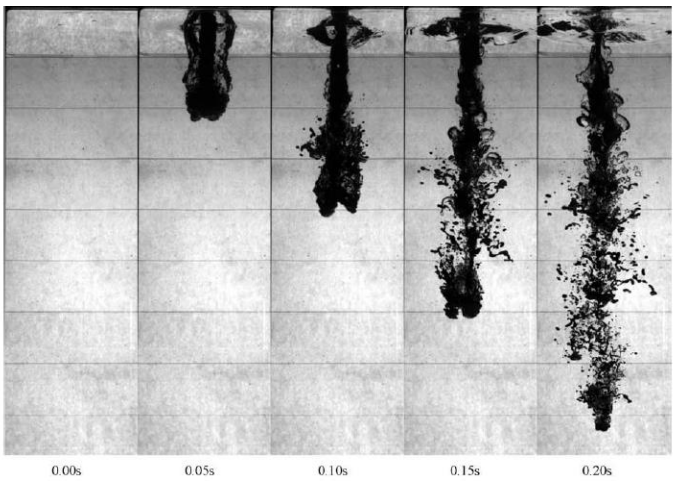


Figure 8-6 : Exemple de fragmentation du jet à bas point de fusion ($D_j = 20\ mm$) (Abe et al., 2006)

Cette complexité du processus de fragmentation (même dans ce cas sans ébullition) ne peut pas être reproduite de manière détaillée avec les codes de calcul ICR. Cependant, les données expérimentales

issues de ces expériences peuvent être de grande utilité pour la validation des modèles. Les données qui nous intéressent sont principalement :

- la longueur de rupture du jet ;
- la distribution en taille de fragments recueillis, le SMD et le D_{50} ;
- la forme de fragments recueillis (Figure 8-7 et Figure 8-8)

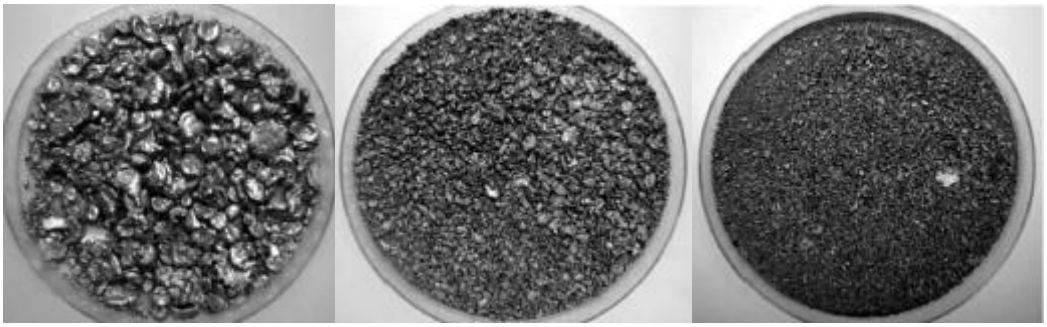


Figure 8-7 : Images de fragments solidifies pour différentes vitesses d'injection. gauche) 2,10 m/s, centre) 3,92 m/s et droite) 5,0 m/s (Abe et al., 2006)

La forme des fragments recueillis nous renseigne sur la compétition entre la fragmentation et la solidification. Il est important dans un premier temps de ne considérer que des cas dans lesquels la solidification est supposée avoir une influence faible. Dans la Figure 8-7, nous constatons que tous les fragments, même les plus gros ont des formes ovoïdes. Ceci suppose que la solidification a survenu alors que les gouttes étaient dans un état relativement stable du point de vue de la fragmentation (nombre du Weber en-dessous du We_{cr}). Inversement, une morphologie telle que celle de la Figure 8-8 (essais IGCAR) indique une fragmentation incomplète et une solidification prématurée du métal (compétition solidification et fragmentation). De plus, la mesure de la dimension caractéristique de ces débris est, de toute évidence, sujette à caution.

Figure 8-8 : Morphologie de débris indiquant une solidification avant fragmentation complète (IGCAR, (Narayanan et al., 2006)**)**

La Figure 8-9 fournit les mesures des longueurs de pénétration pour divers essais. Les essais effectués par IKE (Burger et al., 1995) balayent une large gamme de vitesses d'injection du jet et constituent la seule référence exploitable pour des vitesses de contact jet-réfrigérant supérieures à $5\ m/s$. Cependant, ces essais ont été réalisés avec des diamètres de jet très petits ($4\ mm$ dans l'ensemble) et doivent donc être étudiés avec précaution. Les essais effectués à plus faible vitesse se concentrent sur une bande de données entre $20 < L/D < 30$. Il est difficile de relever une tendance nette. Rappelons que le modèle d'Epstein revient dans le cas présent à considérer une longueur de rupture constante, de l'ordre de 25. En première approximation et vue les fortes incertitudes liées à la notion de longueur de rupture, nous pouvons conclure que ce modèle donne une bonne estimation. Nous constatons également que la longueur de rupture est du même ordre de grandeur que pour les jets de corium, bien qu'un peu plus grande dans l'ensemble.

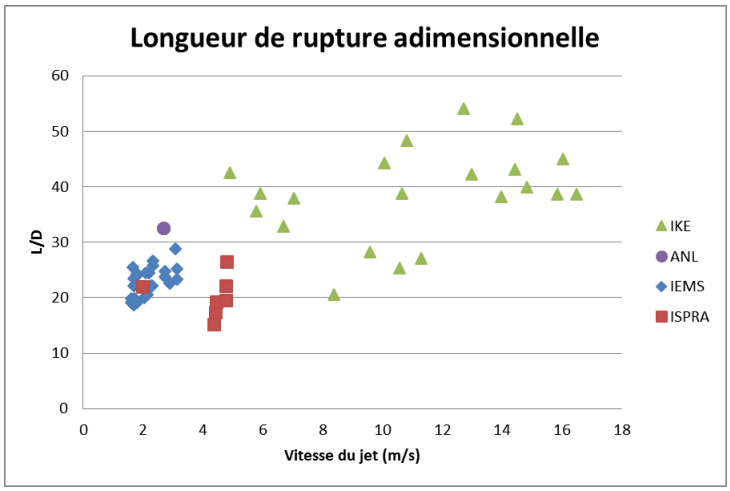


Figure 8-9 : Longueur de rupture du jet de divers essais en métaux liquides. Les résultats IKE, ANL et ISPRA sont issus de (Burger et al., 1995). IEMS : (Abe et al., 2006) et (Matsuo et al., 2008)

La taille des fragments constitue un des points clés à évaluer pour la précision de simulations de l'ICR. En effet, la surface des gouttes pilote de nombreux phénomènes de l'ICR, comme les transferts thermiques, la production d'hydrogène et/ou la solidification. La distribution en taille est obtenue en analysant les débris solides qui se déposent au fond du réservoir. Cependant, cette information ne permet pas d'obtenir des informations directes par rapport à la nature de la fragmentation (primaire ou secondaire). La Figure 8-10 fournit le diamètre médian ($D_{0,50}$) des fragments recueillis pour diverses expériences en fonction de la vitesse du jet dans le réfrigérant.

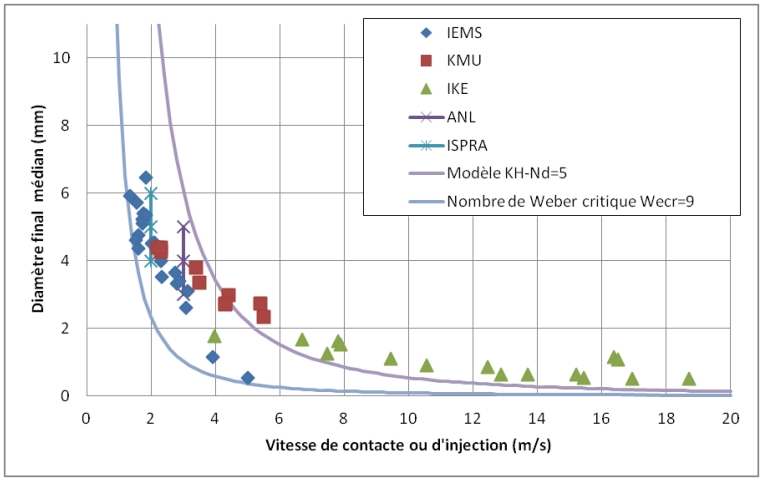


Figure 8-10 : Diamètre médian (D_{50}) des fragments pour divers essais en métaux liquides. Les résultats IKE, ANL et ISPRA sont issus de (Burger et al., 1995). Dans cette référence les auteurs ne spécifient pas la nature du diamètre mesuré. Les données IEMS sont issues de (Abe et al., 2006) et (Matsuo et al., 2008). KMU de (Bang et al., 2003) ; Pour IEMS et KMU le diamètre affiché correspond au diamètre médian.

Ces résultats montrent une tendance générale de diminution nette de la taille des particules avec la vitesse du contact jet-réfrigérant. Ces résultats présentent moins de divergence que pour la longueur de rupture (notamment pour les résultats expérimentaux d'IKE) et permettent d'obtenir une information plus précise sur la fragmentation. Nous notons cependant deux points notablement divergents, correspondant à des résultats d'Abe et al. (IEMS,(Abe et al., 2006)) à plus haute vitesse. Ceux-ci indiquent une pulvérisation très fine, sans aucun rapport avec les résultats des tests de KMU. Toutefois, seuls deux résultats à ces vitesses plus élevées ont été fournis et il est difficile de se prononcer sur leur signification.

Superposées aux résultats expérimentaux, se trouvent les courbes de la taille théorique de fragments calculée par le modèle de Kelvin-Helmholtz ($D_d = N_d \lambda_m$ avec $N_d = 5$ (valeur couramment utilisée dans MC3D)) et par l'hypothèse du nombre de Weber caractéristique ($We = 9$) pour un jet de métal de Wood injecté dans l'eau. En effet, ces deux courbes représentent une forme conservative de l'échelle caractéristique de la fragmentation primaire (longueur d'onde du modèle KH) et l'échelle de la fragmentation secondaire (taille caractéristique de gouttes filles). Cependant, ces deux modèles théoriques sont calculés selon la vitesse initiale d'injection ou du contact jet/surface libre du

réfrigérant. Cette vitesse relative diminue pendant la fragmentation à cause du ralentissement du jet et des gouttes, ainsi que par l'entrainement du réfrigérant.

La fragmentation des jets est un processus multi-échelle qui a comme résultat une variété de tailles de particules. La valeur du diamètre médian ($D_{0,50}$) et/ou du SMD sont seulement des valeurs représentatives de la distribution de taille de particules recueillies. En effet, l'intervalle de taille de particules peut varier jusqu'à presque deux ordres de grandeur comme l'indique les résultats de l'essai IEMS à une vitesse de 5 m/s (Figure 8-11). La dispersion (étalement) de la répartition de taille de particules est couramment définie par le ratio entre le diamètre médian et le diamètre de Sauter. En effet, pour la plupart des résultats expérimentaux d'atomisation d'un liquide par un courant gazeux, la distribution de taille de particules suit une loi log-normale, laquelle peut être représentée par le diamètre médian et le SMD. Un exemple de ce ratio est présenté dans la Figure 2-12 pour les cas de fragmentation des jets de métaux liquide.

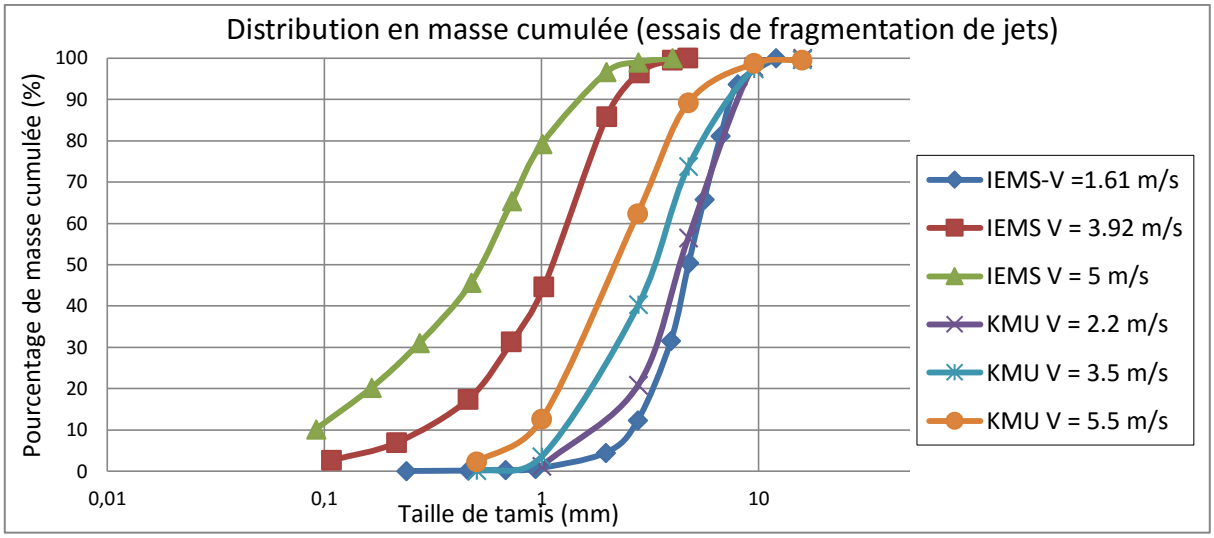


Figure 8-11 : Distribution en masse cumulé pour quelques essais de fragmentation du jet de métaux liquide à bas point de fusion. Les données IEMS sont issues de (Abe et al., 2006) et (Matsuo et al., 2008) ; Les données KMU de (Bang et al., 2003)

Nous constat que la plupart des données se trouvent dans une gamme de valeurs comprise entre 1 et 1.5 de manière quasi-indépendante de la vitesse initiale du jet. Les deux points IEMS aux valeurs supérieures à deux constituent des valeurs difficiles à justifier et indiquent une distribution assez étalée. De même, les donnes IGCAR présentent une variation entre 1.4 et 2.9 pour une même vitesse d'injection qui pourrait être la conséquence de la solidification des fragments avant que le processus de fragmentation ne soit complet. Ceci est potentiellement dû à la variation de la température du réfrigérant pour les divers essais.

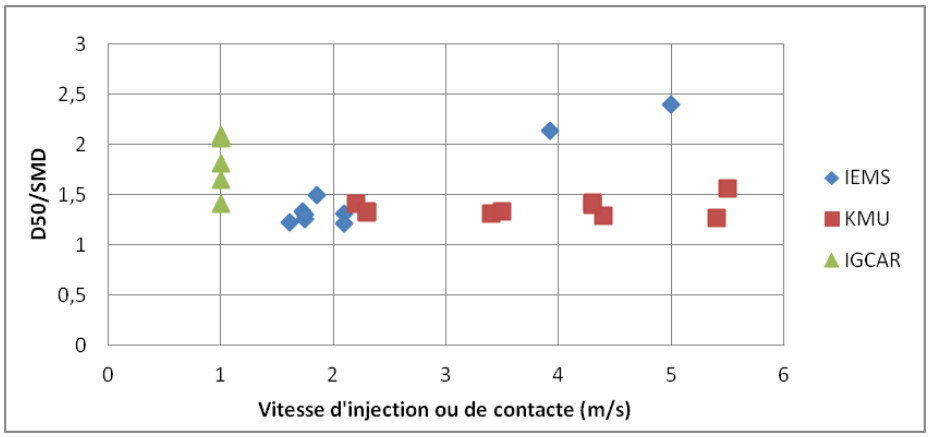


Figure 8-12 : Rapport entre le $D_{0,50}$ et le Diamètre de Sauter moyen pour divers essai de fragmentation des jets de métaux liquide à bas point de fusion. Les données IEMS sont issues de (Abe et al., 2006) et (Matsuo et al., 2008) ; KMU de (Bang et al., 2003) et les résultats IGCAR de (Narayanan et al., 2006)

Nous présentons dans les Tableau 11 et Tableau 12 une synthèse de principaux essais de fragmentation du jet de métal liquide à bas point de fusion ainsi que les propriétés physiques des métaux utilisées.

Nous constatons particulièrement une divergence concernant les valeurs de propriétés physiques de métal, notamment sur la tension de surface.

Nom, année et référence	Description de l'essai	Conditions et Variables d'étude	Données ou informations disponibles
IGCAR, (Narayanan et al., 2006)	Matériaux utilisées : Jet : Métal de Woods Réfrigérant : Eau	Température du métal : $98\,°C < T_j < 495\,°C$ Température du réfrigérant : $T_C < 65\,°C$ Profondeur du réfrigérant : $380\,mm < h_C < 1400\,mm$ Diamètre d'injection : $D_j = 8\,mm$ Masse du métal injectée : $200\,g < m_j < 500\,g$ Chute libre dans gaz : NO	-Distribution en taille pour les fragments plus petits que $10\,mm$, pour différentes profondeurs du réfrigérant, températures du métal, masse du métal injecté et température du réfrigérant -Position du front du jet à différentes températures du métal et du réfrigérant -Images des débris recueillis
KMU, (Bang et al., 2003)	Matériaux utilisées : Jet : Métal de Wood Réfrigérant : Eau	Température du métal : $T_j < 100\,°C$ Température du réfrigérant : $20°C < T_C < 70\,°C$ Profondeur du réfrigérant : $h_C = 720\,mm$ Diamètre d'injection : $D_j = 10\,mm;\ 20\,mm$ Masse du métal injectée : $m_j = 1\,kg$ (pour $D_j = 20\,mm$) $m_j = 0.3\,kg$ (pour $D_j = 10\,mm$) Chute libre dans gaz : OUI $h_{chute} = 240\,mm$ Vitesse d'injection ou contact avec le réfrigérant : $2\frac{m}{s} < V_j < 5\frac{m}{s}$	-Distribution en taille de fragments à différents vitesses et diamètres d'injection -Images des débris recueillis
ANL, (B. Spencer et al., 1986)	Matériaux utilisées : Jet : Métal de Wood et cerrotru	Température du métal : $455\,°C < T_j$ Température du réfrigérant : $20°C < T_C < 80\,°C$ Profondeur du réfrigérant :	-Longueur de rupture du jet pour les essais avec métal de Wood et Cerrotru - Quelques commentaires qualitatifs sur les tailles de particules

	Réfrigérant : Eau	$h_C = 1460\ mm$ Diamètre d'injection : $D_j = 25\ mm$ pour métal de woods $D_j = 20\ mm$ pour cerrotru Masse du métal injectée : $m_j = 2.0\ kg$ (pour métal de Woods) $4\ kg < m_j < 6\ kg$ (pour cerrotru) Chute libre dans gaz : OUI (dans l'air et dans la vapeur d'eau) Vitesse d'injection ou contact avec le réfrigérant : $V_j < 3\frac{m}{s}$	
IKE, (Burger et al., 1995)	Matériaux utilisées : Jet : Métal de Wood Réfrigérant : Eau	Température du métal : $T_j = 90\ °C$ Température du réfrigérant : $20°C < T_C < 80\ °C$ Diamètre d'injection : $D_j = 4\ mm$ Chute libre dans gaz : OUI Vitesse d'injection ou contact avec le réfrigérant : $3\frac{m}{s} < V_j < 20\frac{m}{s}$	-Taille de fragments à différents vitesses -Taille de particules des expériences ANL et ISPRA -Position et longueur de rupture du jet à différents vitesses du contact
IEMS 2008 (Matsuo et al., 2008)	Matériaux utilisées : Jet : U-alloy 78 Réfrigérant : Eau	Température du métal : $T_j = 270\ °C$ Température du réfrigérant : $60\ °C < T_C < 70\ °C$ Profondeur du réfrigérant : $h_C = 1500\ mm$ Diamètre d'injection : $D_j = 10\ mm;\ 15\ mm; 20\ mm$ Masse du métal injectée : $200\ g < m_j < 400\ g$ Chute libre dans gaz : OUI	-Longueur de rupture du jet pour différentes diamètres d'injection -Diamètre médian de masse pour différentes diamètres d'injection et vitesse du contacte

		Vitesse d'injection ou contact jet/réfrigérant : $1.6\,\frac{m}{s} < V_j < 3.13\,\frac{m}{s}$	
IEMS 2006 (Abe et al., 2006)	Matériaux utilisées : Jet : U-alloy 78 Réfrigérant : Eau	Température du métal : $T_j = 270\,°C$ Température du réfrigérant : $T_C = 70\,°C$ Profondeur du réfrigérant : $h_C = 1500\,mm$ Diamètre d'injection : $D_J = 7\,mm;\ 10\,mm;\ 15\,mm; 20\,mm$ Masse du métal injectée : $100\,g < m_j < 400\,g$ Chute libre dans gaz : OUI Vitesse d'injection ou contact avec le réfrigérant : $2\,\frac{m}{s} < V_j < 5\,\frac{m}{s}$	-Longueur de rupture du jet pour différents diamètres d'injection, températures du métal, températures du réfrigérant -Vitesse du front du jet pour différents diamètres d'injection - Distribution en taille de fragments à différentes vitesses et diamètres d'injection ainsi qu'aux différentes températures du métal et du réfrigérant
(Schneider, 1993)	Matériaux utilisées : Jet : Cerrobend Réfrigérant : Freon-11	Température du métal : $T_j < 110\,°C$ Température du réfrigérant : $T_C < 23.8\,°C$ Profondeur du réfrigérant : $320\,mm < h_C < 1140\,mm$ Diamètre d'injection : $D_J = 3.2\,mm;\ 6.4\,mm;\ 12.7\,mm;\ 19\,mm;$ Masse du métal injectée : $500\,g < m_j < 15500\,g$ Chute libre dans gaz : OUI Vitesse d'injection ou contact avec le réfrigérant : $2.2\,\frac{m}{s} < V_j < 6.0\,\frac{m}{s}$	-longueur de rupture pour les différents tests -Quantité de vapeur générée - Distribution en taille de fragments pour les différents tests

Tableau 11 : Synthèse de principales caractéristiques des essais de fragmentation de jets de métaux liquides à bas point de fusion

Matériaux	Propriété physique	Magnitude
Métal de Wood (Eutectique)	Température de fusion	$70\,°C$ (Bang et al., 2003; Soni, 2007)

Composition : $50\ \%\ Bi;\ 25\ \%\ Pb;\ 12{,}5\ \%\ Sn;\ 12{,}5\ \%\ Cd$ (Narayanan et al., 2006; B. Spencer et al., 1986) $60\%\ Bi, 20\%\ Sn, 20\ \%\ In$ (Kondo et al., 1995)	$T_{solidus}\ (K)$	$73\ °C$ (Narayanan et al., 2006; B. Spencer et al., 1986) $79\ °C$ (Kondo et al., 1995)
	Masse volumique en état solide $\rho_{solidus}\ \left(\frac{kg}{m^3}\right)$	8400 (Kondo et al., 1995) 9383 (Bang et al., 2003) 9480 (Soni, 2007)
	Masse volumique en état liquide $\rho_{liquidus}\ \left(\frac{kg}{m^3}\right)$	$9200\ (\text{à}\ 1000\ °C)$ (B. Spencer et al., 1986) $9450\ (\text{à}\ 80\ °C)$ (Narayanan et al., 2006) 9480 (Soni, 2007)
	Tension de surface $\sigma\ \left(\frac{N}{m}\right)$	1.2 (Soni, 2007) 0.38 (Narayanan et al., 2006) ≈ 1 (Bang et al., 2003)
	Viscosité dynamique $\mu\ (Pa * s)$	$3.997 * 10^{-3}$ (Narayanan et al., 2006) $1.877 * 10^{-3}$ (Bang et al., 2003)
Cerrotru (Eutectique) $58\%\ Bi;\ 42\%\ Sn$ (B. Spencer et al., 1986)	Température de fusion $T_{solidus}\ (K)$	$138\ °C$ (B. Spencer et al., 1986)
	Masse volumique en état solide $\rho_{solidus}\ \left(\frac{kg}{m^3}\right)$	8670 (B. Spencer et al., 1986)
U-alloy 78 $Bi;\ Sn;\ In$ (Abe et al., 2006, 2004; Matsuo et al., 2006)	Température de fusion $T_{solidus}\ (K)$	$78.8\ °C$ (Abe et al., 2006, 2004; Matsuo et al., 2006)
	Masse volumique en état solide $\rho_{solidus}\ \left(\frac{kg}{m^3}\right)$	8183 (Abe et al., 2006, 2004; Matsuo et al., 2006)
	Tension de surface $\sigma\ \left(\frac{N}{m}\right)$	≈ 1 (Abe et al., 2006, 2004; Matsuo et al., 2006)

Tableau 12 : Matériaux typiques utilisées pour les essais de fragmentation des jets métalliques à bas point de fusion

8.4 LOI LOG-NORMALE

8.4.1 LOI LOG-NORMALE

La loi log-normale est caractérisée par la donnée du diamètre de Sauter (SMD, moyenne en surface) et du diamètre médian en masse ($D_{0,50}$). La fonction de densité de probabilité est donné par :

$$f_{v(D)} = \frac{1}{D\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{\ln(D)-\mu}{\sigma}\right)^2}, \qquad \mu = \ln\left(D_{0,50}\right) \quad \sigma = \sqrt{2\ln\left(\frac{D_{0,50}}{SMD}\right)}$$

L'intégrale de la distribution entre deux bornes fournit la répartition[29] de la masse dans chaque classe. La masse cumulée est calculé comme l'intégrale de $f_{v(D)}$ entre $[0, D]$:

$$F_{(D)} = \int_0^D \frac{1}{D\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{\ln(D)-\mu}{\sigma}\right)^2} dD = \frac{1}{2}\left(1 + \mathrm{erf}\left(\frac{\ln(D)-\mu}{\sqrt{2}\sigma}\right)\right)$$

Cette intégrale tend, par construction, vers 1 quand D tend vers l'infini.

L'intégrale de la fonction de distribution $f_{v(D)}$ entre les deux diamètres bornes (d_i et d_{i+1}) est calculé comme suit :

$$F_{(d_{i+1})} - F_{(d_i)} = \int_{d_i}^{d_{i+1}} \frac{1}{D\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{\ln(D)-\mu}{\sigma}\right)^2} dD = \frac{1}{2}\left(1 + \mathrm{erf}\left(\frac{\ln(D)-\mu}{\sqrt{2}\sigma}\right)\right)\Bigg|_{d_i}^{d_{i+1}}$$

$$F_{(d_{i+1})} - F_{(d_i)} = \frac{1}{2}\left(\mathrm{erf}\left(\frac{\log(d_{i+1})-\mu}{\sigma\sqrt{2}}\right) - \mathrm{erf}\left(\frac{\log(d_i)-\mu}{\sigma\sqrt{2}}\right)\right)$$

Où la fonction $\mathrm{erf}()$ est la fonction erreur et $\log()$ est le logarithme naturelle.

8.5 MODELISATION PREMEL

Elle comporte cinq composants matériaux.

- Eau liquide
- Vapeur d'eau
- Jet de corium
- Gouttes de corium
- Gaz non-condensables

Nous avons donc :

- 4 composants + un ou plusieurs gaz non-condensables (jusqu'au 10)
- 4 mélanges de quantité de moment
- 4 mélanges d'énergie

Le modèle sous-maille de fragmentation doit calculer de lui-même le transfert de masse entre constituants et les caractéristiques de la masse fragmenté (taille, forme, vitesse et température)

Dans cette modélisation, le champ dispersé (gouttes) est décrit par une seule équation de conservation de la masse, une équation de quantité de mouvement et une seule équation d'énergie. De façon à prendre en compte les changements de la taille des gouttes (par fragmentation et par coalescence) une équation de transport d'aire interfaciale est utilisée :

Conservation de la masse :

$$\frac{\partial \alpha_d \rho_d}{\partial t} + div(\alpha_d \rho_d V_d) = \Gamma_{jet\to drop} - \Gamma_{drop\to jet}$$

Avec :

[29] Attention à ne pas confondre répartition (proportion de la masse dans une classe donnée) et distribution, qui s'exprime par unité de diamètre. Distribution et répartition convergent à la limite d'un nombre de classe infini et uniformément réparties.

$\Gamma_{jet\to drop}$: Terme source de transfert de masse du champ jet vers le champ gouttes à cause de la fragmentation/déstabilisation primaire

$\Gamma_{drop\to jet}$: Terme source de transfert de masse entre le champ gouttes et le champ jet due à la coalescence de gouttes.

Conservation de la quantité de mouvement :

$$\overline{\alpha_d}\,\overline{\rho_d}\frac{\partial\overrightarrow{V_d}}{\partial t} + \widetilde{\alpha_d}\widetilde{\rho_d}\left(\overrightarrow{V_d} * \nabla\overrightarrow{V_d}\right) = -\overline{\alpha_d}\,\vec{\nabla}P + \overline{\alpha_d}\,\overline{\rho_d}\,\vec{g} - Kds\overrightarrow{V_d} + Kif_{ld}\left(\overrightarrow{V_l} - \overrightarrow{V_d}\right) + Kif_{gd}\left(\overrightarrow{V_g} - \overrightarrow{V_d}\right) + \left(\Gamma_{jet\to drop}\right)\overrightarrow{V_{trans}} + P_{sol} - M_{dl} - M_{dg}$$

V_{trans} est la vitesse de la phase donneuse. Pendant la fragmentation, nous avons $V_{trans} = V_j + V_{inst}$

Où V_{inst} est la vitesse normale relative à la création de gouttes (vitesse d'éjection).

Conservation de l'énergie :

$$\frac{\partial\alpha_d\rho_d e_d}{\partial t} + div\left(\alpha_d\rho_d e_d\overrightarrow{V_d}\right) + P\frac{\partial\alpha_d}{\partial t} + P\ div\left(\alpha_d\overrightarrow{V_d}\right) = -\Gamma_{jet\to drop}H_j + \Gamma_{drop\to jet}H_d + Q_{gd} - Q_{dl} + Q_{jd} + S_{ox,d}$$

$$S_{ox,d}$$

$\Gamma_{jet\to drop}H_j$: répresente l'energie transferé depuis le champ jet vers le champ gouttes due à la fragmentation primaire.

$\Gamma_{drop\to jet}H_d$: correspond à l'énergie perdue par le champ gouttes à cause de la coalescense de gouttes sur le champ jet

Equation de densité d'aire interfaciale :

La densité d'aire interfaciale est modélisé par une équation classique de transport d'aire d'Ishii (Kocamustafaogullari and Ishii, 1995)

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \nabla A\overrightarrow{V_d} = \Gamma_{a,\rho} + \Gamma_{A^+,drop\to drop} + \Gamma_{A^+,jet\to drop} + \Gamma_{A^-,drop\to jet}$$

A: Aire des gouttes par unité de volume (maille) $\left(SMD = \frac{6\alpha}{A}\right)$

$\Gamma_{A,p}$: Terme source pour prendre en compte la compressibilité des gouttes avec la température

$\Gamma_{A^+,drop\to drop}$: Terme source de création d'aire du à la fragmentation secondaire

$\Gamma_{A^+,jet\to drop}$: Terme source de création d'aire du à la fragmentation primaire

$\Gamma_{A^-,drop\to jet}$: Terme source de destruction d'aire due à la coalescence de gouttes dans le jet et à la coalescence de gouttes sur des structures solides (pour former du jet)

Nota: A cause de la faible fraction volumique de gouttes dans la zone de prémélange pendant l'ICR, les processus de coalescence entre gouttes due à leur collision ont été négligés. Cependant, il est fait l'hypothèse qu'au delà d'un certain taux de présence, les gouttes coalescent pour former du jet. Il faut tenir en compte que la fragmentation de goutte est possible seulement si celles-ci sont en état liquide. Pour la coalescence, il faut qu'un de deux champs (soit le jet ou les gouttes) soient en état liquide.

8.5.1 FRAGMENTATION SECONDAIRE EN PREMEL

Pour la modélisation de la fragmentation secondaire dans l'application PREMEL, un seul terme source de création d'aire interfaciale doit être calculé. ce terme source s'écrit :

Eq. 8-1 $$\boldsymbol{\Gamma_{A^+,drop\to drop} = C_0\frac{A}{D}\sqrt{\frac{\rho_d}{\rho_c}}\left\|\overrightarrow{V_d} - \overrightarrow{V_c}\right\| f_{(We)}}$$

où C_0 est le paramètre d'ajustement de Pilch, $f(We)$ la fonction de lissage.

Il est évident que la dynamique de la fragmentation secondaire n'est pas bien reproduite par l'équation (Eq. 8-1) car la phase de déformation n'est pas prise en compte dans cette formulation. Dans la Figure 8-13, nous remarquons qu'une augmentation de surface des gouttes se produit immédiatement après qu'une vitesse relative entre les gouttes et le milieu environnant soit appliquée. Avec cette modélisation, nous pouvons seulement assurer que le temps total de fragmentation ainsi que la taille finale de fragments correspondent aux valeurs obtenues théoriquement et expérimentalement.

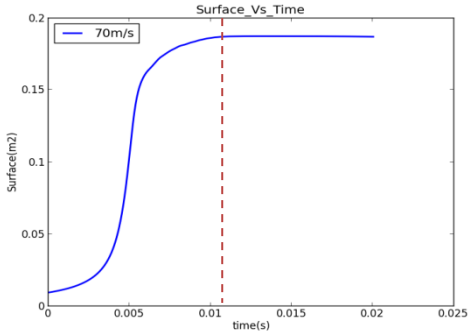


Figure 8-13 : Surface de gouttes en fonction du temps pendant la fragmentation secondaire. La ligne en pointillées montre le moment marquant la fin de fragmentation

Le temps total de fragmentation est repéré quand la surface de gouttes atteint une valeur constante (Figure 8-13). Il est important de rappeler que le temps total de fragmentation n'a pas été défini de façon précise dans la littérature et le critère utilisé peut être sujet à discussion, surtout pour la détermination expérimentale. Des fonctions d'amortissement ont été implémentées dans le code de façon à arrêter le processus de fragmentation quand le nombre aérodynamique de Weber soit plus petit qu'une valeur seuil (défini par l'utilisateur). Cette valeur est connue comme le nombre de Weber critique pour la fragmentation secondaire, fixé à 12 selon (Gelfand, 1996; Pilch and Erdman, 1987). Les résultats de nos simulations sont en très bon accord avec les résultats expérimentaux pour les cas liquide/gaz et liquide/liquide

8.5.2 RÉSULTATS PRÉLIMINAIRES

Description du domaine de calcul :

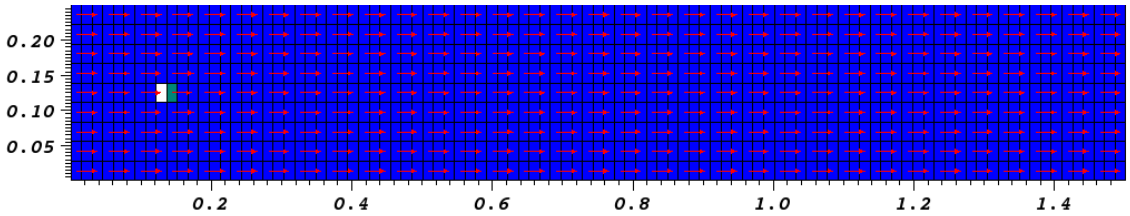


Figure 8-14 : Domaine de calcul utilisé pour la validation du modèle de fragmentation de gouttes dans le cas de fragmentation par onde de choc. La maille en blanc représente la présence de gouttes.

Plus de détail sur l'étude paramétrique

Secondary fragmentation parameters	
Liquid/gas	Liquid/liquid
$C_0 = 3.0$	$C_0 = 0.4$
$We_{cr} = 1.0$	$We_{cr} = 1.0$

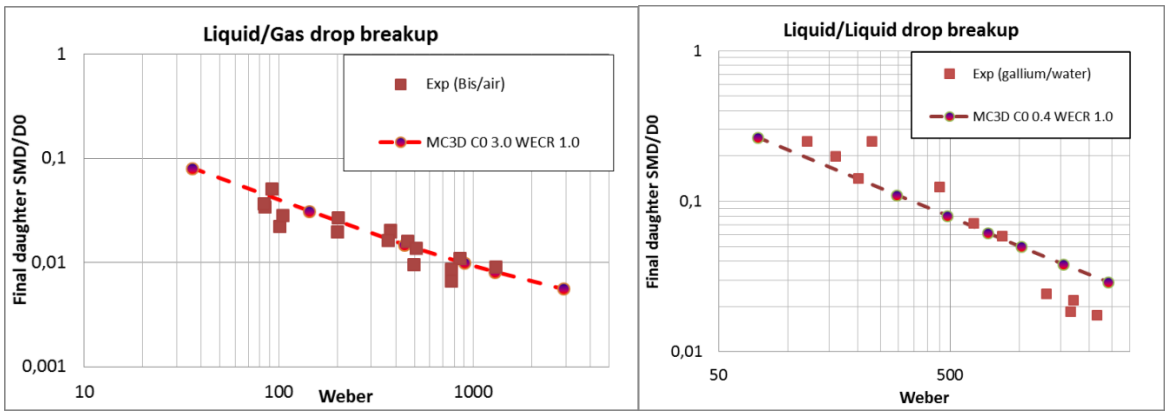


Figure 8-15 : Comparaison entre les résultats de simulations numériques et des données expérimentales de fragmentation secondaire ; Gauche : systèmes liquide/gaz, droite : systèmes liquide/liquide. Données expérimentales obtenues de (Wolfe and Andersen, 1964) pour le cas liquide/gaz et de (Gelfand, 1996) pour le cas liquide/liquide

Cependant, nous constatons que le paramètre du taux de fragmentation est 7.5 fois plus petit pour le cas liquide/liquide par rapport au cas liquide/gaz. La différence est peut-être due à une dynamique de déformation différente et à un entrainement plus important dans le cas liquide/liquide. Le coefficient d'entrainement varie pendant la fragmentation secondaire (il peut atteindre une valeur de $C_d = 5$, presque 10 fois la valeur du C_d par rapport à une sphère solide).

8.5.3 MODÉLISATION COUPLÉE DE LA FRAGMENTATION

L'approche pour la fragmentation primaire proposée dans ce travail est basée sur une adaptation du modèle d'instabilité de Kelvin-Helmholtz combiné avec un processus de prise de moyenne de paramètres physiques et hydrodynamiques (densité et vitesse) autour de l'interface du jet de façon à mieux prendre en compte la présence de différentes phases présentes dans la zone de prémélange. Cette procédure de prise de moyenne agit comme un filtre pour les perturbations de petite échelle ; ainsi, la fragmentation dépendra seulement des perturbations occasionnées pas les structures hydrodynamiques de grande échelle (échelle intégrale).

Les paramètres de fragmentation comme la taille des gouttes, le taux de fragmentation et la vitesse d'éjection des gouttes générées sont proportionnellement reliées aux grandeurs caractéristiques de l'instabilité (taux de croissance et longueur d'onde la plus instable). Nous utilisons un paramètre de taille de gouttes N_d qui permet de relier le diamètre moyen de Sauter et la longueur d'onde la plus instable qui se développe à l'interface (λ_{max})

Eq. 8-2 $$\boldsymbol{SMD = N_d \lambda_{max} = N_d \frac{3\pi\sigma(\rho_d+\rho_c)}{\Delta V_{dc}^2 \rho_d \rho_c}}$$

Le taux de fragmentation est relié à la vitesse caractéristique de l'onde (taux de croissance maximale divisé par sa longueur d'onde) en utilisant le paramètre de proportionnalité N_f. La vitesse d'éjection de gouttes perpendiculaire à l'interface est de même reliée à cette vitesse caractéristique en utilisant le paramètre N_c.

Eq. 8-3 $$\boldsymbol{\Gamma_{frag} = N_f \frac{\Delta V_{dc}\sqrt{\frac{1}{3}\rho_d \rho_c}}{\rho_d+\rho_c}}$$

Le modèle proposé ici présuppose donc que le processus de fragmentation primaire et secondaire est décrit par un même processus modélisé par l'instabilité de Kelvin-Helmholtz. Cette méthode ne permet pas de reproduire correctement la complexité de la fragmentation. La fragmentation est vue comme un seul processus et la fragmentation secondaire est en effet prise en compte par l'ajustement du paramètre N_d

Nos analyses nous conduisent à proposer l'ajustement suivant

One step PREMEL
$\boldsymbol{N_d = 4}$
$\boldsymbol{N_f = 0.25}$

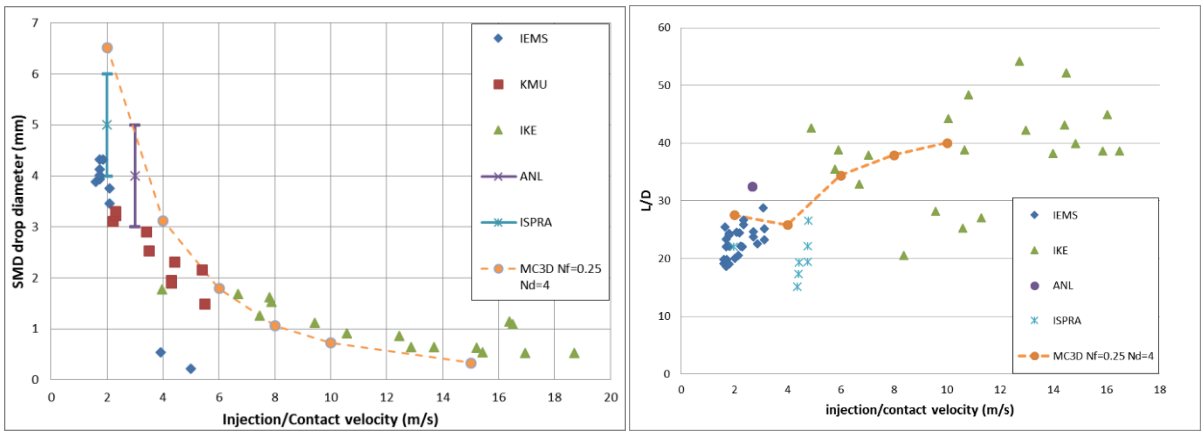


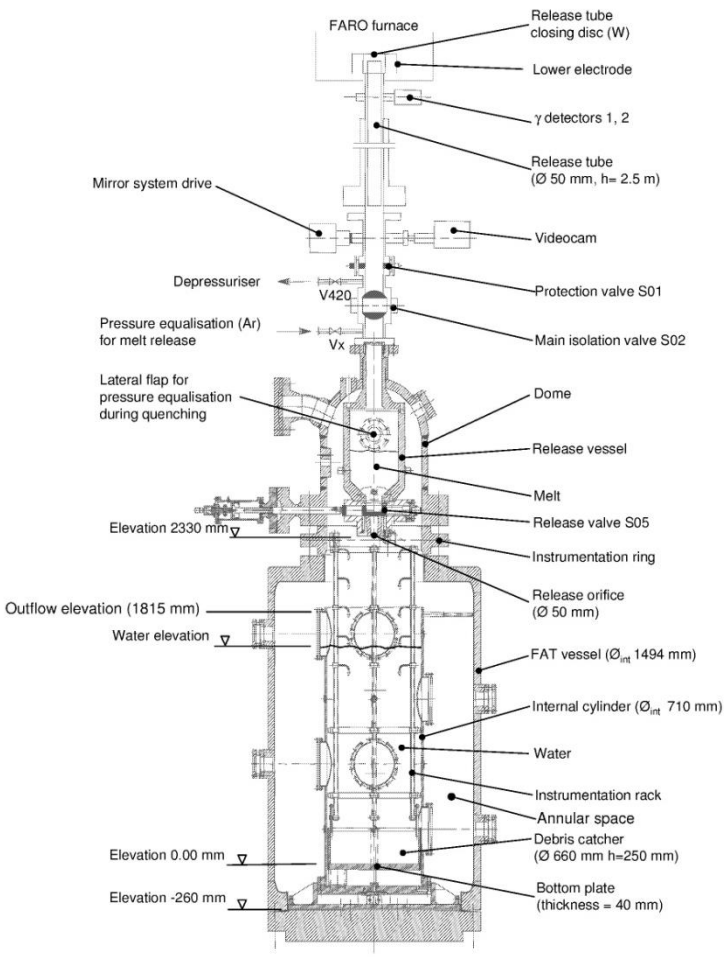
Figure 8-16 : Diamètre moyen de Sauter et longueur de rupture du jet pour différentes vitesses d'injection. Données expérimentales obtenues de : IEMS (Abe et al., 2006), KMU(Bang et al., 2003), IKE(Burger et al., 1995), ANL(Burger et al., 1995) and ISPRA(Burger et al., 1995)

La Figure 8-16 montre un relativement bon accord entre les simulations et les résultats expérimentaux. Cependant, il n'est pas possible de trouver un ajustement permettant de décrire à la fois les basses vitesses et les grandes vitesses de jet. Nous relevons en effet que le diamètre final d'après les simulations suit une loi inversement proportionnel au carré de la vitesse alors que les données expérimentales semblent suivre une loi en inverse de la vitesse d'injection.

Les études de sensibilité effectuées avec ce modèle ont montré le faible impact du paramètre de taille sur la longueur de rupture du jet L/D (c'est à dire sur le taux de fragmentation). En fait, le fluide environnant le jet n'est pas assez entrainé pour influencer les caractéristiques de rupture du jet. De plus, la prise de moyenne limite l'effet de l'écoulement proche du jet dans la fragmentation primaire.

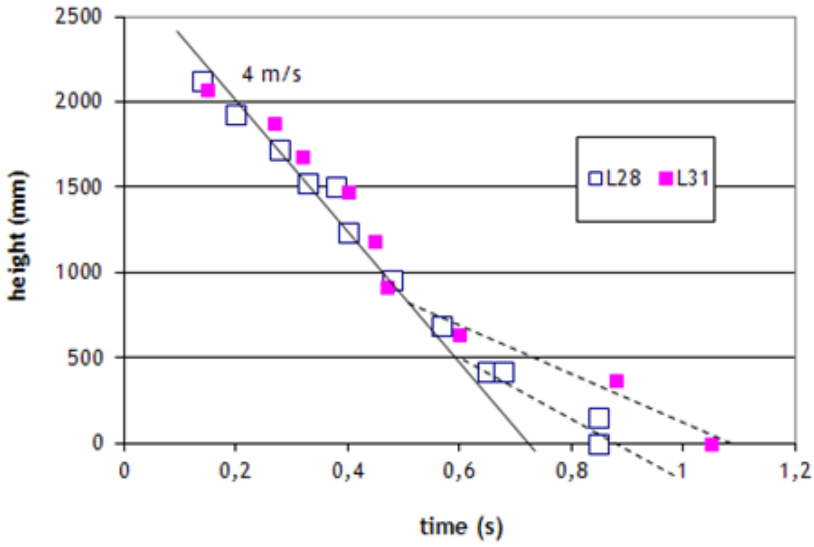
8.6 FICHE DU TEST FARO-L28

Test description	Injection of a jet of corium at high temperature in a water bath with saturation. A descriptive diagram of the section of tests and position of the sensors are given on the following figure Main characteristics Test section (FAT) Internal Diameter = 71 cm Pressure = 5,1 bar Injection of fuel , diameter opening = 5 cm Properties of water : ✓ Height = 1,44 m ✓ Mass = 517 kg ✓ Temperature = 423,7 K (saturation) ✓ Ratio of fuel mass to water mass = 0,34 Properties of the gas : ✓ Mass composition = H2 O (98%) - Ar (2%) ✓ Volume = 3,528 m3 ✓ Temperature = 465 K Properties of corium jet ✓ Composition: UO2 (80%) - ZrO2 (20%) ✓ Height free fall = 0,89 m ✓ Mass = 174,9 kg ✓ Temperature = 3052 ± 50 K



Experimental results.

- The following figure presents the position of the front of melt (compared with L31). After 0.6 s (L28) the slope is slightly different, which probably indicates the jet breakup length. The jet breakup height then would be about 0.5. However, the change of slope is not as clear as in L31 and the actual jet breakup height might be closer to 0 (or even null).



- The figures below, directly taken from ref [2] show the water level measurement. The exact meaning of this measure is not clear. We detect sloshing effects particularly at the impact. The level swell itself hardly gives an estimate of the void in the mixture. The measured level at the

end of melt flow is about 1.15 m, indicating a quite important ejection of water out of the test section.

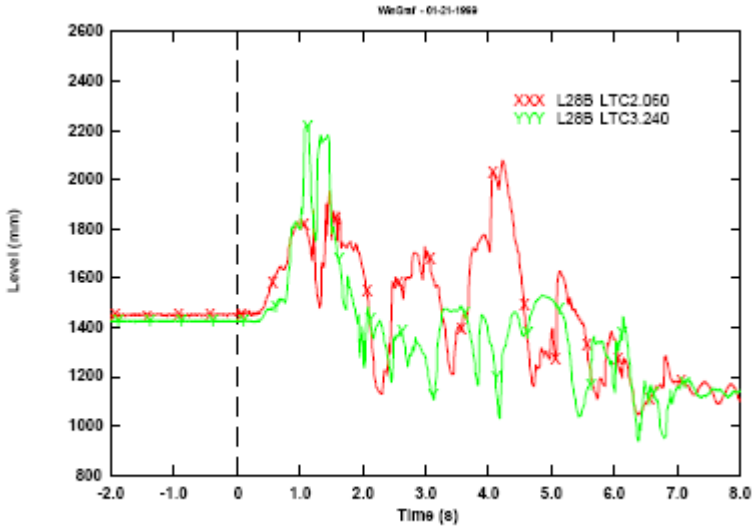


Figure 5.13 – Level Swell Measurements

Below is given the pressure history and pressure variations. We distinctly see 4 phases :

- No pressure rise until the jet contact the water.
- Steep pressure rise until t = 1 s., i.e. approximate time of melt-bottom contact.
- Slower steady state pressure rise after 1 s. This lower pressure rise slope might be due to:
  - Stronger heat transfers at the head of the jet compared to the column.
  - Significant water ejection;

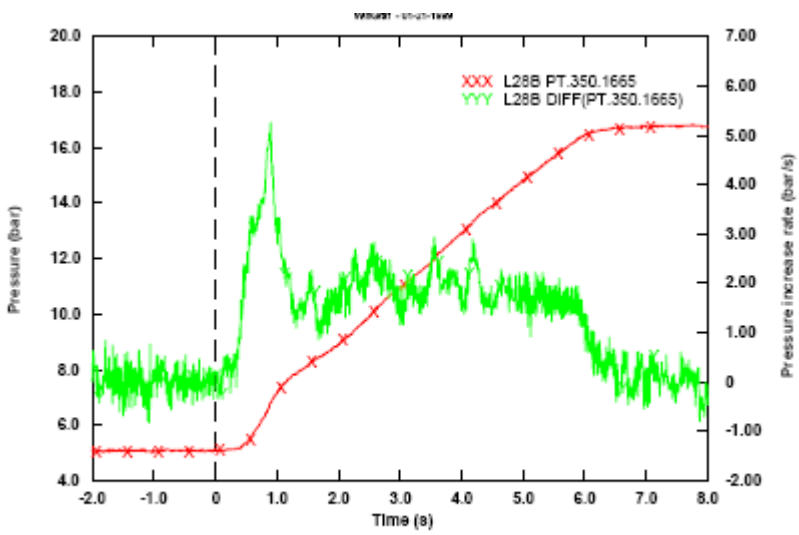
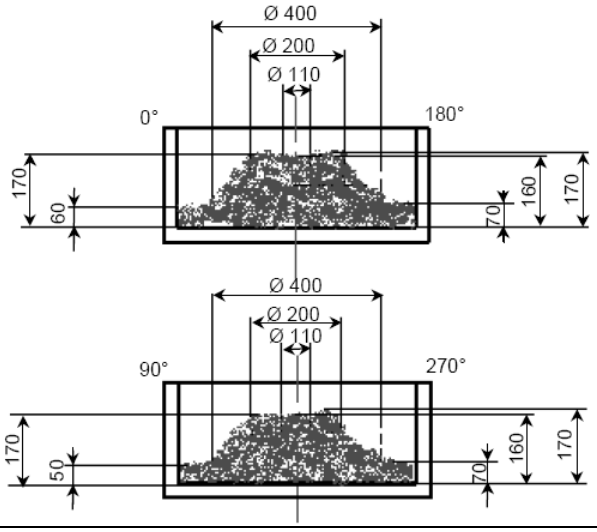


Figure 5.7 – FAT Pressure and Corresponding Increase Rate

- The mean Sauter diameter is estimated to be about 2.5 mm.
- The geometry of the debris bed is shown below for two different angles. We see that it has a perfect cylindrical geometry thus attesting the absence of deviation of the jet from the angle. The debris bed has a volcano shape indicating thus that it is formed from drops radially ejected out of the jet with probably little influence of the jet itself. The average lateral dispersion of the melt seems rather limited: about 20 cm.



8.7 INSTABILITE DE RAYLEIGH-PLATEAU ET RUPTURE DE LIGAMENT

Les ligaments (cylindres) sont instables et peuvent se fragmenter à cause des forces de tension de surface. L'instabilité de ce ligament peut être décrite par la théorie d'instabilité en phase linéaire de Rayleigh-Plateau. Aux instants proches de la rupture t_0, les effets non-linéaires apparaissent et ne peuvent plus être négligées, obligeant ainsi à utiliser des solutions totalement non-linéaires. Effectuer ce type de calculs (non-linéaires) nous semble trop complexe et long ; cependant, des arguments de similarité permettent de prédire des fonctions d'évolution du rayon minimum du ligament en fonction du temps ainsi que la vitesse de drainage du ligament. Ces arguments permettent donc de décrire de manière théorique la rupture des ligaments, ce qui est nécessaire pour la validation des simulations numériques de fragmentation. Dans la Figure 8-17, un exemple d'instabilité de Rayleigh-Plateau avec la rupture postérieure du ligament est présenté.

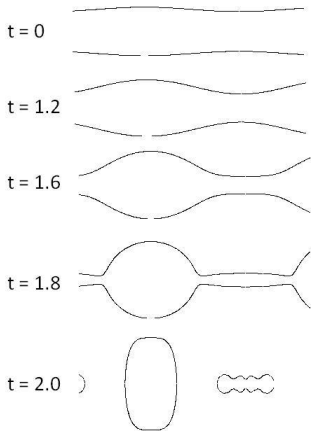


Figure 8-17 : Simulation numérique avec GERRIS de la rupture d'un ligament de gallium dans l'eau sous l'effet de la tension de surface. Le temps de rupture est $t_0 = 1.838$

Les forces de tension de surface agissent sur le cylindre (ligament) pour tenter de diminuer l'énergie de surface pour un volume donné. Si nous considérons que le jet mince (L_j/R_0 très grand) est fragmenté en n particules de même taille, la surface totale de gouttes est inférieure à la surface initiale du jet si :

Eq. 8-4 $$n < \frac{2}{9}\frac{L}{R_0}$$

Ce critère nous donne un ordre de grandeur du nombre maximale de gouttes formées par la rupture. Cependant, le rapport des aires (aire jet/aire de gouttes) est d'autant plus faible que les gouttes formées sont plus grosses : La minimisation de l'aire interfaciale doit conduire aux gouttes les plus grosses possibles.

Cependant, la formation de grosses gouttes exige de grands déplacements des particules fluides, déplacements auxquels s'oppose l'inertie du fluide (en considérant un cylindre initialement au repos)

- Facteur déstabilisant : tension de surface

- Facteur stabilisant ou retardant: Inertie du fluide

Par la suite, les équations de l'analyse linéaire d'instabilité ainsi que l'analyse de similarité seront exposée. Ceci nous permettra de comprendre plus en détail les mécanismes de rupture d'un ligament sous l'effet de la tension superficielle.

8.7.1 ANALYSE LINEAIRE D'INSTABILITE

Pour analyser l'instabilité de Rayleigh-Plateau en phase linéaire, nous considérons une colonne cylindrique d'un liquide incompressible, avec une vitesse nulle (au repos) et dans un gaz parfait sans effets hydrodynamiques sur le liquide. (Plaut, 2010)

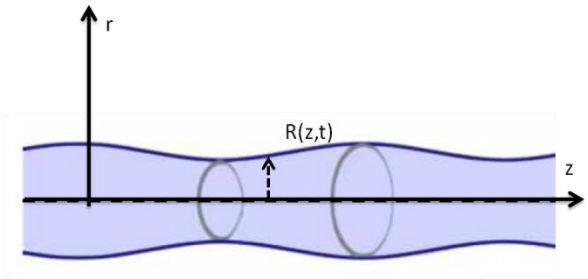


Figure 8-18 : repère pour l'analyse de la rupture d'un jet mince de fluide sous l'effet de la tension de surface

Nous considérons que le rayon du cylindre est défini comme :

$$r = R(z,t) = R_0 + a\cos(kz)\, e^{\sigma t}$$

La perturbation est très petite devant le rayon de la colonne ($a\, e^{\sigma t} \ll R_0$). Nous définissons les champs de pression et de vitesse de la même forme :

$$p = p_0 + P(r)\cos(kz)\, e^{\sigma t} \qquad \text{et} \qquad v_r = V_r(r)\cos(kz)\, e^{\sigma t}$$

Dans cette formulation, k est le nombre d'onde (valeur réelle) et σ est un nombre réel strictement positif qui caractérise l'amplification de perturbations. Par analyse d'ordre de grandeur, les effets de viscosité et de pesanteur peuvent être négligés. En négligeant ces deux termes, nous nous retrouvons avec l'équation d'Euler linéarisée :

$$\rho \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} = -\nabla p$$

En prenant la divergence de l'équation d'Euler nous retrouvons l'équation de Laplace pour la pression :

$$\Delta p = 0$$

En remplaçant l'expression du p dans l'équation de Laplace, nous retrouvons la forme d'une équation de Bessel modifié d'ordre 0 :

$$p''_{(r)} + \frac{1}{r} p'_{(r)} - k^2 p_{(r)} = 0$$

La solution de cette équation est une fonction de Bessel de première espèce modifiée d'ordre 0 :

$$p_{(r)} = bI_0(kr) \text{ avec } I_0(kr) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\alpha^{2n}}{4^n (n!)^2}$$

Si nous réintroduisons l'expression de $p_{(r)}$ dans l'équation d'Euler, nous trouvons l'expression pour la vitesse $V_r(r)$

$$V_r(r) = -\frac{k\, p'_{(r)}}{\rho\sigma} = -\frac{k\, bI'_0(kr)}{\rho\sigma}$$

Conditions aux limites :

- La condition cinématique à l'interface linéarisée nous dit que (l'équation de l'interface est $R(z,t) = R_0 + a\cos(kz)\, e^{\sigma t}$) :

$$v_r = V_r(R_0)\cos(kz)\, e^{\sigma t} = \frac{\partial R}{\partial t} = \sigma a \cos(kz)\, e^{\sigma t}$$

$$V_r(R_0) = \sigma a$$

D'où, en utilisant l'expression de $V_r(r)$ nous concluons que :

$$b = -\frac{\rho a\, \sigma^2}{k I_0'(kR_0)}$$

- La condition dynamique à l'interface linéarisée représente le saut de pression à l'interface à cause des effets de la tension de surface

$$p - p_c = \gamma div\,(\vec{n}) \;\; \text{Avec } div(\vec{n}) = \frac{1}{r} + ak^2 \cos(kz)\; e^{\sigma t}$$

Nous trouvons finalement l'expression :

$$p_0 + \; bI_0(kR_0)\cos(kz)\, e^{\sigma t} - p_c = \gamma\left(\frac{1}{R_0} - \frac{a}{R_0^2} cos(kz) e^{\sigma t}\right) + \gamma a k^2 cos(kz) e^{\sigma t}$$

$$bI_0(kR_0) = \gamma a\left(-\frac{1}{R_0^2} + k^2\right)$$

Nous trouvons finalement l'équation de dispersion :

$$\sigma^2 = \frac{\gamma}{\rho R_0^3}\frac{\alpha I_0'(\alpha)}{I_0(\alpha)}(1-\alpha^2) \;\; \text{Avec } \alpha = k\, R_0$$

La résolution de cette équation requière une implémentation numérique pour évaluer les fonctions $I_0(\alpha)$ et $I_0'(\alpha)$ et trouver les différentes valeurs de σ (voir Figure 8-19). Une solution plus simple au problème est donnée en considérant des jets de liquide minces $(r \ll L)$, c'est-à-dire, les dimensions caractéristiques dans la direction radiale du jet sont très petites devant les dimensions longitudinales ; Nous supposons que les quantités sont presque constantes dans la direction radiale. De même, les équations peuvent être simplifiées en considérant la symétrie de la solution par rapport à l'axe du jet. La solution est donnée par (Popinet and Antkowiak, 2011) :

$$\sigma^2 = \frac{\gamma\alpha^2}{2\rho R_0^3}(1-\alpha^2) \;\; \text{Avec} \quad \alpha = k\, R_0$$

Evaluation de l'équation de dispersion dans le cas d'une colonne de gallium :

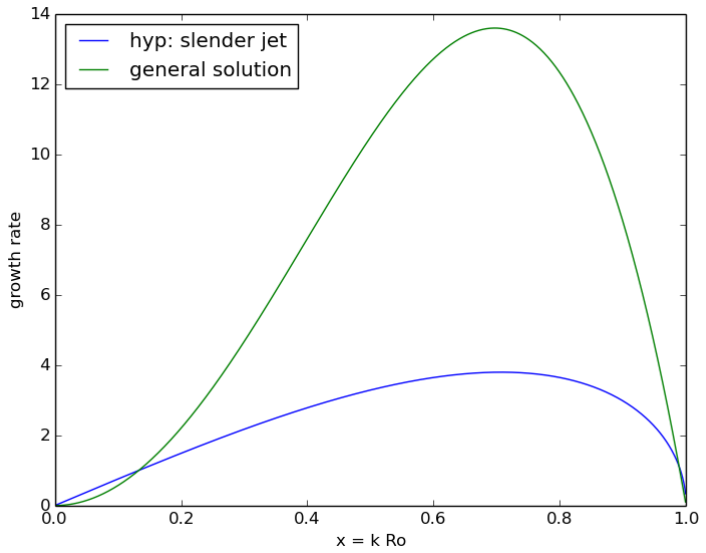


Figure 8-19 : Taux de croissance σ en fonction du nombre d'onde $x = k\, R_0$

8.7.2 SOLUTION AUTO-SIMILAIRE (ORDRE DE GRANDEUR)

Les solutions proposées précédemment nous permettent d'étudier la déstabilisation du jet quand les perturbations à l'interface sont de faible amplitude. Cependant, pour étudier le comportement du jet près de la zone de rupture, une hypothèse de grande longueur d'onde de faible amplitude n'est pas valide et les effets non-linéaires deviennent prédominants.

Les diverses observations expérimentales nous amènent à supposer que la forme de l'interface près de la zone de rupture est indépendante des conditions initiales et donc, la solution ne devrait pas dépendre des longueurs caractéristiques initiales (par exemple, le rayon du ligament). De même, le fait que le rayon du jet tend vers zéro proche de la rupture, aucune longueur caractéristique ne peut être définie. Nous cherchons donc une solution à invariance d'échelle (solutions auto-similaires)

En excluant les échelles de longueur et de temps associé aux conditions initiales, les seules quantités qui déterminent notre problème sont :

- Viscosité μ $(M * L^{-1} * T^{-1})$
- Densité ρ $(M * L^{-3})$
- Tension de surface σ $(M * T^{-2})$

En partant de ces trois quantités, il est simple de démontrer que la seule échelle de temps du problème correspond au temps visco-capillaire :

$$t_v = \mu^s \rho^r \sigma^t \equiv (M * L^{-1} * T^{-1})^s (M * L^{-3})^r (M * T^{-2})^t \equiv T$$

D'où nous trouvons : $s = 3,\ r = -1,\ t = -2$:

$$t_v = \mu^3 \rho^{-1} \sigma^{-2}$$

De même, la seule échelle de longueur est :

$$l_v = \frac{\mu^2}{\sigma\rho}$$

Ces échelles caractéristiques sont interprétées comme le temps pour que les forces capillaires sont équilibrées par les forces de viscosité. Les valeurs peuvent être très petites pour les fluides courants (de l'ordre du nanomètre pour l'eau). Ces solutions sont donc valides très proche de la singularité (quand la taille du ligament devient comparable à la longueur l_v. Avant d'arriver à cette échelle, la dynamique est dominée par la tension de surface et l'inertie (la viscosité devient négligeable). Si nous négligeons la viscosité, nous devons utiliser les échelles de longueur initiales (a, rayon initial du jet)

La procédure pour trouver les solutions auto-similaires au problème nous semblent trop longues pour être décrites dans ce rapport. Nous nous contenterons de donner les résultats dans le Tableau 13 issus des notes de S. Popinet et A. Antkowiak (Popinet and Antkowiak, 2011).

Grandeur	Avec viscosité	Sans viscosité
$\xi = \frac{\bar{z}}{\bar{t}^{\beta}}$	$l_v^{-1} t_v^{\frac{1}{2}} (t - t_0)^{-\frac{1}{2}} (z - z_0)$	$\left(\frac{\sigma}{\rho}\right)^{-\frac{1}{3}} (t - t_0)^{-\frac{2}{3}} (z - z_0)$
$r(z,t)$	$l_v t_v^{-1} (t - t_0) \phi_{(\xi)}$	$\left(\frac{\sigma}{\rho}\right)^{\frac{1}{3}} (t - t_0)^{\frac{2}{3}} \phi_i(\xi)$
$u(z,t)$	$l_v t_v^{-\frac{1}{2}} (t - t_0)^{-\frac{1}{2}} \psi(\xi)$	$\left(\frac{\sigma}{\rho}\right)^{\frac{1}{3}} (t - t_0)^{-\frac{1}{3}} \psi_i(\xi)$

Tableau 13 : Solutions auto-similaires visqueuses et non-visqueuses pour la rupture d'un jet liquide mince

Avec $\bar{z} = \frac{z - z_0}{l_v}$ et $\bar{t} = \frac{t - t_0}{t_v}$; Les sous-indices 0 correspondent au moment/endroit de la rupture.

Ces équations nous montrent une évolution du rayon du ligament en fonction de $(t - t_0)^{\frac{2}{3}}$, et une vitesse axiale du fluide en fonction du $(t - t_0)^{-\frac{1}{3}}$ dans la zone de rupture quand le temps $t \to t_0$

8.8 DISTRIBUTION EN MASSE, EN VOLUME[30] ET EN NOMBRE

En littérature, il existe différentes manières possibles de représenter la distribution en taille des particules résultantes de la fragmentation primaire et secondaire de gouttes. Certaines distributions

[30] Nous considérons qu'une distribution en volume est la même que une distribution en masse, si la masse volumique du métal liquide reste constante indépendamment du diamètre choisi.

permettent de représenter plus clairement les petites particules et d'autres plutôt les grosses particules. Les trois distributions présentées ci-dessous peuvent être utilisées pour décrire en détail toute la gamme de tailles de fragments issus de la fragmentation. Leur construction est simple et elles permettent de superposer facilement des lois théoriques de distribution.

Note : Il est important de rappeler qu'une loi de distribution théorique ne s'ajustera pas à toutes les distributions en même temps, avec les mêmes paramètres ; ceci veut dire que, par exemple, une loi log-normale qui s'ajuste bien à une distribution de taille de particules en volume, ne s'ajustera pas à sa distribution en nombre de gouttes.

$$f_{v(d_i)} = \frac{\int_{d_i}^{d_{i+1}} \alpha_{(D)}\, dD}{d_{i+1} - d_i} \quad \text{avec} \quad \alpha_{(D)} = \frac{V_{(D)}}{\int_0^{\infty} V_{(D)} dD}$$

$V_{(D)}$ est une fonction du volume ou masse des gouttes en fonction du diamètre.

D'après les simulations numériques ou données expérimentales, la fonction $V_{(D)}$ (Volume de la goutte en fonction du diamètre) n'est pas une fonction continue. Pour représenter la distribution en masse ou volume, nous effectuons la somme de la fraction massique ou volumique de toutes les gouttes contenues dans un intervalle de diamètres ($d_i < D < d_{i+1}$).

$$f_{v(d_i)} = \frac{\sum_{j=1}^{K} \alpha_{(d_j)}}{d_{i+1} - d_i}$$

Où K est le nombre totale de gouttes contenues dans ($d_i < D < d_{i+1}$). Le résultat est donc une fonction de distribution $f_{v(d_i)}$ constante par morceaux.

Dans le cas d'exemple présenté en Figure 8-20 ($We = 5{,}929$), nous constatons la génération de peu de particules avec des diamètres particulièrement grands (diamètre minimale au tour de $0.28\, D_0$). A droite de la figure, nous montrons aussi la distribution en volume en prenant en compte comme abscisse le logarithme du diamètre ; cette manière de représenter la distribution montre plus en détails les petites gouttes (ce sont elles qui jouent le plus dans les transferts thermiques). Pour construire ce graphe, il suffit simplement de diviser la somme des fractions massiques par la soustraction des logarithmes des bornes de la classe :

$$\frac{dN_i}{d\ln(x)} = \frac{\sum_{j=1}^{K} \alpha_{(d_j)}}{\ln(d_{i+1}) - \ln(d_i)}$$

Cette fonction est de bonne utilité pour l'analyse de distribution de taille de particules contenant de petits fragments. De même, elle permet de superposer facilement une loi théorique de distribution (par exemple, loi log-normale) pour vérifier la tendance de résultats expérimentaux.

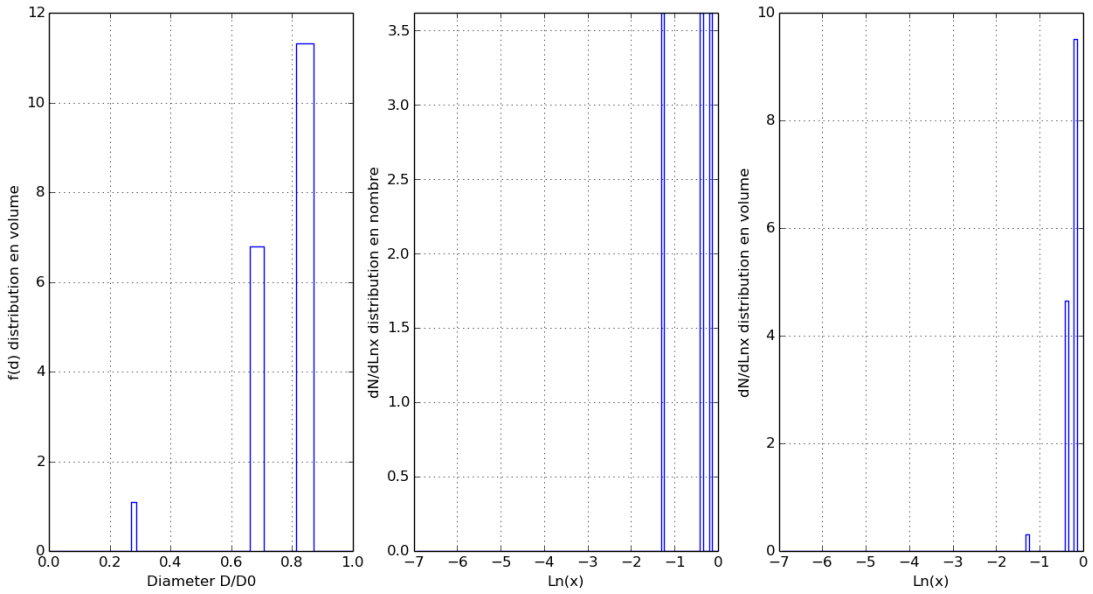


Figure 8-20 : Exemple de distribution de taille de particules à $We = 10$. A gauche : distribution en volume. Centre : Distribution en nombre. Droite : distribution en volume

Dans la Figure 8-20 centre, nous montrons la distribution en nombre de fragments. Celle-ci est construite de forme très similaire à celle en volume, sauf que nous n'utilisons pas le volume de gouttes sinon que

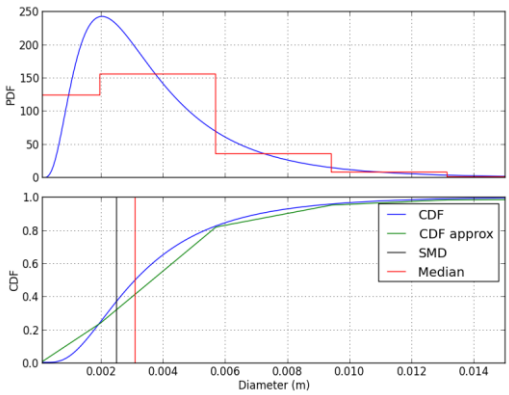
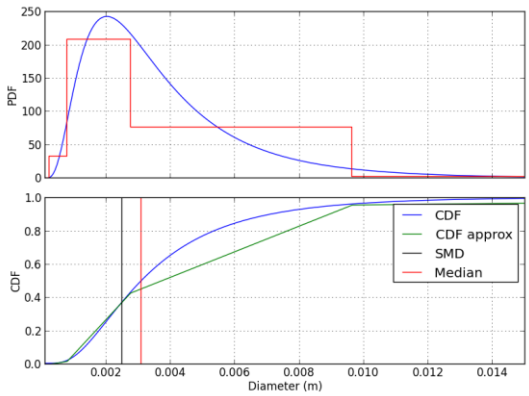
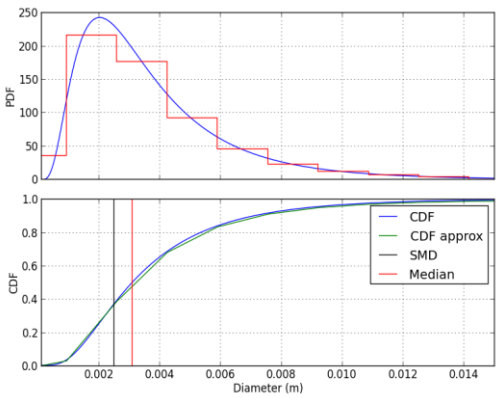
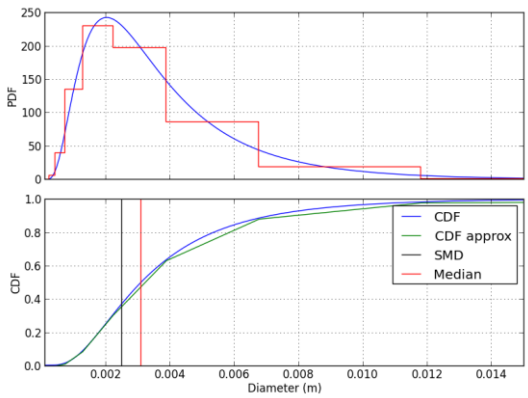
leur nombre. La valeur de la distribution en nombre pour un intervalle de diamètres donné par ($d_i < D < d_{i+1}$) est :

$$\frac{dN_i}{d\ln(x)} = \frac{K/K_{tot}}{\ln(d_{i+1})-\ln(d_i)}$$ Où K_{tot} est le nombre total de particules

La Figure 8-20 montre une distribution en nombre avec trois gouttes de différent diamètre (trois colonnes de même hauteur ; la valeur $\ln(d_{i+1}) - \ln(d_i)$ est constante car les classes ont été discrétisées de forme logarithmique).

8.9 ESTIMATION DES ERREURS DE DISCRETISATION ET OPTIMISATION

La précision de la méthode de discrétisation et du calcul des diamètres représentatifs est évaluée en fonction du diamètre de Sauter global (SMD_{global}). Celui-ci est calculé à partir de la discrétisation effectuée sur une distribution dont nous connaissons les paramètres caractéristiques (SMD et $D_{0,50}$). Nous évaluons aussi l'influence du nombre de classes dans la précision du calcul (par exemple 5, 10 et 20 classes). Dans le cas illustré en Figure 8-21, nous évaluons seulement la méthodologie pour le calcul des bornes des classes. La fraction volumique de chaque classe calculée selon Eq. 4-5 est donné à titre indicatif en créneaux[31], l'objectif principal étant de regarder qualitativement la répartition des classes dans l'intervalle des diamètres choisi et selon une loi log-normale ayant un $SMD = 2.5\ mm$ et $D_{0,50} = 3.1\ mm$.

	Discrétisation linéaire	Discrétisation logarithmique
ND = 5		
ND = 10		

[31] La fraction volumique de chaque classe est supposé en créneaux afin de calculer la fonction de distribution cumulée.

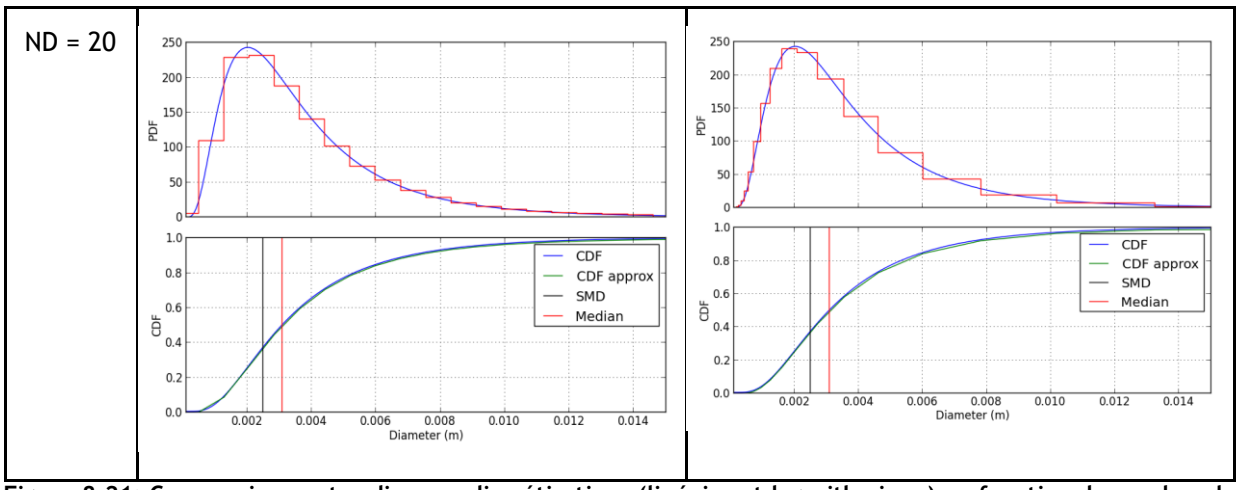


Figure 8-21: Comparaison entre diverses discrétisations (linéaire et logarithmique) en fonction du nombre de classes utilisées

La Figure 8-21 montre visuellement l'influence du nombre de classes et de la méthodologie pour le calcul des bornes. Nous constatons que la méthode linéaire conduit à une meilleure résolution pour les grosses gouttes. Cependant, elle a une faible résolution pour les petits diamètres de gouttes, même, si cette résolution augmente en fonction du nombre de classes. Du côté de la méthode logarithmique, nous constatons au contraire une faible résolution du côté des grosses gouttes. Cependant, les classes sont mieux réparties dans l'intervalle de diamètres. Nous constatons une très bonne concordance entre la distribution théorique et la distribution discrétisée pour un nombre de classes égale à 20. Idéalement, il faudrait utiliser le plus grand nombre de classes possibles et assurer que la fraction massique de la première et dernière classe soit quasi-nulle[32]. Cependant, compte tenu du nombre considérable des équations de transport à résoudre et sachant que chaque classe de gouttes additionnelle correspond à deux équations de transport supplémentaires, nous allons nous restreinte à un maximum de 15 classes pour les calculs simples (fragmentation secondaire) et à 10 classes pour les calculs couplés de fragmentation primaire et secondaire.

Il est cependant indispensable d'évaluer quantitativement l'erreur d'une méthode de discrétisation donnée sur une distribution quelconque. Compte tenu du nombre considérable de variables nécessaires pour définir la discrétisation de l'intervalle de taille de gouttes, nous avons préféré définir des cartes ou graphes indiquant les erreurs associées. Cette erreur est évaluée en fonction de la méthode de calcul de bornes et du calcul du diamètre de Sauter représentatif. La méthode de comparaison est la suivante :

1. Donnée utilisateur : diamètres DDRMIN et DMAX et le nombre de classes Nc
2. Calcul des bornes inférieures et supérieures des classes en fonction du DDRMIN, DMAX et N_c. Les valeurs de bornes dépendent aussi de la méthode de calcul des bornes choisie (voir section 4.1.1.1)
3. Calculer les diamètres représentatifs des classes, soit en fonction d'une distribution imposée par l'utilisateur[33], soit de manière indépendante à celle-ci (voir section 4.1.1.2)
4. Définir un $SMD\ test$ et $D_{0,50}\ test$ correspondante à une distribution quelconque
5. Discrétiser la fonction de densité de probabilité en utilisant la discrétisation préalablement calculé dans les pas 2 et 3
6. Evaluer le SMD issue de cette discrétisation et comparer avec la valeur théorique.

Nous avons testé des fonctions de densité de probabilité du type log-normal avec un rapport $\frac{D_{0,50}}{SMD} = 1.2$. Nous évaluons l'erreur de discrétisation en comparant le SMD_{disc} global calculé après la discrétisation

[32] Ceci assure que les diamètres DDRMIN et DMAX ont été choisi correctement pour inclure de manière précise toutes les gouttes générées pendant le calcul.

[33] Distribution imposée par l'utilisateur : Dans ce cas, l'utilisateur défini une distribution initiale qui servira à calculer les diamètres de sauter de chaque classe. Cette distribution est complètement indépendante de la distribution définie dans le pas 4 de la méthode de comparaison. L'idée étant d'évaluer la méthode de discrétisation (calcul de bornes et des SMD) sur une distribution quelconque. Nous avons choisi une distribution imposée du type log-normal ayant un $SMD = 3.0\ mm, D_{0,50} = 3.6\ mm\ (Ratio = 1.2)$

et le SMD_{test} théorique. Le SMD_{test} de la distribution test varie de $1 * 10^{-4}$ jusqu'à $5 * 10^{-2}$ pour évaluer l'erreur sur l'intervalle de diamètres possibles pendant les essais de fragmentation du jet.

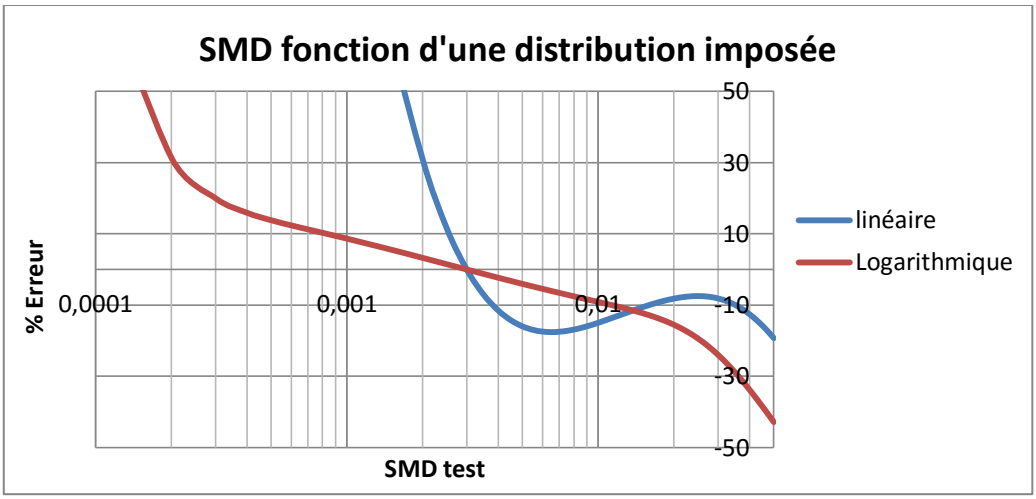


Figure 8-22 : Erreur de la méthode de discrétisation pour un calcul du SMD_i avec une distribution imposée par l'utilisateur $SMD = 2.5\ mm, D_{0,50} = 3.1\ mm\ (Ratio = 1.24)$ et un calcul de bornes du type linéaire et logarithmique

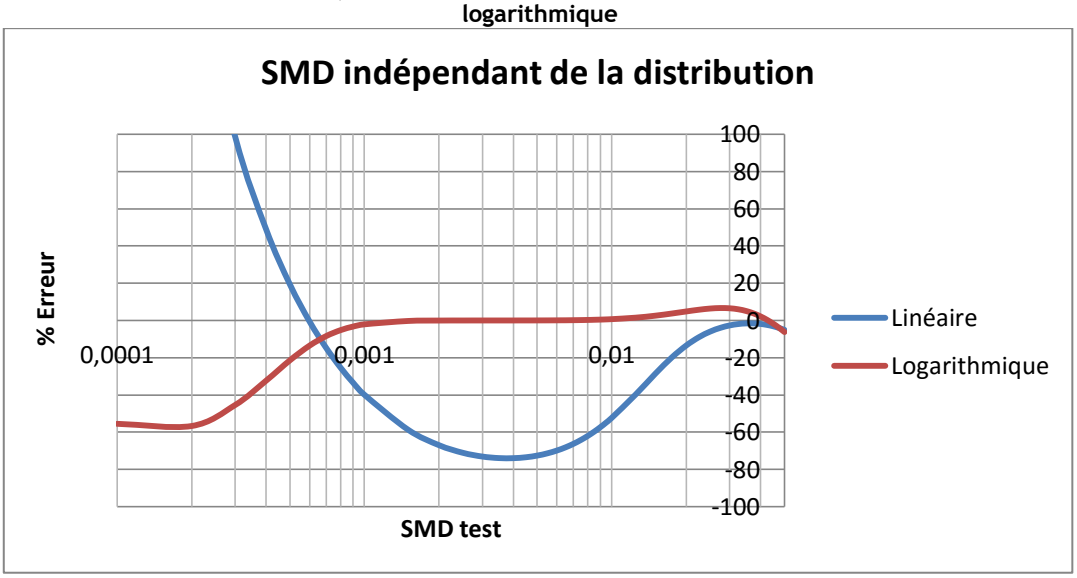


Figure 8-23 : Erreur de la méthode de discrétisation pour un calcul du SMD_i indépendante de la distribution et un calcul de bornes du type linéaire et logarithmique

La Figure 8-22 et la Figure 8-23 montrent les erreurs de différentes méthodes de discrétisation utilisées décrites en paragraphe 4.1.1. L'utilisation d'une discrétisation logarithmique avec calcul du diamètre de Sauter indépendante de la distribution initiale donne les erreurs les plus faibles pour des valeurs de SMD_{test} compris entre $1\ mm$ et $1\ cm$. Nous concluons que la meilleure discrétisation pour ce type de modélisation est du type logarithmique avec un calcul du SMD_i indépendant de la distribution initiale. Nous avons cherché à mieux caractériser l'erreur de cette méthode de discrétisation. Selon les équations du calcul de SMD, celui-ci dépend des SMD_i qui à son tour dépend des bornes inférieures et supérieures de chacune des classes. Le calcul des bornes dépend du rapport $DMAX/DDRMIN$ et du nombre de classes choisi.

Nous avons trouvé que la carte des erreurs de discrétisation peut être construite en divisant les divers paramètres de la discrétisation et de la distribution par $DDRMIN$. Dans la Figure 8-24 nous présentons l'erreur de discrétisation pour un rapport $\frac{DMAX}{DDRMIN} = 1000$ en fonction du nombre de classes choisi. Le diamètre test en abscisse a été adimensionné aussi par la valeur $DDRMIN$. Nous constatons qu'il y a un intervalle des diamètres test où l'erreur de la discrétisation de la distribution log-normale donnée par SMD_{test} et $\frac{D_{0,50}}{SMD_{test}}$ est quasiment nulle. Par exemple pour $N_c = 20$, cet intervalle est compris approximativement entre $8 * DDRMIN$ et $256 * DDRMIN$. Nous pourrons ainsi définir deux gammes de résolution :

- Gamme très bien résolue : Erreur moins de 0.5%

- Gamme bien résolue : Erreur moins de 10%

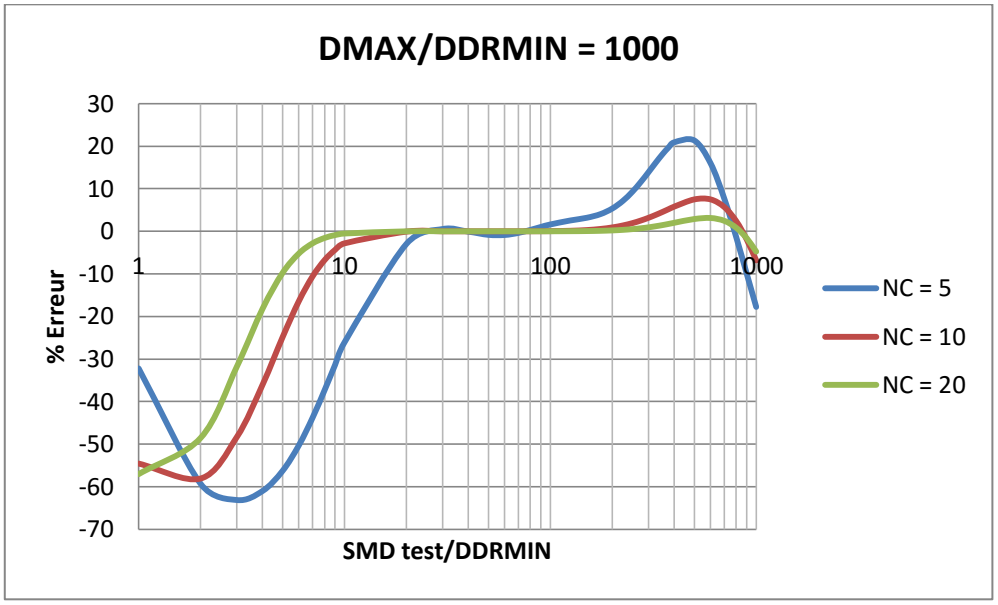


Figure 8-24 : Carte des erreurs de discrétisation pour un rapport $\frac{DMAX}{DDRMIN} = 1000$ et différentes valeurs de nombres de classes N_c

Maintenant, il convient d'analyser l'influence du rapport $DMAX/DDRMIN$ sur l'erreur de discrétisation. En considérant les limitations en nombre de classes précédemment mentionnées, en Figure 8-25 nous présentons l'erreur de discrétisation pour un nombre de classes fixé à $N_c = 10$ et pour diverses valeurs de $DMAX/DDRMIN$. Nous constatons une augmentation de l'intervalle de diamètres de la gamme très bien résolue au fur et à mesure que nous augmentons la valeur du rapport $DMAX/DDRMIN$. Nous obtenons des classes beaucoup plus larges, où la fraction massique des classes extrêmes est quasi-nulle.

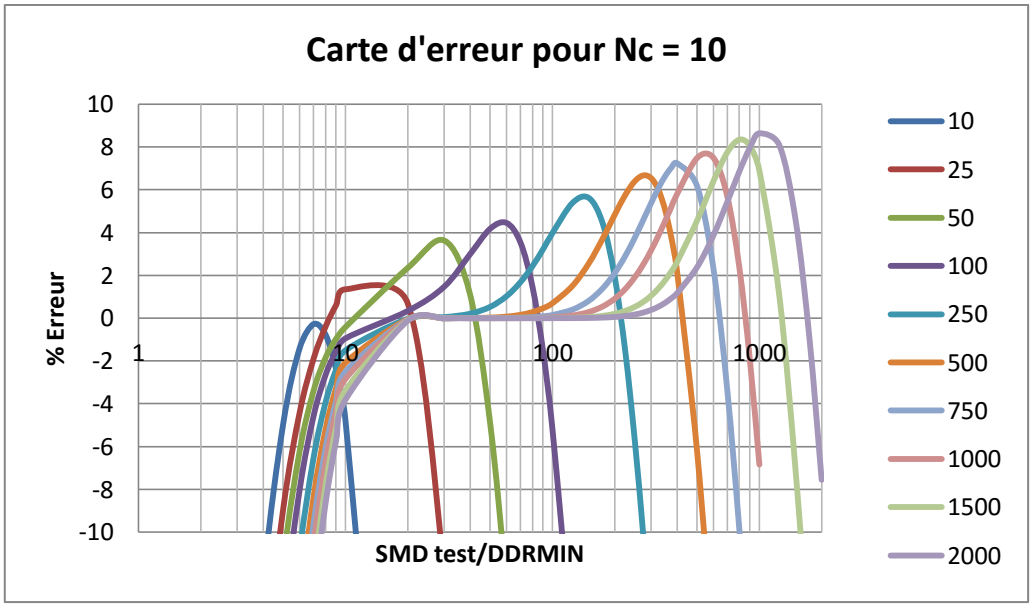


Figure 8-25 : Carte des erreurs de discrétisation pour un nombre de classes $N_c = 10$ et différentes valeurs du rapport $DMAX/DDRMIN$

Afin de définir les meilleurs paramètres de discrétisation, il faut donc ré-établir les valeurs du $DDRMIN$ et $DMAX$ spécifiées dans le jeu de données MC3D afin de garantir une erreur la plus faible possible liée à la discrétisation dans la gamme d'intervalle de plus grand intérêt. Cette gamme est comprise entre $0.5\ mm$ jusqu'à $10\ mm$ dans le cas de fragmentation des jets de métaux liquide. Dans le chapitre suivant, nous utiliserons cette méthode pour définir les diamètres DDRMIN et DMAX de nos simulations de fragmentation de jet.

En conclusion, nous avons évalué deux méthodes de discrétisation et nous concluons que la discrétisation de manière logarithmique avec calcul des diamètres représentatifs indépendants d'une distribution

quelconque est la plus précise. Les éléments présentés ici concernant la discrétisation de l'intervalle de taille de particules seront essentiels à l'heure d'évaluer la précision des calculs de la fragmentation de jets de métaux liquides.

8.10 INITIALISATION DE LA SIMULATION DE FRAGMENTATION DE GOUTTES

L'initialisation des calculs de fragmentation de gouttes consiste en placer une goutte de métal liquide dans un point du domaine ayant pour coordonnées $(0,0,0)$. Nous avons initialisé le fluide environnant et la goutte à une vitesse égale à zéro. Nous considérons une condition d'entrée en vitesse à gauche (vitesse adimensionnelle égale à 1) et une pression de sortie à droite.

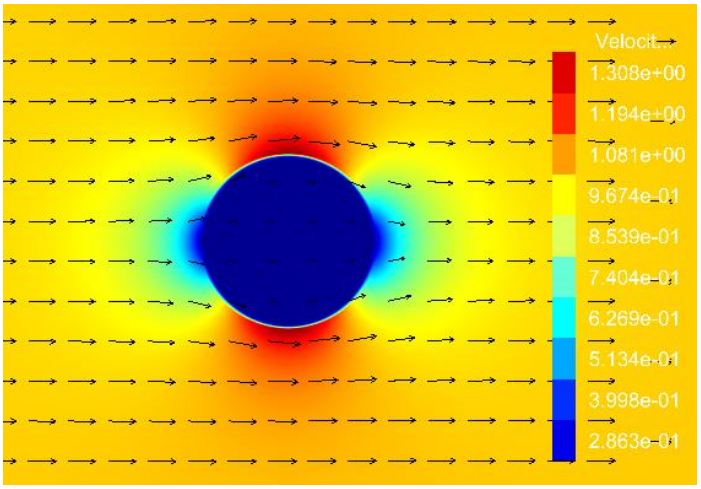


Figure 8-26 : Contour de vitesse adimensionnelle dans la direction de l'écoulement pour une simulation Gallium-Eau

Nous constatons que depuis le début du calcul (premier pas de temps), la goutte acquière une vitesse non nulle (voir Figure 8-26). Nous considérons que cette effet est numérique et modifie le nombre effectif de Weber de l'interaction.

Malgré que cette entrainement instantané de la goutte soit numérique, de phénomènes similaires ont été constaté dans les simulations de fragmentation de gouttes par le passage d'une onde de choc effectués avec le code MC3D (hors du cadre de la thèse). Les simulations MC3D (code compressible) permettent de capturer le passage de l'onde de choc et l'entrainement instantané de la goutte.

La vitesse qu'acquière la goutte dépend de propriétés physiques des fluides en interaction. Nous avons relevé les vitesses initiales de la goutte pour différentes configurations ainsi que pour différentes nombres de Weber. Nous constatons que cette vitesse initiale dépend seulement du rapport de masse volumique et elle est indépendante du nombre de Weber. Nous avons effectué des simulations avec les configurations Gallium-eau, Métal de Fields-eau et Alumine-eau dont les valeurs de vitesses initiales sont données dans le Tableau 14.

Configuration	Rapport de masses volumiques	Rapport de viscosité	Rapport Vitesse fluide environnante/vitesse goutte initiale
Alumine - Eau	2.76	20.0	1/0.46
Gallium - Eau	6.07	1.6	1/0.23
Métal de Fields - Eau	8.0	10.0	1/0.178

Tableau 14 : Comparaison de la vitesse initiale de la goutte pour les diverses configurations simulées

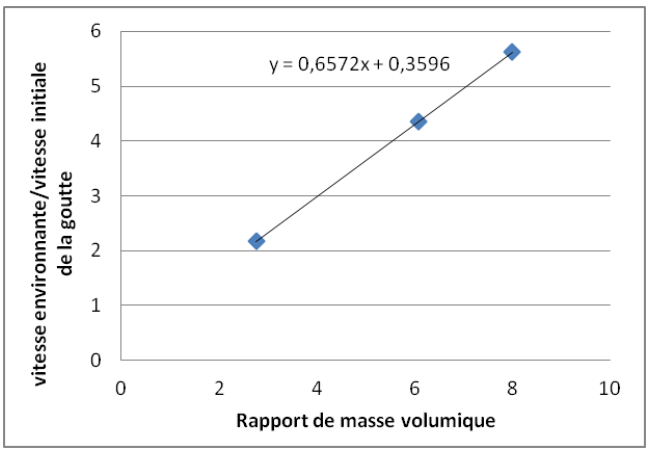


Figure 8-27 : Variation de la vitesse initiale de la goutte en fonction du rapport de masses volumiques gouttes/fluide environnante

Nous constatons une dépendance linéaire entre le rapport vitesse fluide environnante/vitesse initiale de la goutte et le rapport de masses volumiques (voir Figure 8-27). Cette vitesse initiale de la goutte a des effets majeurs pour l'analyse de la fragmentation, car le nombre de Weber de l'interaction doit être modifié ainsi que le temps caractéristique de Ranger et Nicholls. Le nombre de Weber est diminué d'un facteur $\left(1-\frac{V_{0d}}{V_0}\right)^2$ et le temps caractéristique est divisé par un facteur$\left(1-\frac{V_{0d}}{V_0}\right)$.

Dans cette thèse, nous avons appliqué un facteur de correction pour nos analyses, cependant, une étude plus approfondie sur l'impact de masses volumiques lors de la phase d'initialisation doit être effectué pour des futures simulations. Cet effet a d'ailleurs une répercutions importante dans les modèles sous-maille de fragmentation implémentés dans l'application EXPLO de MC3D.

8.11 MODÈLE ANALYTIQUE D'OSCILATION

Le modèle analytique que nous avons développé (Rimbert et al., 2015, 2014) est basé sur la théorie d'écoulements potentiels de Joseph. Cette théorie est utilisé pour développer l'équation d'un oscillateur non linéaire de la déformation de la goutte, prenant en compte que celle-ci se déforme en un ellipsoïde.

L'équation de déformation de la goutte est obtenue grâce à l'équilibre de l'énergie cinétique de déformation, de création de surface, de travail de pression externe et de dissipation visqueuse. Cet approche est similaire à celui utilisé pour les modèles classiques TAB (O'Rourke and Amsden, 1987) ou DDB (Ibrahim et al., 1993).

Le modèle développé considéré que la goutte liquide (propriétés physiques dénotées par le sous-indice l) de rayon R_0 se déforme grâce à l'action du fluide porteur (propriétés physiques dénotées par le sous-indice c) Dans un sphéroïde de grand semi-axe a et petit semi-axe b (voir Figure 8-28). La conservation du volume assure que :

$$\frac{4}{3}\pi a^2 b = \frac{4}{3}\pi R_0^3$$

Il y donc un seul paramètre de déformation normalisé que nous appellerons y (tel que $yR_0 = a$ est un sphéroïde 'oblate' et $yR_0 = b$ est un sphéroïde 'prolate')

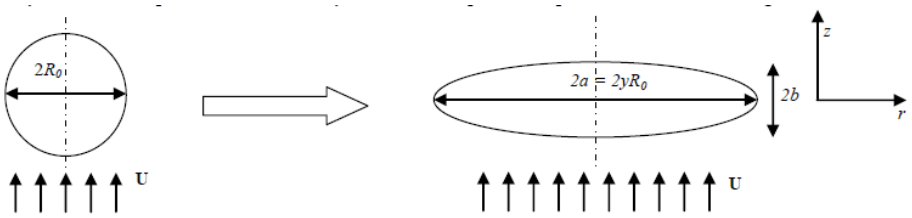


Figure 8-28 : Illustration de l'hypothèse de déformation de la goutte dans un sphéroïde 'oblate' dans l'écoulement environnant

Le bilan d'énergie de la goutte lors de processus de déformation est donné par l'équation suivante :

$$\textbf{eq. 8-5} \qquad \frac{dK}{dt} + \frac{dE_s}{dt} = W_p + D$$

Où K est l'énergie cinétique de la goutte, E_s l'énergie de surface, W_p le travail de la pression et D la dissipation visqueuse à cause de l'écoulement à l'intérieur de la goutte.

8.11.1ECOULEMENT A L'INTERIEUR DE LA GOUTTE

En supposant que la goutte se déforme de manière homothétique dans un sphéroïde, nous trouvons que l'écoulement à l'intérieur de la goutte est décrit par :

$$\textbf{eq. 8-6} \qquad V_l = \frac{\dot{y}}{y} r e_r - 2\frac{\dot{y}}{y} z e_z$$

L'écoulement est considéré bidimensionnel et axisymétrique, par conséquent, la coordonnées θ n'est pas considéré. Cet écoulement à l'intérieur de la goutte permet de calculer les termes K et D (eq. 8-5).

8.11.2TERME D'ÉNERGIE CINÉTIQUE

$$K = \frac{1}{2}\rho_l \iiint_{V(t)} V^2 d^3x$$

Cette intégrale peut être calculé une fois le champ de vitesse est connu (eq. 8-6):

$$\textbf{eq. 8-7} \qquad K = \frac{1}{2}\rho_l K_c(y)\left(\frac{\dot{y}}{y}\right)^2 = \frac{1}{2}\rho_l\left(\frac{\dot{y}}{y}\right)^2 \iint_{Ellipse}(r^2 + 2z^2)2\pi r dr dz$$

8.11.3TERME DE DISSIPATION VISQUEUSE

La dissipation visqueuse à cause de l'écoulement à l'intérieur de la goutte est calculé par :

$$D = \mu_l \int_V \frac{\partial V_i}{\partial x_j}\frac{\partial V_i}{\partial x_j} d^3x$$

L'écoulement est purement extensionnel (selon eq. 8-6). Le calcul exacte de la dissipation est donné par :

$$\textbf{eq. 8-8} \qquad D = \mu_l \iiint_{s_y} 12\left(\frac{\dot{y}}{y}\right)^2 d^3x = 16\pi R_0^3 \mu_l \left(\frac{\dot{y}}{y}\right)^2$$

8.11.4TERME D'ÉNERGIE DE SURFACE

La surface d'un ellipsoide oblate est donnée par :

$$S = 2\pi a^2 + \pi\frac{b^2}{e} Log\left(\frac{1+e}{1-e}\right)$$

Avec $e = \sqrt{1 - \frac{a^2}{b^2}}$ égale à l'excentricité.

La variation temporelle de l'énergie de surface est donnée par:

$$\textbf{eq. 8-9} \qquad \frac{dE_s}{dt} = \sigma\frac{dE_s}{d_y}\frac{dy}{dt} = \sigma K_s(y)\frac{1}{y}\frac{dy}{dt}$$

Avec K_s un polynome qui depend de y

8.11.5TERME DE TRAVAIL DE PRESSION

Le terme de pression du fluide environnant est plus compliqué à trouver. Suivant la théorie de fluides visqueux potentiels de Joseph (Joseph, 2003), le fluide autour de la goutte est supposé être potentiel.

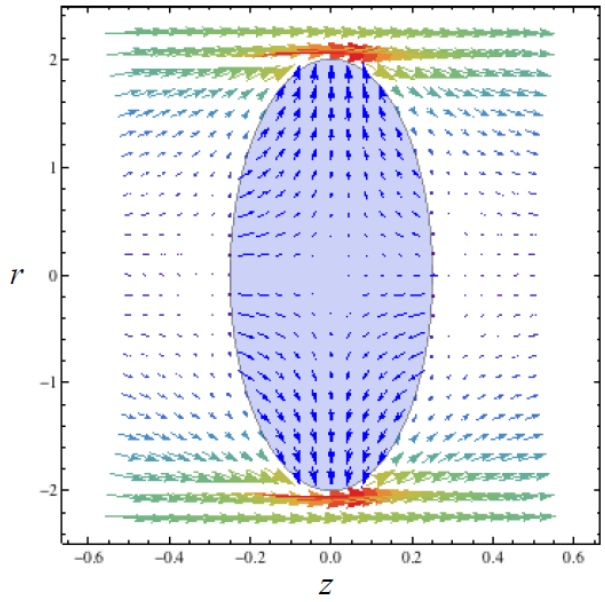


Figure 8-29 : Ecoulement axisymetrique potentiel autour d'un sphéroïde 'oblate'. Le champ de déformation de la goutte correspondant à l'eq. 8-6 est aussi représenté

8.11.6 EQUATION D'OSCILLATION DE LA GOUTTE

En considérant les nombres adimensionnels suivants :

$$\rho_R = \frac{\rho_l}{\rho_c},\ We_c = \frac{\rho_c U_\infty^2 2R_0}{\sigma},\ Re = \frac{\sqrt{\rho_c \rho_l} U_\infty 2R_0}{\mu_l} = \frac{1}{\sqrt{\rho_R}} \frac{\rho_l U_\infty 2R_0}{\mu_l} = \frac{Re_l}{\sqrt{\rho_R}},\ Oh = \frac{\mu_l}{\sqrt{\sigma 2R_0}} = \frac{\sqrt{We_c}}{Re},\ t^* = \frac{t}{\tau},\ \tau = \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_c}} \frac{2R_0}{U_\infty}$$

Nous pouvons combiner les équations eq. 8-7, eq. 8-8, eq. 8-9 pour obtenir l'équation d'oscillation de la goutte :

$$\frac{d}{dt^*}\left(\left(\frac{\dot{y}}{y}\right)^2 K_c(y)\right) + \frac{128\pi}{Re}\left(\frac{\dot{y}}{y}\right)^2 + \frac{16}{We_c} K_s(y)\left(\frac{\dot{y}}{y}\right) = 8K_p(y)\left(\frac{\dot{y}}{y}\right)$$

Cette équation peut être linéarisé autour de $y = 1$. L'équation résultante est (nous considérons $\epsilon = y - 1$) :

$$K_c(1)\epsilon + \frac{64\pi}{Re}\epsilon + \left(\frac{8}{We}\alpha_2 - 4\beta_2\right)\epsilon = 0$$

8.12 DETECTION DE VORTEX: CRITERE λ_2

La pluparts des problèmes de la mécanique de fluides sont dominés par des structures de vorticité. Les vortex sont généralement perçus comme les nerfs et muscles de la turbulence (Chakraborty et al., 2005). Cependant, ces structures sont dans la plupart de cas définies de façon intuitive car il n'y a pas encore un consensus sur l'acceptation générale et une définition rigoureuse du phénomène (Kolář, 2011). Un vaste nombre de méthodes d'identification du cœur du vortex (vortex core en anglais) et de l'axe du vortex (vortex core axis) ont été proposée par le passé, mais aucune ne fait l'unanimité dans la communauté scientifique. Contradictoirement, les vortex sont régulièrement mis en relation avec une quantité mathématique rigoureuse et bien établie physiquement, qui exprime la moyenne de la vitesse angulaire des éléments de fluide, nommé vorticité (Kolář, 2011)

Le terme vortex est utilisé pour désigner un mouvement de rotation du fluide où des particules autour d'un axe droit ou courbe. Les vortex sont dans la plupart des cas mal représentés car les variables utilisées (par exemple, lignes de courant) peuvent être dépendantes du référentiel choisi. Ainsi, un écoulement peut être stationnaire ou transitoire simplement en effectuant un changement de repère (par exemple, l'écoulement de sillage derrière une sphère à faible nombre de Reynolds). La plus grosse difficulté au moment de définir un vortex est donc de garantir l'indépendance par rapport à la référence Galiléenne choisie (galilean invariance en anglas). Cette difficulté est d'autant plus grande lorsque l'écoulement est transitoire.

Dans notre cas, les anneaux de vortex sont de grande importance du fait des courants de fluide qu'ils induisent. Comme nous pouvons le voir dans la Figure 8-30(b), un anneau de vortex induit un courant dans le fluide qui le traverse. Il serait donc important de caractériser l'effet de ces courants induits lors du processus de fragmentation d'une goutte.

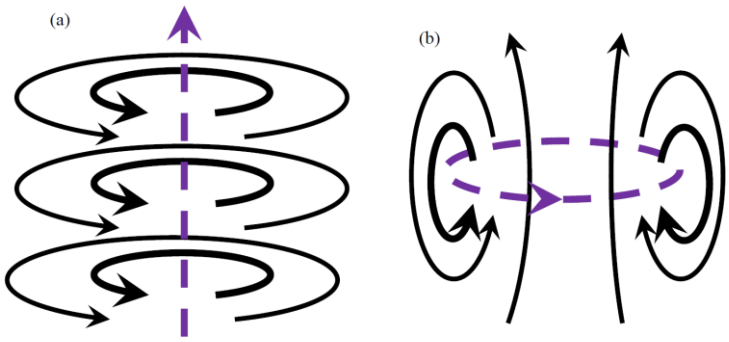


Figure 8-30 : Vortex et leurs écoulements. (a) ligne de vortex et l'écoulement circulaire au tour. (b) anneau de vortex et écoulement à travers l'anneau (Gourlay, 2012)

Pour détecter et quantifier l'intensité de vortex ainsi que son axe de rotation, diverses méthodes ont été proposées par le passé. Le code Gerris (voir chapitre 5) permet de caractériser les vortex à l'aide du critère λ_2 (Jeong and Hussain, 2006). Ce critère est un des plus connus et il est caractérisé par une bonne précision pour détecter des structures de vortex même en présence d'un fort cisaillement proche d'une couche limite. Ce critère est seulement valable pour les écoulements incompressibles. Nous nous contenons d'expliquer rapidement ce critère, cependant, le lecteur peut consulter une bibliographie plus détaille, par exemple (Kolář, 2011), pour plus d'information.

Les critères de détection de vortex nous permettent d'identifier et étudier la dynamique des structures cohérentes du fluide qui sont très importantes pour la caractérisation de l'entrainement et les transferts de masse et de chaleur (notamment dans les couches limites turbulentes). Le critère d'extraction de régions de vortex λ_2 est basé sur le champ de vitesse instantané. La vorticité n'est pas la grandeur idéale pour caractériser les vortex car, par exemple, près des couches limites sa valeur est importante partout, due au fort cisaillement. Les régions de vortex correspondent à une valeur négative de λ_2, qui est la deuxième plus grande valeur propre du tenseur de gradient de vitesse $(S_{ik}S_{kj} + \Omega_{ik}\Omega_{kj})$.

$$\text{Avec } S_{ij} = \frac{u_{i,j}+u_{j,i}}{2} \text{ et } \Omega_{ij} = \frac{u_{i,j}-u_{j,i}}{2}$$

S_{ij} et Ω_{ij} sont les composantes symétrique et antisymétrique du tenseur de gradient de vitesse $u_{i,j} \equiv \partial u_i/\partial x_j$ (Jeong et al., 1997). Une fois que les vortex sont identifiés, l'intensité de ces vortex est calculée à l'aide de l'intensité locale de rotation. Selon un concept généralement utilisé, l'intensité (force) d'un vortex est calculée comme la circulation le long des limites du vortex ou, de façon équivalente, en utilisant le théorème de Green, comme l'intégrale de surface sur une section plane transversale au vortex de la vorticité (Kolář, 2011).

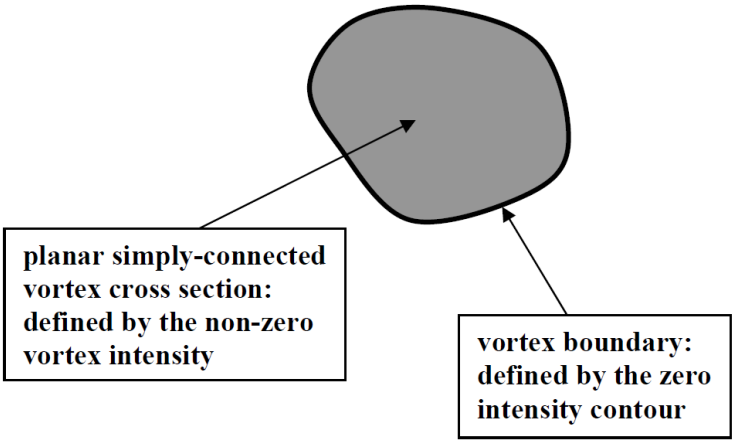


Figure 8-31 : Définition de la section transversale d'un vortex (région du vortex et limites du vortex) (Kolář, 2011)

8.13 ALGORITHME DE SQUELETTISATION

La méthode de squelettisation que nous avons utilisée dans cette thèse consiste en six sous-itérations d'amincissement du volume proposée par (Palàgyi and Kuba, 1998). La méthode est utilisé sur un volume binaire de points (points réparties dans l'espace avec des valeurs égales à zéro ou un). Par une succession de comparaisons avec des stencils prédéfinis, le volume initial est aminci jusqu'à obtenir la ligne médiane laquelle ne peut plus être amincie. Par la suite, nous allons décrire très succinctement la méthode de squelettisation et sa validation.

Pour effectuer une squelettisation, notre point de départ est une matrice binaire (composée de zéro et d'un) où les valeurs un (1) correspondent au volume duquel nous souhaitions trouver les lignes médianes. Dans les cas de simulation de fragmentation de gouttes, cette matrice peut être définie à partir de diverses variables, (par exemple la fraction volumique, le critère λ_2(voir annexe 8.12), la pression, etc.), où nous appliquons un seuil pour définir quelles valeurs correspondent à zéro et lesquelles correspondent à un.

Pour que les algorithmes de squelettisation fonctionnent correctement, les points doivent être distribués régulièrement (même taille de maille). Ceci impose une étape de conditionnement de données où nous modifions les données afin d'avoir un même niveau de raffinement. Une fois la matrice binaire obtenue, l'algorithme de squelettisation peut être utilisé. Un algorithme de squelettisation compare les points du bord du volume choisi avec des stencils prédéfinis. Les points qui satisfont les contraintes imposées par les stencils seront effacés (sa valeur est convertie en zéro). La comparaison est effectuée en plusieurs itérations jusqu'à ce qu'aucun point ne puisse plus être effacé. Le résultat final est la ligne médiane du volume.

L'algorithme que nous utilisons ici est celui proposé par (Palàgyi and Kuba, 1998). La méthode consiste à regarder les vingt-six points voisins aux points de la matrice et à les comparer avec les divers stencils. La Figure 8-32 montre les six stencils utilisés dans cet algorithme, orientées vers la direction U. Les points voisins constituent une matrice ($3x3x3$) laquelle doit être comparé avec ces six stencils plus leur quatre rotations autour de l'axe vertical, ce qui fait un total de 24 stencils à comparer pour chaque direction. Les comparaisons sont effectuées prenant en compte que les grands points noirs (stencils de la Figure 8-32) doivent correspondre à une valeur de 1 dans la matrice de voisins et les grands points blancs à une valeur de zéro. Au moins un point marqué x doit correspondre à 1 et les petits points noirs peuvent être 1 ou 0 (nous n'en tenons pas compte).

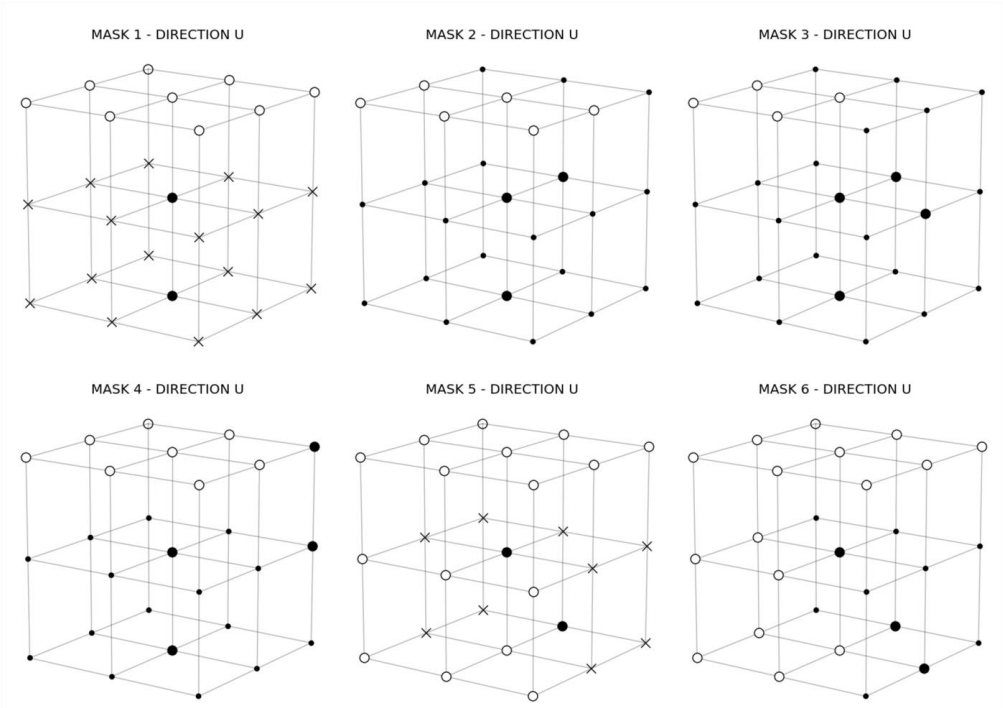


Figure 8-32 : Stencils 1 à 6. Ces stencils sont orientés vers la direction U.

Si la matrice de voisins correspond avec un de ces stencils, le point est marqué pour être effacé postérieurement. La comparaison doit s'effectuer avec des stencils orientés dans les directions (U, D, N, E, S, W), ce qui fait un total de 144 stencils. Les directions d'orientation sont données Figure 8-33.

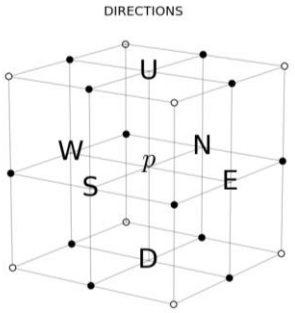


Figure 8-33 : Différentes direction d'orientation des stencils

Cet algorithme de squelettisation compare donc chaque point de la matrice des voisins (constituée de zéros et uns) avec les stencils dans la direction U. Les points qui sont marqués pour être effacés, leur valeur sera mise à zéro à la fin de la boucle qui parcourt toute la matrice de points. Postérieurement, la même procédure est effectuée avec les stencils orientés vers la direction D et ainsi successivement pour les autres directions. A la fin de cette étape de comparaison, s'il y a eu au moins un point qui a été effacé, une nouvelle itération est effectuée jusqu'au moment quand le volume ne peut plus être amincie. La fin de l'algorithme est donnée quand aucun point de la matrice ne soit effacé. Ci-dessus, nous rappelons plus en détail les étapes de la procédure de squelettisation :

Pour trouver la ligne médiane d'un volume quelconque nommé V en trois dimensions, nous devons :

1. Construire la matrice binaire M entourant le volume, où chaque point de la matrice est égal à 1, s'il se trouve dans le volume V et zéro dans le cas contraire.
2. Boucle sur les six directions des stencils dans l'ordre suivante U, D, N, S, E et W
   2.1. Boucle sur tous les points (P_i) de la matrice M égaux à 1
      2.1.1. Trouver les 26 voisins au point P_i dans la matrice M
      2.1.2. Construire la matrice de voisins $M_{P_{(i)}}$ de taille $3 \times 3 \times 3$
      2.1.3. Boucle sur les 24 stencils correspondants à une direction
         2.1.3.1. Comparer les grands points noirs du stencil avec les 1 de la matrice $M_{P_{(i)}}$
         2.1.3.2. Comparer les grands points blancs du stencil avec les 0 de la matrice $M_{P_{(i)}}$
         2.1.3.3. Comparer les x avec les points 1 de la matrice $M_{P_{(i)}}$. Au moins une position marquée x dans le stencil doit correspondre à 1 dans la matrice $M_{P_{(i)}}$
         2.1.3.4. Si les trois comparaisons précédentes sont vraies, le point P_i est marqué pour être effacé
   2.2. S'il existe des points marqués en 2.1.3.4 à effacer, convertir leur valeur à zéro dans la matrice M
3. S'aucun point de la matrice M est effacé dans le point 2 de l'algorithme : Sortir. Dans le cas contraire, retourner au point 2
4. La matrice finale M contiens des points marqués 1 qui constituent le squelette du volume V

Avant d'utiliser cet algorithme sur des données issues de simulation de gouttes, nous l'avons testé sur des géométries connues, les mêmes utilisées dans la publication de (Palàgyi and Kuba, 1998) pour valider notre algorithme. Deux de ces géométries sont présentées dans la Figure 8-34 avec ses squelettes respectifs.

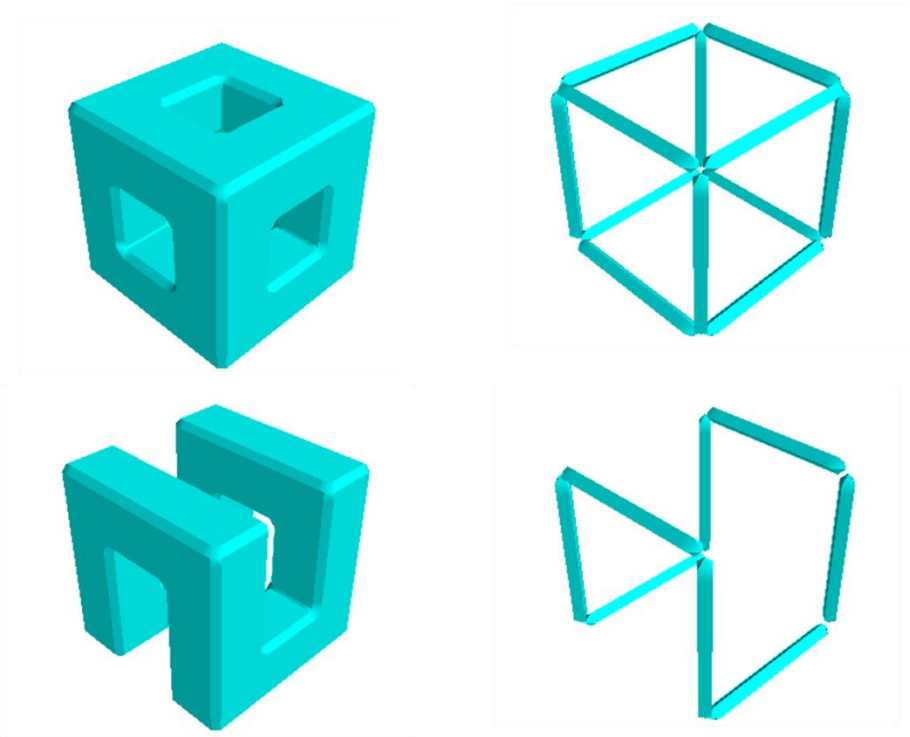


Figure 8-34 : Squelettisation des images de taille 24*24*24 (gauche) et ses lignes médianes (squelettes)

Les résultats de la Figure 8-34 sont corrects et égaux à ceux présentés en (Palàgyi and Kuba, 1998), ce qui valide notre algorithme. A titre d'information, cette algorithme a été implémenté sous Python 2.7 et optimisé avec Cython. Cet algorithme peut être utilisé avec n'importe quelle matrice binaire pour trouver les lignes médianes d'un volume. Il peut aussi être complémenté avec d'autres méthodes de squelettisation, comme par exemple, une méthode d'érosion. L'érosion que nous avons implémenté consiste à regarder les voisins du point marqué 1. Dans le cas où tous les points voisins sont des zéros, le point marqué 1 deviendra zéro car celui-ci était un point isolé, ne faisant partie du squelette.

8.14 VARIATION DES CARACTERISTIQUES DU VORTEX ET DEPENDANCE DU CRITERE λ_2

Le critère λ_2 décrit dans l'annexe 8.12 est utilisé pour déterminer les limites des différents vortex générés pendant les simulations numériques de fragmentation de gouttes. La première constatation lors de l'identification du vortex est que ceux-ci ne sont pas clairement définis par la condition $\lambda_2 < 0$. En effet, plusieurs structures complexes autour du vortex apparaissent rendant difficile l'identification du vortex auquel nous nous intéressons. Un exemple simple de la variation morphologique du vortex en fonction du critère λ_2 choisi est présenté en Figure 8-35.

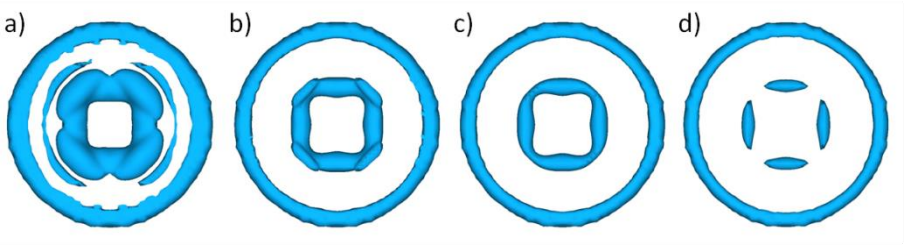


Figure 8-35 : Variation morphologique du vortex identifié par le critère λ_2 dans le sillage de la goutte. Pour $We = 4.45$. a) $\lambda_2 < -0.000025$; b) $\lambda_2 < -0.00005$; c) $\lambda_2 < -0.000066$; d) $\lambda_2 < -0.0001$

Dans ce cas, le vortex d'intérêt est celui à l'intérieur. Nous constatons que le vortex est de plus grande taille au fur et à mesure que le critère λ_2 est proche de zéro. Les structures qui entourent le vortex dans la Figure 8-35 a, sont sources d'erreur pour l'algorithme de squelettisation développé pendant cette thèse, car certains points du squelette seront attribuées dans cette zone. Il est, du point de vu informatique, difficile de définir un critère pour éliminer systématiquement ces points.

Nous avons choisi de diminuer la valeur du critère λ_2. Nous constatons que la structure du vortex devient plus nette au fur et à mesure qu'nous diminuons la valeur de λ_2. Cependant, une valeur trop petite de λ_2 peut provoquer la disparition du vortex (voir Figure 8-35, d). Visuellement, nous considérons que une valeur de $\lambda_2 < -0.000066$ présente un bon compromis entre netteté du vortex et taille. Dans la Figure 8-36, nous constatons l'influence du seuil λ_2 sur les valeurs de vorticité du vortex.

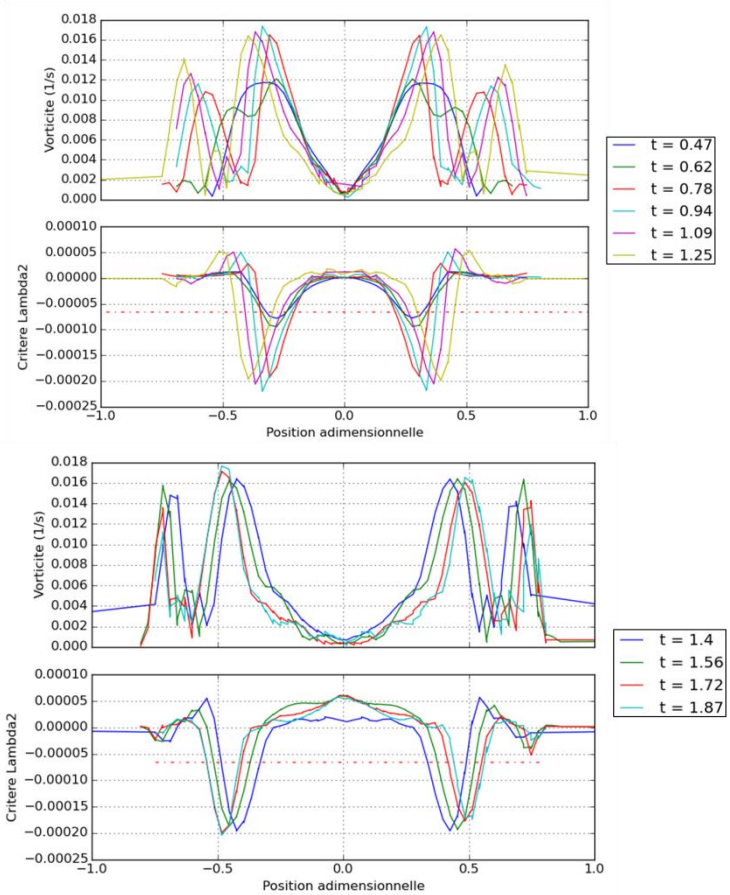
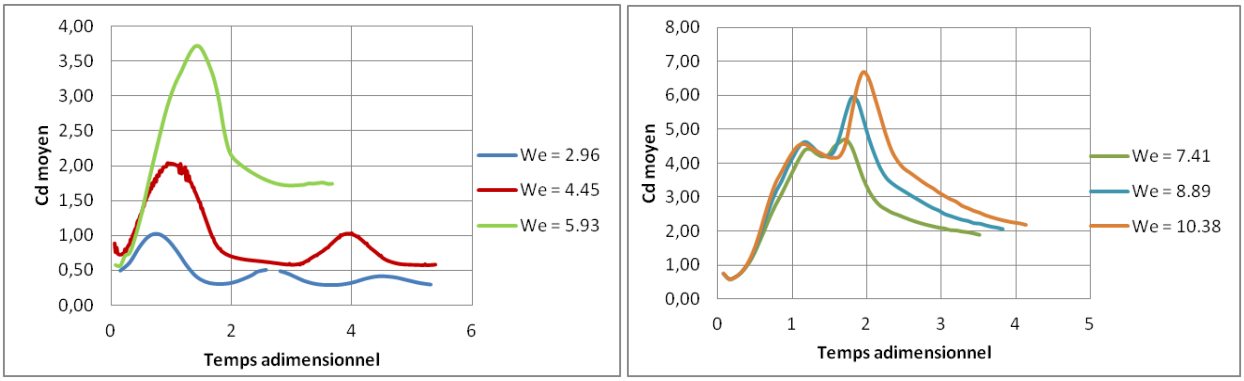


Figure 8-36 : Valeurs de vorticité de l'anneau de vortex (Haut) et la valeur correspondante au critère λ_2 (bas) à différents instants de temps pour un $We = 4.45$

Nous constatons que nous pouvons induire une erreur sur les valeurs de vortex considères. En effet, le seuil de λ_2 exclu certains valeurs de vorticité. Cependant, nous constatons aussi qu'un seul plus proche de zéro peut induire plus d'erreur à cause de la prise en compte de diverses structures qui n'appartiennent pas au vortex et qui seront pris en compte dans le calcul de l'intensité.

8.15 COEFFICIENT DE TRAINEE PENDANT LA FRAGMENTATION SECONDAIRE

Nous avons évalué le coefficient de trainée avec l'Eq. 2-8:



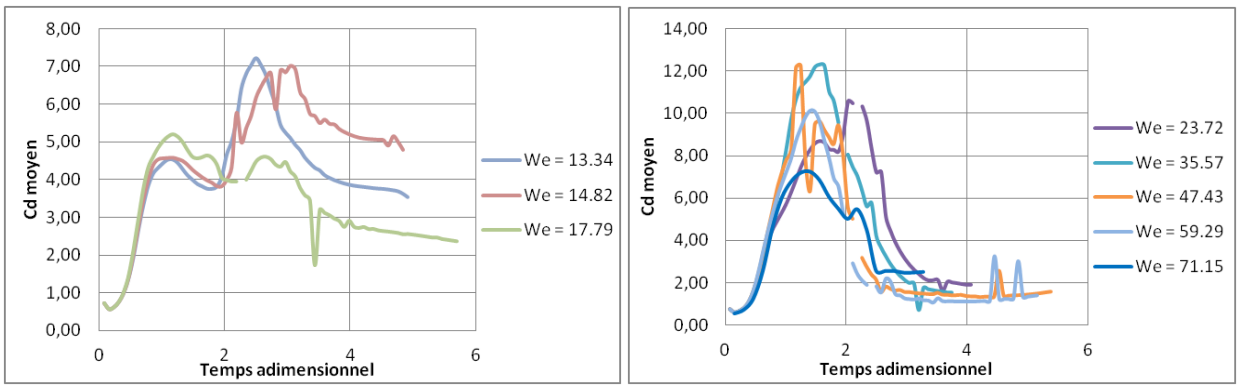


Figure 8-37 : Variation temporelle du coefficient de trainée moyen en fonction de divers régimes de fragmentation

Dans les courbes présentées en Figure 8-37, nous constatons que la valeur initiale du coefficient de trainée est de 0.45, correspondante à la valeur de coefficient de trainée d'une sphère. Ensuite, le coefficient de trainée augmente considérablement jusqu'au une valeur maximale

8.16 COMPARAISON DE LA SIMULATION DE LA FRAGMENTATION DE GOUTTES EN CONFIGURATION GALLIUM-EAU ET ALUMINE-EAU

Nous avons comparé diverses simulations de fragmentation de goutte avec différentes configurations. Ces configurations correspondent à trois différents essais expérimentaux. La configuration Gallium-eau est issue des résultats expérimentaux de Gelfand (Gelfand, 1996) et Kim (Kim, 1983). Nous avons effectué de simulations en configuration Alumine-Eau car celle-ci a été utilisé pour des essais d'explosion de vapeur lors du programme expérimental KROTOS (Huhtiniemi et al., 1999; Uršič et al., 2012). Les résultats montrent des explosions d'une très forte intensité comparés à celles effectuées avec du corium prototypique. Pour l'instant, aucun raisonnement ne permet d'expliquer ce comportement de manière réaliste. Nous avons donc, effectué des simulations pour regarder plus en détail le processus de fragmentation secondaire avec ce type de matériaux.

Cette étude qualitative a été effectuée à fin de relever de différences lors de processus de fragmentation secondaire pour diverses configurations métal-eau. Nous pouvons analyser l'impact de propriétés physiques lors de processus ainsi que les hypothèses prises pour la modélisation de cette interaction, notamment la dépendance au nombre de Weber. Le Tableau 15 montre les propriétés physiques le plus importantes pour la fragmentation secondaire de chacune des configurations étudiées.

Configuration	Rapport de masse volumiques (ρ_d/ρ_c)	Rapport de viscosités (μ_d/μ_c)	Tension de surface (σ)	Nombre d'Ohnesorge goutte (Oh_d) et eau (Oh_c)	
Gallium - Eau	$\rho_R \approx 6.07$	$\mu_R \approx 1.6$	$\sigma \approx 0.7$	$Oh_d = 4.47\ 10^{-4}$	$Oh_c = 6.89\ 10^{-4}$
Alumine - Eau	$\rho_R \approx 2.75$	$\mu_R \approx 20.0$	$\sigma \approx 0.62$	$Oh_d = 8.84\ 10^{-3}$	$Oh_c = 7.34\ 10^{-4}$

Tableau 15 : Propriétés physiques de diverses configurations étudiées en simulation de la fragmentation secondaire

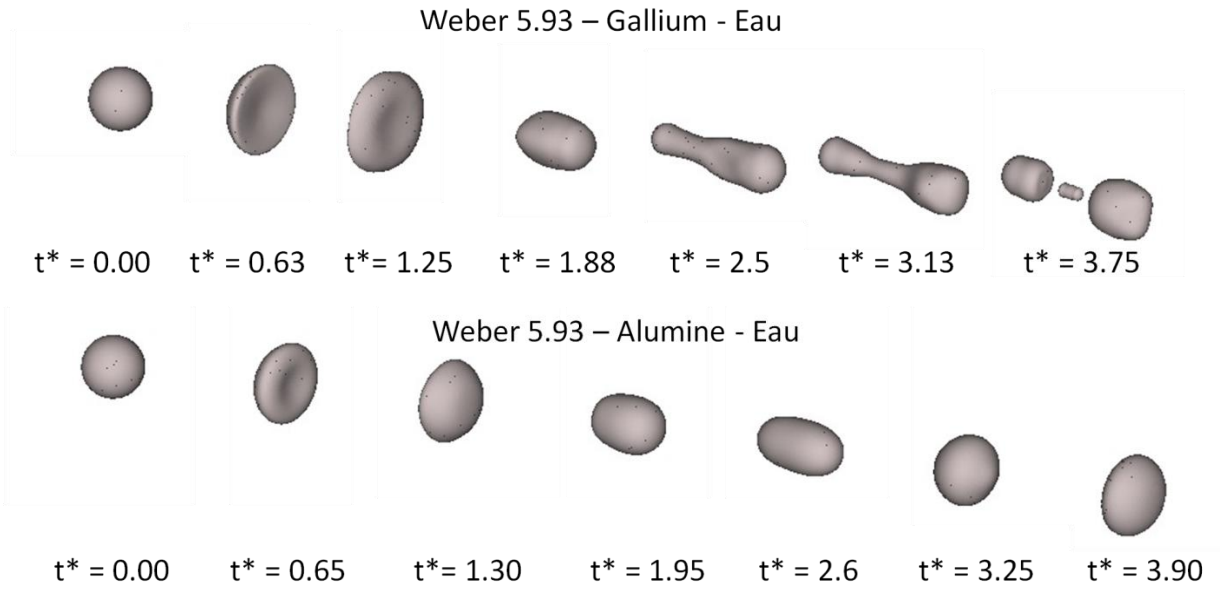
La première configuration a été étudiée dans le chapitre 6 et sera la référence pour les autres simulations. Nous n'avons pas pu effectuer des simulations complètes au niveau temporel (jusqu'au la fin de la fragmentation), cependant, l'information obtenue nous permet d'analyser la dynamique de l'interaction.

Nous allons analyser les diverses configurations en fonction de différentes régimes de fragmentation identifiées en chapitre 6, classifiées en fonction du nombre de Weber[34]

[34] Afin de comparer effectivement le même nombre de Weber de l'interaction, il faut considérer que pendant la simulation, au premier pas de temps, la goutte liquide acquière une vitesse initiale fonction du rapport de masses

Régime de fragmentation[35]	Weber	Configuration Gallium-Eau		Configuration Alumine-Eau	
		Reynolds du fluide environnant	Différence de vitesse	Reynolds du fluide environnant	Différence de vitesse
Oscillation	2.96	2499,24	0,83	2346,07	0,78
Fragmentation par élongation	5.93	3534,46	1,18	3317,84	1,11
	8.89	4328,81	1,45	4063,51	1,36
	11.86	4998,48	1,67	4692,14	1,57
Fragmentation par rupture du sac	14.82	5588,47	1,87	5245,97	1,75
	17.79	6121,86	2,04	5746,67	1,92
Fragmentation par enroulement de la nappe autour du vortex et rupture de sac	23.72	7068,92	2,36	6635,69	2,22
	47.43	9996,96	3,34	9384,28	3,13
	59.29	11176,94	3,73	10491,94	3,50
	71.15	12243,73	4,09	11493,35	3,84

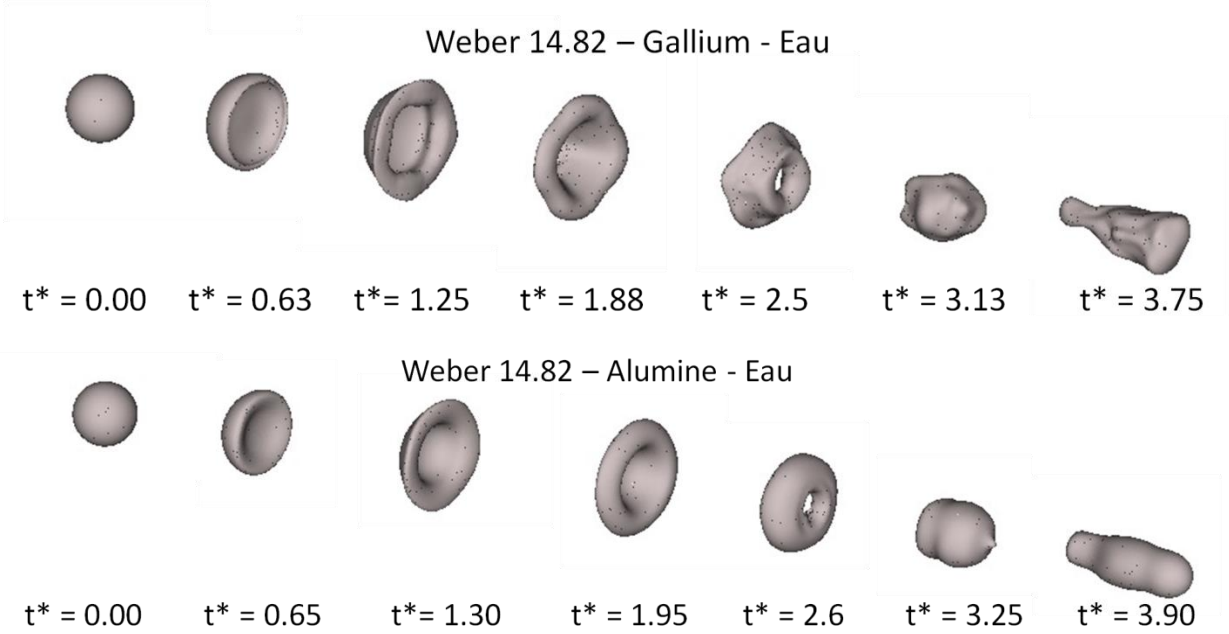
8.16.1 REGIME DE FRAGMENTATION PAR ELONGATION



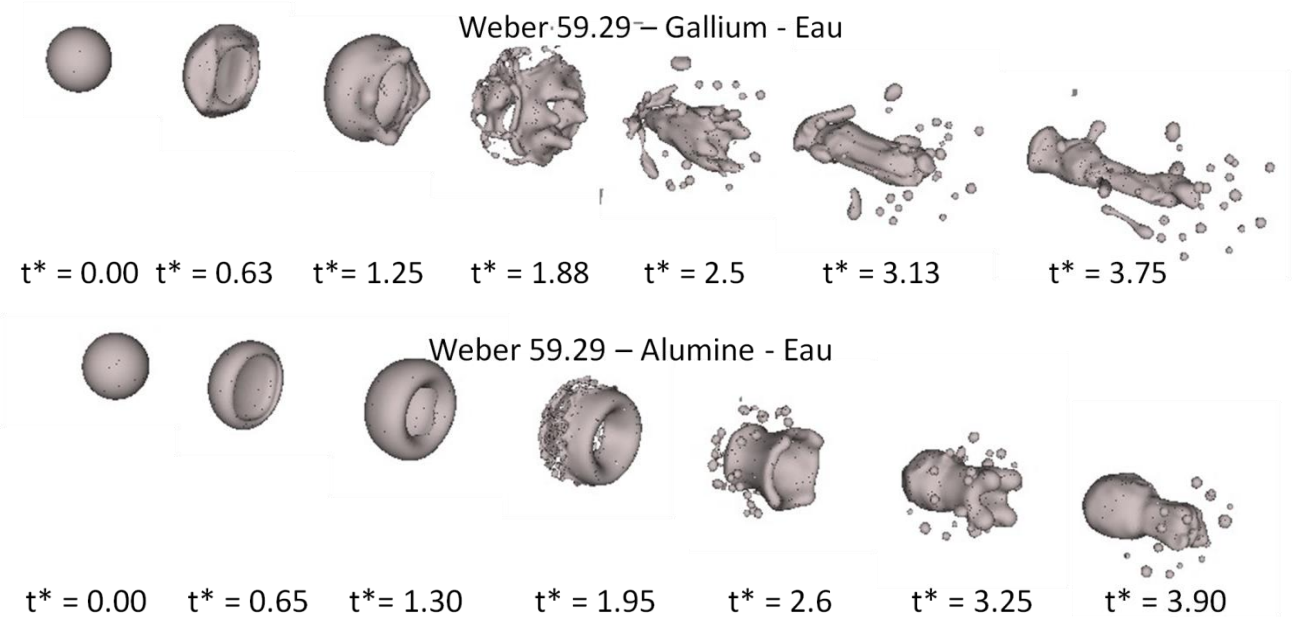
volumiques (voir annexe 8.10). Nous utilisons un facteur multiplicateur afin de calculer le Weber réel d'interaction. Ceci est déjà pris en compte dans les valeurs de Weber données dans cette thèse.

[35] Les régimes de fragmentation correspondent à ceux identifiées dans le chapitre 6. Il faut tenir compte que pour la configuration Alumine-Eau, cette classification peut être modifiée.

8.16.2 REGIME DE FRAGMENTATION PAR RUPTURE DU SAC



8.16.3 REGIME D'ENROULEMENT DE LA NAPPE AUTOUR DU VORTEX ET FRAGMENTATION DE LA NAPPE



BIBLIOGRAPHIE

Abe, Y., Kizu, T., Arai, T., Nariai, H., Chitose, K., Koyama, K., 2004. Study on thermal-hydraulic behavior during molten material and coolant interaction. Nucl. Eng. Des. 230, 277–291. doi:10.1016/j.nucengdes.2003.11.032

Abe, Y., Matsuo, E., Arai, T., Nariai, H., Chitose, K., Koyama, K., Itoh, K., 2006. Fragmentation behavior during molten material and coolant interactions. Nucl. Eng. Des. 236, 1668–1681. doi:10.1016/j.nucengdes.2006.04.008

Avital, E., 1995. Asymmetric instability of a viscid capillary jet in an inviscid media. Phys. Fluids.

Bang, K., Kim, J., Kim, D., 2003. Experimental study of melt jet breakup in water. J. Nucl. Sci. … 37–41.

Bilbao, R.M., Chu, C., Corradini, M.L., Huhtiniemi, I., Murphy, S., Nilsuwankosit, J.T., 1996. TEXAS Code Manual: A One Dimensional Transient Model for Fuel-Coolant Interaction Analysis.

Boeck, T., Zaleski, S., 2005. Viscous versus inviscid instability of two-phase mixing layers with continuous velocity profile. Phys. Fluids 17, 32106. doi:10.1063/1.1862234

Boiko, V.M., Poplavski, S. V., 2012. Experimental study of two types of stripping breakup of the drop in the flow behind the shock wave. Combust. Explos. Shock Waves 48, 440–445. doi:10.1134/S0010508212040107

Brackbill, Kothe, Zemach, 1992. A Continuum Method for modeling surface tension. J. Comput. Phys.

Burger, M., Cho, S.H., Berg, E., Schatz, A., Bürger, M., 1995. Breakup of melt jets as pre-condition for premixing: Modeling and experimental verification. Nucl. Eng. Des. 155, 215–251.

Bürger, M., Müller, K., Buck, M., Cho, S., 1991. Examination of thermal detonation codes and included fragmentation models by means of triggered propagation experiments in a tin/water mixture. Nucl. Eng. Des. 131, 61–70.

Castrillon Escobar, S., Meignen, R., Rimbert, N., Gradeck, M., 2013. Modeling Liquid Nuclear Fuel Fragmentation and Dispersion During a Severe Nuclear Incident, in: 5th International Conference on Spray Deposition and Melt Atomization. pp. 1–12.

Chakraborty, P., Balachandar, S., Adrian, R.J., 2005. On the relationships between local vortex identification schemes. J. Fluid Mech. 535, 189–214. doi:10.1017/S0022112005004726

Chen, X., Yang, V., 2014. Thickness-based adaptive mesh refinement methods for multi-phase flow simulations with thin regions. J. Comput. Phys. 269, 22–39. doi:10.1016/j.jcp.2014.02.035

Chigier, N., Farago, Z., 1992. Morphological classification of disintegration of round liquid jets in coaxial air stream. At. Sprays 2, 137–153. doi:10.1615/AtomizSpr.v2.i2.50

Chu, C., Corradini, M., 1998. A Code Manual for TEXAS-V: One Dimensional Transient Fluid Model Fuel-Coolant Interaction Analysis.

Ciccarelli, G., Frost, D., 1994. Fragmentation mechanisms based on single drop steam explosion experiments using flash X-ray radiography. Nucl. Eng. Des. 146, 109–132.

De Malmazet, E., 2009. Etude de la fragmentation de gouttes chaudes en ébullition en film dans un écoulement d'eau (thèse). Institut national polytechnique (Grenoble).

Dinh, T.N., Bui, V. a., Nourgaliev, R.R., Green, J. a., Sehgal, B.R., 1999. Experimental and analytical studies of melt jet-coolant interactions: a synthesis. Nucl. Eng. Des. 189, 299–327. doi:10.1016/S0029-5493(98)00275-1

Epstein, M., 1977. Stability of a Submerged Frozen Crust. J. Heat Transfer 99, 527. doi:10.1115/1.3450737

Epstein, M., Fauske, H.K., 2001. Applications of the turbulent entrainment assumption to immiscible gas-liquid and liquid-liquid systems. Trans IChemE 79, 453–462. doi:10.1205/026387601750282382

Epstein, M., Hauser, G., 1980. Subcooled forced-convection film boiling in the forward stagnation region of a sphere or cylinder. Int. J. Heat Mass Transf. 23, 179–189.

Funada, T., Joseph, D.D., 2001. Viscous potential flow analysis of Kelvin–Helmholtz instability in a

channel. J. Fluid Mech. 445, 263–283. doi:10.1017/S0022112001005572

Fuster, D., Agbaglah, G., Josserand, C., Popinet, S., Zaleski, S., 2009. Numerical simulation of droplets, bubbles and waves: state of the art. Fluid Dyn. Res. 41, 65001. doi:10.1088/0169-5983/41/6/065001

Gelfand, B., 1996. Droplet breakup phenomena in flows with velocity lag. Prog. Energy Combust. Sci. 22, 201–265.

Gorokhovski, M., Cedex, E., 2008. Modeling primary atomization. Annu. Rev. Fluid Mech. 1–43.

Gorokhovski, M., Jouanguy, J., Chtab, A., 2006. LES with stochastic simulation of primary and secondary air–blast atomization. Proc. ICLASS–2006, Kyoto, Japan.

Gourlay, M.J., 2012. Fluid Simulation for Video Games (part 01). Intel Dev. Zo. 1–14.

Guildenbecher, D.R., López-Rivera, C., Sojka, P.E., 2009. Secondary atomization. Exp. Fluids 46, 371–402. doi:10.1007/s00348-008-0593-2

Hadj-Achour, M., Rimbert, N., Castrillon Escobar, S., Gradeck, M., 2015. A study of Liquid-Liquid Secondary Fragmentation with Solidification, in: 13th Triennial International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems. Tainan, Taiwan.

Han, J., Tryggvason, G., 2001. Secondary breakup of axisymmetric liquid drops. II. Impulsive acceleration. Phys. Fluids 13, 1554. doi:10.1063/1.1370389

Han, J., Tryggvason, G., 1999. Secondary breakup of axisymmetric liquid drops. I. Acceleration by a constant body force. Phys. Fluids 11, 3650. doi:10.1063/1.870229

Haraldsson, H.Ó., Li, H.X., Yang, Z.L., Dinh, T.N., Sehgal, B.R., 2001. Effect of solidification on drop fragmentation in liquid-liquid media. Heat Mass Transf. 37, 417–426. doi:10.1007/s002310000097

Harlow, F., Amsden, A., 1971. A numerical fluid dynamics calculation method for all flow speeds. J. Comput. Phys.

Herrmann, M., 2010. Detailed Numerical Simulations of the Primary Atomization of a Turbulent Liquid Jet in Crossflow. J. Eng. Gas Turbines Power 132, 61506. doi:10.1115/1.4000148

Herrmann, M., 2008. On simulating primary atomization using the refined level set grid method. ILASS Am. 21st Annu. Conf. Liq. At. Spray Syst.

Herrmann, M., 2003. Modeling primary breakup: A three-dimensional Eulerian level set/vortex sheet method for two-phase interface dynamics 185–196.

Hinze, J.O., 1955. Fundamentals of the hydrodynamic mechanism of splitting in dispersion processes. AIChE J. 1, 289–295. doi:10.1002/aic.690010303

Hong, M., 2003. Atomisation et mélange dans les jets coaxiaux liquide-gaz. Grenoble, INPG.

Hoyt, J.W., Taylor, J.J., 1977. Waves on water jets. J. Fluid Mech. 83, 119. doi:10.1017/S0022112077001074

Hsiang, L., Faeth, G., 1995. Drop deformation and breakup due to shock wave and steady disturbances. Int. J. Multiph. Flow 21, 545–560.

Hsiang, L., Faeth, G., 1992. Near-limit drop deformation and secondary breakup. Int. J. Multiph. Flow 18, 635–652.

Huhtiniemi, I., Hohmann, H., Magallon, D., 1997. FCI experiments in the corium/water system. Nucl. Eng. Des. 177, 339–349. doi:10.1016/S0029-5493(97)00202-1

Huhtiniemi, I., Magallon, D., Hohmann, H., 1999. Results of recent KROTOS FCI tests: alumina versus corium melts. Nucl. Eng. Des. 189, 379–389. doi:10.1016/S0029-5493(98)00269-6

Ibrahim, E.A., Yang, H.Q., Przekwas, A.J., 1993. Modeling of spray droplets deformation and breakup. J. Propuls. Power 9, 651–654.

Ishii, M., Kataoka, I., 1982. Interfacial transfer in annular dispersed flow. Present. NATO Advan. Study Inst. Nonlinear Raman Spectrosc. its Chem. Appl.

Jacquemain, D., 2013. Les accidents de fusion du coeur des réacteurs nucléaires de puissance - état de

connaissance, IRSN. ed. edp sciences, France.

Jeong, J., Hussain, F., 2006. On the identification of a vortex. J. Fluid Mech. 285, 69. doi:10.1017/S0022112095000462

Jeong, J., Hussain, F., Schoppa, W., Kim, J., 1997. Coherent structures near the wall in a turbulent channel flow. J. Fluid Mech. 332, 185–214.

Joseph, D.D., 2003. Viscous potential flow. J. Fluid Mech. 479, 191–197. doi:10.1017/S0022112002003634

Jouanguy, J., 2007. Modélisation phénoménologique de pulvérisation de sprays couplée à une approche LES pour la phase gazeuse.

Khare, P., Yang, V., 2013. Drag Coefficients of Deforming and Fragmenting Liquid Droplets. ILASS Am. 25th Annu. Conf. Liq. ….

Kim, D., 1983. Experimental investigation of hydrodynamic fragmentation of gallium drops in water flows, in: International Meeting on Light Water Reactor Severe Accident Evaluation. Cambridge.

Kocamustafaogullari, G., Ishii, M., 1995. Foundation of the interfacial area transport equation and its closure relations. Int. J. Heat Mass Transf. 38, 481–493. doi:10.1016/0017-9310(94)00183-V

Kolář, V., 2011. Brief notes on vortex identification, in: Proc of the 8th WSEAS Intl Conf on Fluid Mechanics. pp. 23–28.

Kolmogorov, A.N., 1941. On the log-normal distribution of particles sizes during break-up process. Dokl. Akad. Nauk SSSR 31, 99–101.

Kondo, S., Konishi, K., Isozaki, M., Imahori, S., Furutani, A., Brear, D.J., 1995. Experimental study on simulated molten jet-coolant interactions. Nucl. Eng. Des. 155, 73–84. doi:10.1016/0029-5493(94)00870-5

Lamome, J., 2007. Etude de la phase d'initiation et d'escalada d'une explosion de vapeur. Université Grenoble I - Joseph Fourier.

Lamome, J., Meignen, R., 2008. On the explosivity of a molten drop submitted to a small pressure perturbation. Nucl. Eng. Des. 238, 3445–3456. doi:10.1016/j.nucengdes.2008.08.006

Lasheras, J., Hopfinger, E., 2000. Liquid jet instability and atomization in a coaxial gas stream. Annu. Rev. Fluid Mech. 275–308.

Lasheras, J.C., Villermaux, E. Hopfinger, E.J., 1998. Break-up and atomization of a round water jet by a high-speed annular air jet. J. Fluid Mech. 357, 351–379. doi:10.1017/S0022112097008070

Lin, S., Webb, R., 1994. Nonaxisymmetric evanescent waves in a viscous liquid jet. Phys. Fluids.

Lo, S., 1996. Application of the MUSIG model to bubbly flows. AEAT-1096, AEA Technol.

Lucas, D., Krepper, E., 2007. CFD models for polydispersed bubbly flows.

Magallon, D., 2006. Characteristics of corium debris bed generated in large-scale fuel-coolant interaction experiments. Nucl. Eng. Des. 236, 1998–2009. doi:10.1016/j.nucengdes.2006.03.038

Magallon, D., Hohmann, H., 1995. High pressure corium melt quenching tests in FARO 155, 253–270.

Magallon, D., Huhtiniemi, I., 2001. Corium melt quenching tests at low pressure and subcooled water in FARO. Nucl. Eng. Des. 204, 369–376. doi:10.1016/S0029-5493(00)00318-6

Magallon, D., Huhtiniemi, I., Hohmann, H., 1999. Lessons learnt from FARO/TERMOS corium melt quenching experiments. Nucl. Eng. Des. 189, 223–238. doi:10.1016/S0029-5493(98)00274-X

Marmottant, P., 2001. Atomisation d'un liquide par un courant gazeux (Thesis). Institut national polytechnique de Grenoble.

Marmottant, P., Villermaux, E., 2004. On spray formation. J. Fluid Mech. 498, 73–111. doi:10.1017/S0022112003006529

Marshall, B.W.J., Berman, M., Krein, M.S., 1985. Recent intermediate-scale experiments on fuel-coolant interactions in an open geometry (EXO-FITS).

Matsuo, E., Abe, Y., Chitose, K., Koyama, K., Itoh, K., 2008. Study on jet breakup behavior at core disruptive accident for fast breeder reactor. Nucl. Eng. Des. 238, 1996–2004.

doi:10.1016/j.nucengdes.2007.11.011

Matsuo, E., Abe, Y., Chitose, K., Koyama, K., Itoh, K., Nariai, H., 2006. Study on jet breakup behavior at core disruptive accident for fast breeder reactor, in: Proceedings of the 14th International Conference on Nuclear Engineering. pp. 1996–2004. doi:10.1016/j.nucengdes.2007.11.011

Mayer, E., 1961. Theory of Liquid Atomization in High Velocity Gas Streams. ARS J. 31, 1783–1785.

Meignen, R., 2005. SERENA - Comparative review of the codes and models used for the SERENA calculations.

Meignen, R., 1995. Modélisation de la fragmentation d'un jet liquide à très haute température dans un liquide froid volatil. Institut National Polytechnique de Grenoble.

Meignen, R., Berthoud, G., 1995. A Model for Vapour Film Around High Temperature Melt Jets in Water: Implications for the Jet Stability, in: European Two-Phase Flow Group Meeting, Eindhoven, Germany.

Meignen, R., Magallon, D., 2005. Comparative Review of FCI Computer Models Used in the OECD-SERENA Program, in: Proceedings of ICAPP 2005. pp. 1–13.

Meignen, R., Picchi, S., 2012. Description of the physical models of the premixing application.

Meignen, R., Picchi, S., Lamome, J., Raverdy, B., Castrillon Escobar, S., Nicaise, G., 2014a. The challenge of modeling fuel–coolant interaction: Part I – Premixing. Nucl. Eng. Des. 280, 511–527. doi:10.1016/j.nucengdes.2014.08.029

Meignen, R., Raverdy, B., Picchi, S., Lamome, J., 2014b. The challenge of modeling fuel – coolant interaction : Part II – Steam explosion. Nucl. Eng. Des. 280, 528–541. doi:10.1016/j.nucengdes.2014.08.028

Miles, J.W., 1957. On the generation of surface waves by shear flows. J. Fluid Mech. 3, 185–204. doi:10.1017S0022112057000567

Mitchell, D.E., Corradini, M.L., Tarbell, W.W., n.d. ntermediate Scale Steam Explosion Phenomena: Experiments and Analysis, in: NUREG/CR-2145, SAND81-0124.

N. Rasmussen et al., 1975. Reactor Safety Study, WASH-1400. Washington D.C.

Namiech, J., 2002. Fragmentation d'un jet de corium lors de sa chute dans l'eau. Institut National Polytechnique de Grenoble.

Namiech, J., Berthoud, G., Coutris, N., 2004. Fragmentation of a molten corium jet falling into water. Nucl. Eng. Des. 229, 265–287. doi:10.1016/j.nucengdes.2004.01.004

Narayanan, K.S., Das, S.K., Jasmin Sudha, A., Rao, E.V.H.M., Lydia, G., Murthy, S.S., Kumaresan, M., Harvey, J., Kasinathan, N., Rajan, M., 2006. Assessment of Thermal and Hydrodynamic Fragmentation in Molten Fuel Coolant Interaction With Simulant System, in: Proceedings of ICONE14. ASME, pp. 187–195. doi:10.1115/ICONE14-89404

O'Rourke, P., Amsden, A., 1987. The TAB Method for Numerical Calculation of Spray Droplet Breakup. SAE Tech. Pap. 872089. doi:10.4271/872089

OECD Nuclear Energy Agency, 2014. OECD/SERENA Project Report - Summary and Conclusions.

Okkonen, T., 1999. Film boiling on a vertical high-temperature surface: focusing on melt jet-water interactions. Nucl. Eng. Des. 189, 273–297. doi:10.1016/S0029-5493(99)00033-3

Padrino, J., 2006. Shear instability of a planar liquid jet immersed in a high speed gas stream. aem.umn.edu.

Palàgyi, K., Kuba, A., 1998. A 3D 6-subiteration thinning algorithm for extracting medial lines. Pattern Recognit. Lett. 19, 613–627. doi:10.1016/S0167-8655(98)00031-2

Park, I.K., Kim, J.H., Min, B.T., Hong, S.W., 2013. Thermal-hydraulic aspects of FCIs in TROI corium/water interaction tests. Nucl. Eng. Des. 263, 419–430. doi:10.1016/j.nucengdes.2013.06.014

Pilch, M., Erdman, C., 1987. Use of breakup time data and velocity history data to predict the maximum size of stable fragments for acceleration-induced breakup of a liquid drop. Int. J. Multiph. Flow 13,

741–757.

Piluso, P., Hong, S.W., 2009. OECD SERENA: A Fuel Coolant Interaction Programme (FCI) devoted to reactor case, in: Implementation of Severe Accident Management Measures (ISAMM-2009). Switzerland.

Plaut, E., 2010. Module SE131 Mecanique des fluides 1: Test du 22 novembre 2010 1–4.

Pohlner, G., Vujic, Z., Bürger, M., Lohnert, G., 2006. Simulation of melt jet breakup and debris bed formation in water pools with IKEJET/IKEMIX. Nucl. Eng. Des. 236, 2026–2048. doi:10.1016/j.nucengdes.2006.03.037

Popinet, S., 2009. An accurate adaptive solver for surface-tension-driven interfacial flows. J. Comput. Phys. 228, 5838–5866. doi:10.1016/j.jcp.2009.04.042

Popinet, S., 2003. Gerris: a tree-based adaptive solver for the incompressible Euler equations in complex geometries. J. Comput. Phys. 190, 572–600. doi:10.1016/S0021-9991(03)00298-5

Popinet, S., Antkowiak, A., 2011. Lecture notes Breakup of cylindrical jets Singularities and self-similar solutions 1–11.

Pouliquen, O., Chomaz, J.M., Huerre, P., 1994. Propagating Holmboe waves at the interface between two immiscible fluids 266.

Ranger, A., Nicholls, J., 1972. Atomization of liquid droplets in a convective gas stream. Int. J. Heat Mass Transf. 15, 1203–1211.

Reitz, R., Diwakar, R., 1987. Structure of high-pressure fuel sprays. SAE Pap. 870598.

Rimbert, N., 2003. Contribution à l'étude de la pulvérisation et de la dispersion dans l'air de fluides newtoniens et non-newtoniens: application aux largages aériens d'eau et de fluide.

Rimbert, N., Castanet, G., 2011. Crossover between Rayleigh-Taylor instability and turbulent cascading atomization mechanism in the bag-breakup regime. Phys. Rev. E.

Rimbert, N., Hadj-Achour, M., Castrillon Escobar, S., Gradeck, M., 2015. Semi-analytical Model of Oscillation of Liquid Metal Droplet in a Water Flow, in: ICLASS 2015, 13th Triennial International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems. Tainan, Taiwan, pp. 1–8.

Rimbert, N., Hajjar, A., Castrillon-Escobar, S., 2014. A New Look at the Droplet Deformation and Breakup Model. 26th Annu. Conf. Liq. At. spray Syst.

Saito, M., 1988. Experimental study on penetration behavior of water jet into Freon-11 and liquid nitrogen. ANS Proc. 1988 Natl. Heat Transf. Conf.

Saito, R., Abe, Y., Yoshida, H., 2014. Experimental study on breakup and fragmentation behavior of molten material jet in complicated structure of BWR lower plenum. J. Nucl. Sci. Technol. 51, 64–76. doi:10.1080/00223131.2014.849211

Schneider, J.P., 1993. Breakup of metal jets penetrating a volatile liquid (Thesis). University of Illinois.

Shinjo, J., Umemura, a., 2011. Surface instability and primary atomization characteristics of straight liquid jet sprays. Int. J. Multiph. Flow 37, 1294–1304. doi:10.1016/j.ijmultiphaseflow.2011.08.002

Shinjo, J., Umemura, a., 2010. Simulation of liquid jet primary breakup: Dynamics of ligament and droplet formation. Int. J. Multiph. Flow 36, 513–532. doi:10.1016/j.ijmultiphaseflow.2010.03.008

Simmons, H.C., 1977a. The Correlation of Drop-Size Distributions in Fuel Nozzle Sprays—Part I: The Drop-Size/Volume-Fraction Distribution. J. Eng. Power 99, 309. doi:10.1115/1.3446488

Simmons, H.C., 1977b. The Correlation of Drop-Size Distributions in Fuel Nozzle Sprays—Part II: The Drop-Size/Number Distribution. J. Eng. Power 99, 315. doi:10.1115/1.3446489

Song, J.H., Park, I.K., Shin, Y.S., Kim, J.H., Hong, S.W., Min, B.T., Kim, H.D., 2003. Fuel coolant interaction experiments in TROI using a UO2/ZrO2 mixture. Nucl. Eng. Des. 222, 1–15. doi:10.1016/S0029-5493(02)00388-6

Soni, N., 2007. Modeling Of Molten Fuel Coolant Interactions. M. Tech Project, Indian Institute of Technology.

Spencer, B., Gabor, J., Cassulo, J., Kilsdonk, D., 1986. Results of Scoping Experiments on Melt Stream

Breakup and Quench. Proc. Intl ANS/ENS Top. Mtg. ….

Spencer, B.W., Gabor, D., Analysis, R., Division, S., 1986. Effect of boiling regime on melt stream breakup in water.

Theofanous, T.G., Mitkin, V. V., Ng, C.L., Chang, C.-H., Deng, X., Sushchikh, S., 2012. The physics of aerobreakup. II. Viscous liquids. Phys. Fluids 24, 22104. doi:10.1063/1.3680867

Theofanous, T.G., Yuen, W.W., 1995. The probability of alpha-mode containment failure. Nucl. Eng. Des. 155, 459–473.

Tomar, G., Fuster, D., Zaleski, S., Popinet, S., 2010. Multiscale simulations of primary atomization. Comput. Fluids 39, 1864–1874. doi:10.1016/j.compfluid.2010.06.018

Uršič, M., Leskovar, M., Mavko, B., 2012. Simulations of KROTOS alumina and corium steam explosion experiments: Applicability of the improved solidification influence modelling. Nucl. Eng. Des. 246, 163–174. doi:10.1016/j.nucengdes.2011.12.021

Uršič, M., Leskovar, M., Mavko, B., 2011. Improved solidification influence modelling for Eulerian fuel–coolant interaction codes. Nucl. Eng. Des. 241, 1206–1216. doi:10.1016/j.nucengdes.2010.05.001

Vallet, A., Borghi, R., 1999. Modélisation eulerienne de l'atomisation d'un jet liquide. Comptes Rendus l'Académie des Sci. … 1015–1020.

Villermaux, E., 2012. The formation of filamentary structures from molten silicates: Pele's hair, angel hair, and blown clinker. Comptes Rendus Mécanique 340, 555–564. doi:10.1016/j.crme.2012.06.003

Villermaux, E., 2007. Fragmentation. Annu. Rev. Fluid Mech. 39, 419–446. doi:10.1146/annurev.fluid.39.050905.110214

Villermaux, E., Bossa, B., 2009. Single-drop fragmentation determines size distribution of raindrops. Nat. Phys. 5, 697–702. doi:10.1038/nphys1340

Wang, S., Blomquist, C., Spencer, B., 1989. Modeling of thermal and hydrodynamic aspects of molten jet/water interactions. ANS Proc. 1989 Natl. Heat ….

Wolfe, H., Andersen, W., 1964. Kinetics, mechanism, and resultant droplet sizes of the aerodynamic breakup of liquid drops. Downey.

Wu, P., Faeth, G., 1993. Aerodynamic effects on primary breakup of turbulent liquids. At. Sprays.

Wu, P., Ruff, G., Faeth, G., 1991. Primary breakup in liquid-gas mixing layers. At. Sprays.

Yang, H., 1992. Asymmetric instability of a liquid jet. Phys. Fluids A Fluid Dyn.

Zaleski, S., Li, J., Succi, S., 1995. Two-dimensional Navier-Stokes simulation of deformation and breakup of liquid patches. Phys. Rev. Lett. 75, 244–247. doi:10.1103/PhysRevLett.75.244

Zeoli, N., Gu, S., 2006. Numerical modelling of droplet break-up for gas atomisation. Comput. Mater. Sci. 38, 282–292. doi:10.1016/j.commatsci.2006.02.012

RESUME

Lors d'un accident grave dans un réacteur nucléaire (REP ou REB en particulier), le combustible fondu (corium) peut se déverser dans le réfrigérant (eau). L'interaction entre les deux fluides est appelée Interaction Combustible-Réfrigérant. Sous certaines conditions, cette interaction peut conduire à une «explosion de vapeur» qui peut menacer le confinement du réacteur nucléaire. L'ICR est une interaction de caractère multiphasique complexe où divers phénomènes physiques interviennent de manières couplées. Elle débute par une phase de mélange entre les fluides (prémélange), se traduisant par la fragmentation du corium et sa dispersion dans le réfrigérant. Ce processus de fragmentation impacte les échanges thermiques (ébullition et mise en mouvement du fluide environnant (réfrigérant)) et les processus chimiques (oxydation du corium et génération d'hydrogène).

Cette thèse apporte de nouveaux éléments concernant la compréhension physique et la modélisation du phénomène de fragmentation du corium, dont l'objectif principal est d'améliorer la modélisation dans le logiciel de thermohydraulique multiphasique MC3D, développé par l'IRSN. L'étude proposée se base sur l'hypothèse de la modélisation de la fragmentation comme un phénomène multi-échelle avec un découplage entre taux de fragmentation du jet et dimension des gouttes résultantes. Elle suppose un processus de fragmentation qui est le résultat d'une déstabilisation primaire (passage jet -> grosses gouttes) pilotée par les grandes échelles de l'écoulement et d'un processus de déstabilisation secondaire menant à une fragmentation finale dépendante des paramètres plus «locaux» de l'écoulement. Nous avons conjugué notre modélisation avec une méthode de type MUSIG récemment introduite dans le logiciel MC3D. Les gouttes de corium y sont représentées, via un découpage en classes, par plusieurs champs de masse et d'énergie avec des diamètres distincts. Malgré les avancées dans la modélisation de la fragmentation, la compréhension des mécanismes et la caractérisation de la fragmentation des gouttes liquides est encore très imparfaite, particulièrement dans le cas liquide/liquide. Le travail de thèse s'est alors orienté vers l'analyse de ce processus en utilisant le logiciel de simulation GERRIS. L'étude conduit à proposer une nouvelle carte de régimes de fragmentation en configuration liquide/liquide, une compréhension plus approfondie de la dynamique de fragmentation et une analyse sur l'interaction vortex-goutte pilotant la transition entre les régimes.

MOTS CLES

Interaction corium-eau, fragmentation, simulation numérique, instabilité, gouttes, vortex

ABSTRACT

In the case of a severe accident in a nuclear power plant, the molten core may flow into water and interact with it. The consequences of this fuel-coolant interaction (FCI) for the follow-up of the accident may be numerous so the phenomenon needs to be described accurately, one of them called "steam explosion" can lead to the failure of the nuclear reactor containment. FCI is a complex multiphase interaction involving several physical phenomena. The premixing phase of the interaction consists in the fragmentation and dispersion of corium in the coolant pool. This phase is driven by the fragmentation process which modifies heat transfers (coolant boiling dynamics) and chemical reactions (corium oxidation and hydrogen generation).

This thesis brings new elements about the corium jet and droplet breakup with the main goal of improve fragmentation models on the MC3D multiphase code, developed by the IRSN. Our study is based on a multi-scale fragmentation process where the jet fragmentation rate and final droplet dimensions are not coupled themselves. We suppose a fragmentation process resulting from a primary instability (mass transfer within jet and big droplets) depending on the large flow scales and a secondary instability depending on the small flow scales (leading to final droplet breakup). This model has been implemented in MC3D in combination with the MUSIG method recently added to MC3D. In this method, droplets are represented using several classes, each of them with their own droplet diameter, mass and energy fields. Despite new improvements on modeling corium fragmentation, there is still a lack on the comprehension and characterization on the liquid droplet fragmentation, particularly on liquid/liquid configurations. In this thesis, we study in detail droplet breakup using the computational fluid dynamics software GERRIS. As a result, we find a new droplet breakup classification in liquid/liquid configurations, we improve the droplet breakup dynamics comprehension and we analyze the droplet-vortex interaction to determine breakup regime transition.

KEYWORDS

Fuel-Coolant interactions, fragmentation, numerical simulation, instability, drops, vortex